GRAF ENERJİSİ

Feriha ÇELİK



T. C.
BURSA ULUDAĞ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GRAF ENERJİSİ

Feriha ÇELİK
0000-0002-0791-9293

Prof. Dr. İsmail Naci CANGÜL
(Danışman)

DOKTORA TEZİ
MATEMATİK ANABİLİM DALI

BURSA–2021

Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

Doktora Tezi

GRAF ENERJİSİ

Feriha ÇELİK

Bursa Uludağ Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. İsmail Naci CANGÜL (Bursa Uludağ Üniversitesi)

Bu çalışmanın amacı, graf teorinin en önemli uygulama alanlarından birisi olan graf enerjisi konusunda yeni sonuçlar elde etmektir. Graf enerjisi, son 40 yılda ortaya çıkan ve hızla gelişen bir alandır ve lineer cebir metodlarını kullanarak graflar hakkında matematiksel sonuçlar elde etmeye ve bu sonuçlar yardımıyla kimyasal moleküllerin enerjileri hakkında yeni sonuçlar elde etmeye yarar.

Bu tez sekiz bölümden oluşmaktadır. Birinci bölüm giriş bölümü olarak düzenlenmiştir. Temel tanım ve sonraki bölümlerde kullanılacak bazı önemli kavram ve sonuçlar bu bölümde hatırlatılmıştır. İkinci bölümde graflarve grafların enerjileri hakkında kuramsal temellerinden bahsedilmiştir. Üçüncü bölümde tez boyunca kullanılacak olan materyal ve yöntemler hakkında bilgi verilmiştir. Dördüncü bölümde bazı özel graf türleri için spektral polinomlar oluşturulmuş, oluşturulan bu polinomlar için indirgeme bağıntıları geliştirilip bu grafların enerjilerini veren formüller elde edilmiştir. Beşinci bölümde ise, dördüncü bölümde oluşturulan enerji formülleri için indirgeme bağıntıları oluşturulmuş bunun yanında hesaplamaları kolaylaştıracak bazı alternatif enerji indirgeme bağıntıları da verilmiştir. Altıncı bölümde graflar üzerinde yeni birleşim operasyonları, yedinci bölümde ise bir graf için alt bölüm operasyonları tanımlanmış olup bu bölümlerde, elde edilen yeni graflar için grafların polinomlarını, polinomlar için indirgeme bağıntılarını ve grafların enerjilerini veren yeni yöntemler geliştirilmiştir. Son bölüm olan sekizinci bölümde ise elde edilen bulgu ve sonuçlara yer verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: alt bölüm grafı, enerji, graf, köşe birleşim grafı, spektral polinom, spektrum

2021, vi + 79 sayfa.

ABSTRACT

PhD Thesis

GRAPH ENERGY

Feriha ÇELİK

Bursa Uludağ University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Mathematics

Supervisor: Prof. Dr. Ismail Naci CANGUL (Bursa Uludag University)

The aim of this work is to obtain new and original results on graph energy which is one of the most important application areas of graph theory. Graph energy appeared and fastly developed in the last 40 years. By means of linear algebraic methods, we can obtain mathematical values on the graphs and these values help us to comment on the molecular energies of the molecules under study.

This PhD thesis consists of 6 chapters. The first section is organized as the Introduction. Fundamental notions and results which will be needed later on in the thesis are recalled here. In the second chapter, the material and methods used in the thesis are mentioned. In the third chapter, spectral polynomials of some specific graph classes are constructed and recurrence relations for these polynomials are obtained to find some formulae for the energy of these graph classes. In the fourth chapter, recurrence relations for the energy formulae obtained in the third chapter are established and some alternative energy recurrence relations to ease the calculations are given. In the fifth chapter, some new union operations on graphs, in the sixth chapter, subdivision operations for a graph are introduced and in these chapters, new techniques giving the spectral polynomials, their recurrence formulae and graph energy are established.

Key Words: energy, graph, spectral polynomial, spectrum, subdivision graph, vertex union graph

2021, vi + 79 pages.

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Tanıdığım günden bu yana değerli bilgileri ile yoluma ışık olan, bu çalışmanın başından itibaren planlanmasında, yürütülmesinde ve oluşumunda ilgi ve desteğini hiçbir zaman esirgemeyen, her konuda çekinmeden fikrine başvurabildiğim, engin bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım, meslek hayatımda da en büyük rol model aldığım saygıdeğer hocam Prof. Dr. İsmail Naci CANGÜL'e;

hayatımın her evresinde benim yanımda olan, bana olan maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen, saygı ve sevgi kelimelerinin anlamlarını yaşayarak öğreten hayattaki en büyük şansım olan aileme

sonsuz teşekkürler...

Feriha ÇELİK

14/10/2021

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET …….....i
ABSTRACT …….. ii
ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR …….....iii
İÇİNDEKİLER ……... ...iv
SİMGELER DİZİNİ ……. v
ŞEKİLLER DİZİNİ …….. ...vi
1. GİRİŞ ……. 1
2. KURAMSAL TEMELLER……9
3. MATERYAL VE YÖNTEM …….....10
4. GRAFLARIN SPEKTRAL POLİNOMLARI, İNDİRGEME BAĞINTILARI ve ENERJİLERİ.....11
5. GRAFLARDA ENERJİ İNDİRGEME BAĞINTILARI.....29
6. GRAFLARDA BİRLEŞİM ve BİRLEŞİMİN KARAKTERİSTİK POLİNOM ÜZERİNDEKİ ETKİSİ ….....40
7. ALT BÖLÜM GRAFLARININ KARAKTERİSTİK POLİNOMLARI, İNDİRGEME BAĞINTILARI VE ENERJİLERİ.....63
8. BULGULAR, TARTIŞMA VE SONUÇ.....75
KAYNAKLAR.....77
ÖZGEÇMİŞ.....79

SİMGELER DİZİNİ

Simgeler	Açıklama
G	Graf
$V(G)$	G grafının köşe kümesi
$E(G)$	G grafının kenar kümesi
d(u)	u köşesinin derecesi
K_n	n köşeli tam graf
C_n	n köşeli devir grafı
P_n	n köşeli yol grafı
S_n	n köşeli yıldız grafı
$K_{r,s}$	İki parçalı tam graf
$Pol(G)$	G grafının karakteristik polinomu
$S(G)$	G grafının spektrumu
$E(G)$	G grafının enerjisi
$G_1 \bigvee_v G_2$	G_1 ve G_2 graflarının köşe birleşim grafı
$G_1 \bigvee_v^e G_2$	G_1 ve G_2 graflarının bir köşede kenar birleşim grafı
$S(G)$	G grafının alt bölüm grafı
$S^r(G)$	G grafının r-alt bölüm grafı

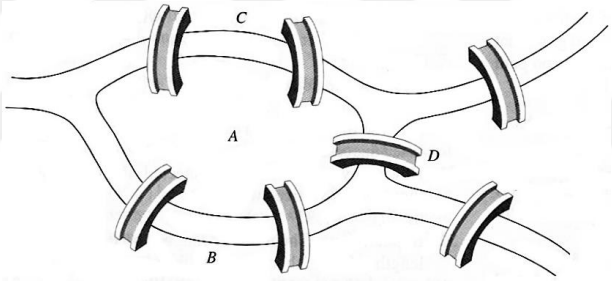
ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1. Pregel Nehri 1
Şekil 1.2. Königsberg grafı 1
Şekil 1.3. 7 köşeli ve 10 kenarlı graf örneği.....2
Şekil 1.4. Basit bir graf.....3
Şekil 1.5. Basit olmayan bir graf.....3
Şekil 1.6. Basit olmayan bir graf.....3
Şekil 1.7. G ve $\bar{G}$ grafları.....4
Şekil 1.8. $2-$düzenli graf 4
Şekil 1.9. Bir G grafı ve bu grafa ait A komşuluk matrisi.....5
Şekil 1.10. P_5 patika grafı.....6
Şekil 1.11. C_3, C_4, C_5 devir grafları.....6
Şekil 1.12. S_6 yıldız grafı.....7
Şekil 1.13. K_3, K_4, K_5 tam grafları.....7
Şekil 1.14. $K_{2,3}$ ve $K_{3,3}$ iki parçalı tam grafı.....8
Şekil 1.15. Bağlantılı graf örnekleri.....8
Şekil 1.16. Bağlantısız graf örnekleri.....8
Şekil 6.1. G_1, G_2 ve $G_1 \vee_v G_2$ köşe birleşim grafı 41
Şekil 6.2. K_5 ve $K_5 \vee_v K_5$ köşe birleşim grafı 42
Şekil 6.3. S_n ve S_n graflarında merkez köşe birleşim grafı 48
Şekil 6.4. S_n ve S_n grafları için merkez dışında köşe birleşim grafı.....49
Şekil 6.5. P_n ve $P_n \vee_v P_n$ köşe birleşim grafı 53
Şekil 6.6. G_1, G_2 ve $G_1 \vee_v^e G_2$ grafları 54
Şekil 6.7. K_5 ve $K_5 \vee_v^e K_5$ grafı 55
Şekil 6.8. S_n ile v merkez köşede kenar birleşim grafı $S_n \vee_v^e S_n$.....59
Şekil 6.9. S_n ve v uç köşede kenar birleşim grafı $S_n \vee_v^e S_n$ 60
Şekil 6.10. P_n ve $P_n \vee_v^e P_n$ grafı.....62
Şekil 7.1. Bir G grafı ve bu grafın $S(G)$ alt bölüm grafı.....63
Şekil 7.2. P_n ve $S(P_n)$ grafı.....64
Şekil 7.3. S_n ve S_n'in alt bölüm grafı $S(S_n)$.....65

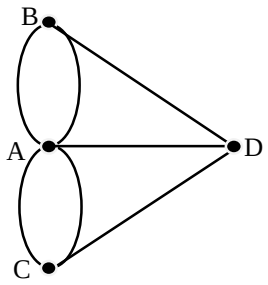
1. GİRİŞ

Graf Teori, 1736 yılında ünlü matematikçi Leonhard Euler'in (1707-1783) yazdığı "Königsberg Köprü Problemi" adlı makale ile ortaya atıldığı düşünülse de literatürdeki bazı kaynaklar Graf Teorinin ilk bilinen örneklerinin Pisagor okuluna kadar uzandığını göstermektedir (M.Ö. 300).

Königsberg kasabasının içinden akan Pregel nehrinin ortasında Şekil 1.1.'deki gibi bir ada ve bir yarımada bulunmaktadır. Bu adayı ve yarımadayı birbirine ve kıyılara bağlayan köprüleri birer kez kullanma koşulu ile, başlanılan yere geri dönebilmeyi amaçlayan bir problem ortaya atılmış ve çözümü yıllarca tartışılmıştır. Leonhard Euler (1707-1783) tarafından yayınlanan bir makalede, yıllarca tartışılan bu Königsberg Köprü Probleminin bir çözümünün olmadığını gösteren bir teori yer almaktadır.



Şekil 1.1. Pregel nehri



Şekil 1.2. Königsberg grafı

Graflar günlük hayatta karşılaşılan pek çok problemin birer matematiksel modellemesi olup matematiğin çeşitli alanlarında var olan teorileri kullanarak üzerinde çalışılan problemlerin çözümlerinde daha kolay fikir yürütebilmeye olanak tanır. Günümüzde

graflara birçok bilim dalında sıklıkla başvurulmakta ve birçok problemin çözümünde graflar kullanılmaktadır. Bunlar arasında graflara başvurulan bazı problemler, kimyasal atom ve moleküller, dört renk problemi, pazarlamacı problemi, tesisat problemi, birçok , optimizasyon problemleri, kişi-toplum arası ilişkileri inceleyen problemlerdir.

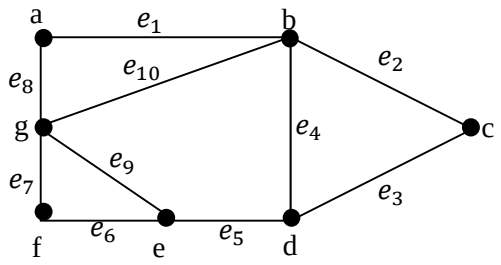
Aşağıda bu tezde kullanılacak olan bazı temel kavramlar tanımlanacaktır. Bu kavramlarla ilgili daha geniş bilgi için Chen (1976), Biggs ve ark. (1986), Foulds (1992), Harary (1994), West (1996), Bollobas (1998), Berge (2001), Golumbic ve Hartman (2005), Bondy ve Murty (2008), Harris ve ark. (2008), Balakrishnan ve Ranganathan (2012), Çevik (2010) kaynaklarına başvurulabilir.

1.1. Tanım. ***Köşe (vertex)*** denilen elemanlardan oluşan bir küme ile adına ***kenar (edge)*** denilen, her biri iki köşeyi birleştiren, elemanlardan oluşan ikinci bir kümenin elemanlarının oluşturduğu sıralı ikililer kümesine bir ***graf (graph)*** denir.

Bir $\boldsymbol{G}$ grafını çizebilmek için grafın köşelerinden oluşan $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{G})$ kümesi ile bu köşelerin birleştirilmesiyle oluşan $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{G})$ kenarların kümesini bilmek gerekir. Bilinen bu kümeler ile $\boldsymbol{G}$ grafı

$$G=(V(G),E(G))$$

şeklinde gösterilir. Biz bu grafı $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{V},\boldsymbol{E})$ ile göstereceğiz.



Şekil 1.3. 7 köşeli ve 10 kenarlı bir graf örneği

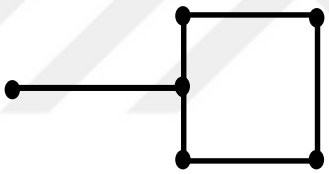
Şekil 1.3.'de verilen graf örneğinin köşe kümesi $V(G) = \{a, b, c, d, e, f, g\}$ ve kenar kümesi $E(G) = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6, e_7, e_8, e_9, e_{10}\}$'dir.

1.2. Tanım. $V(G)$ kümesinin eleman sayısına ***mertebe (order),*** $E(G)$ kümesinin eleman sayısına ise ***boyut (size)*** denir.

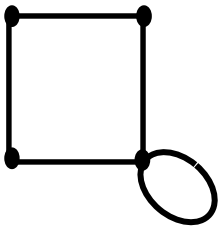
1.3. Tanım. Bir G grafında bir u köşesini uç kabul eden tüm kenarların sayısına bu u köşesinin ***derecesi (degree)*** denir ve $\boldsymbol{deg(u)}$ ile gösterilir. Örneğin Şekil 1.3.'de $deg(a) = 2$ ve $deg(b) = 4$*'tür.*

1.4. Tanım. Başlangıç ve bitiş köşeleri aynı olan bir kenara ***döngü (loop)*** adı verilir.

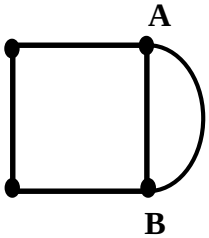
1.5. Tanım. Herhangi iki köşesi arasında birden fazla kenara sahip olmayan ve döngü içermeyen graflara ***basit (simple) graf*** denir.



Şekil 1.4. Basit bir graf



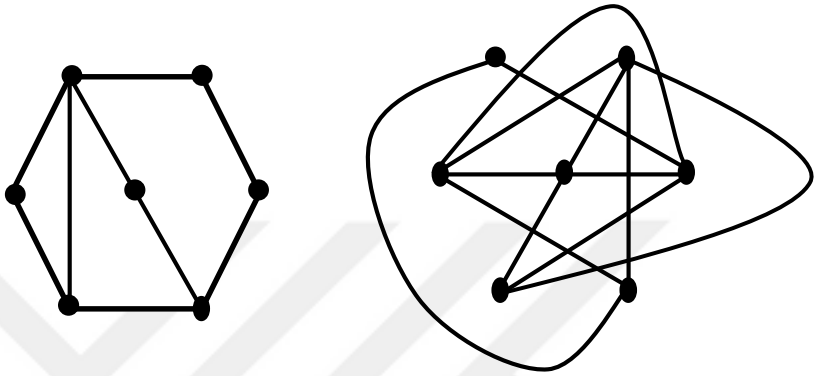
Şekil 1.5. Basit olmayan bir graf



Şekil 1.6. Basit olmayan bir graf

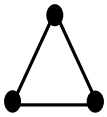
Yukarıda verilen Şekil 1.4.'deki graf basit graf iken, Şekil 1.5.'teki graf, içerdiği döngüden dolayı basit graf değildir. Şekil 1.6.'daki grafta da A ile B köşeleri arasında iki kenar bulunduğu için basit graf değildir.

1.6. Tanım. Bir G grafında $\forall\, u,v \in V(G)\ için\ uv \notin E(G)$ olacak şekildeki uv kenarlarının oluşturduğu grafa ***tümleyen* (complement) *graf*** denir ve $\bar{G}$ ile gösterilir.



Şekil 1.7. G ve $\bar{G}$ grafları

1.7. Tanım. Bir G grafında $\forall\, u \in V(G)$ için tüm $deg(v)$ değerleri eşit ise bu grafa ***düzenli (regular) graf*** denir. Eğer $deg(v) = n$ ise grafa ***n-düzenli (n-regular)*** de denilir.



Şekil 1.8. 2-düzenli graf

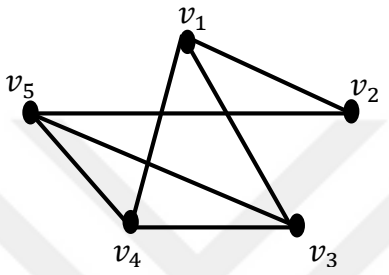
1.8. Tanım. Bir $e \in E(G)$ alındığında, bu e kenarı, $u \in V(G)$ köşesi ile birleşiyorsa *e kenarı u köşesi ile* ***bitişiktir (incident)*** denir.

1.9. Tanım. Aralarında en az bir kenar bulunan köşelere ***komşu (adjacent) köşeler***, ortak bir ucu bulunan kenarlara ise ***komşu kenarlar*** denir. Örneğin $u,v \in V(G)$ için $uv \in E(G)$ ise u ile v köşeleri komşu köşelerdir. Eğer $uv \notin E(G)$ ise u ile v'ye ***komşu olmayan (non-adjacent) köşeler*** denir.

1.10. Tanım. Köşeleri $v_1, v_2, v_3, \dots, v_n$ olan n köşeli bir G grafında

$$[A]_{i,j} = \begin{cases} 1, & v_i \; ve \; v_j \; komşu \; (adjacent) \; köşeler \; ise \\ 0, & diğer \; durumlarda \end{cases}$$

olacak şekilde $n \; x \; n$ tipinde yazılan $[\boldsymbol{A}]_{\boldsymbol{i,j}}$ kare matrisine ***G grafının komşuluk (adjacency) matrisi*** denir ve ***A*** ile gösterilir.



$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Şekil 1.9. Bir G grafı ve bu grafa ait A komşuluk matrisi

1.11. Tanım. A matrisi bir G grafına ait komşuluk matrisi olmak üzere $|A - \lambda I_n| = 0$ ifadesinin kökleri olan $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ sayılarına A matrisinin özdeğerleri denilir. Eşitliğin sol tarafı ile elde edilen polinoma ***G grafının karakteristik polinomu*** denir.

1.12. Tanım. Bir G grafına ait komşuluk matrisinin tüm özdeğerlerinin kümesine ***G grafının spektrumu*** denir.

Bir G grafının karakteristik polinomuna ***spektral polinom*** da denir.

1.13. Tanım. Bir G grafının komşuluk matrisinin özdeğerleri $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ olmak üzere bu özdeğerlerin mutlak değerlerinin toplamına ***G grafının enerjisi*** denir ve $\boldsymbol{E(G)}$ ile gösterilir.

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

şeklindedir.

Şimdi tez boyunca sıkça kullanılacak olan bazı özel graf türlerini hatırlayalım:

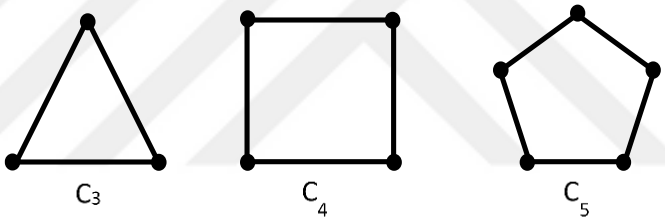
1.14. Tanım. Bir G grafının bazı köşeleri $v_1, v_2, \dots, v_t \in V$ olsun. $i = 1,2, \dots, t$ için $v_i v_{i+1} \in E$ dizisine G grafının bir ***yolu (walk)*** denir. Tüm köşeleri farklı olan yola ***patika (path)*** denir. n köşeli bir patika $\boldsymbol{P_n}$ ile gösterilir.



Şekil 1.10. $\boldsymbol{P_5}$ patika grafı

Tez boyunca patika için n köşe sayısı olmak üzere $n \geq 2$ alınacaktır.

1.15. Tanım. Başlangıç ve bitiş noktaları aynı köşeye denk gelen n köşeye sahip bir G grafı kapalı bir patika ise bu grafa ***devir (cycle) graf*** denir ve $\boldsymbol{C_n}$ ile gösterilir.

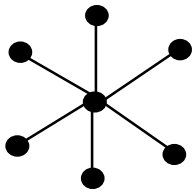


Şekil 1.11. $\boldsymbol{C_3, C_4, C_5}$ devir grafları

Tez boyunca devir graf için n köşe sayısı olmak üzere $n \geq 3$ alınacaktır. Çünkü $n = 1$ ve $n = 2$ için $C_n = P_n$'dir.

1.16. Tanım. Tüm köşelerin merkezdeki tek bir köşeye bağlandığı grafa ***yıldız (star) graf*** denir ve $\boldsymbol{S_n}$ ile gösterilir.

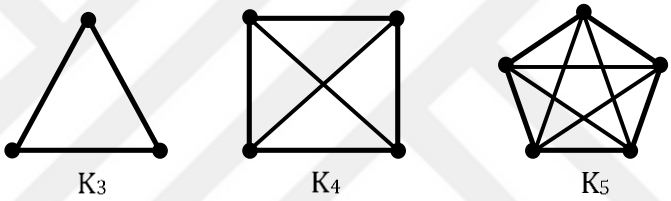
S_n grafında merkezdeki köşenin derecesi $n - 1$, diğer köşelerin dereceleri ise 1 olur.



Şekil 1.12. S_6 yıldız grafı

Tez boyunca yıldız graf için n köşe sayısı olmak üzere $n \geq 4$ alınacaktır. Çünkü $n = 1,2,3$ için $S_n = P_n$'dir.

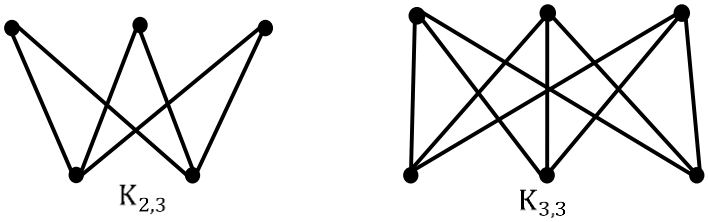
1.17. Tanım. Bir G grafında her köşe çifti arasında bir kenar bulunuyorsa bu grafa ***tam (complete) graf*** denir ve K_n ile gösterilir.



Şekil 1.13. K_3, K_4, K_5 tam grafları

Tez boyunca tam graf için n köşe sayısı olmak üzere $n \geq 4$ alınacaktır. Çünkü $n = 1$ ve $n = 2$ için $K_n = P_n$ ve $n = 3$ için $K_n = C_n$'dir.

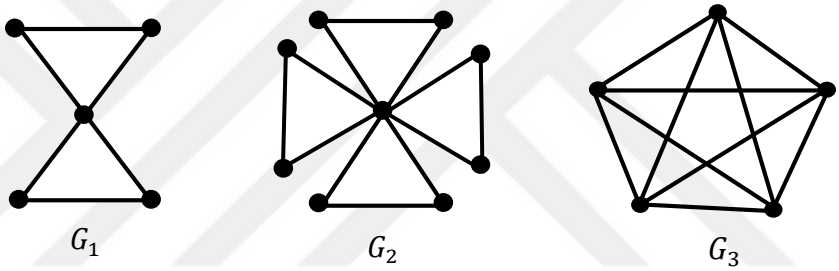
1.18. Tanım. Bir $G(V, E)$ grafında, V kümesi A ve B gibi iki ayrık alt kümeye ayrıldığında E kenar kümesinden alınan her bir kenarın bir köşesi A kümesinde diğeri de B kümesinde oluyorsa bu graflara ***iki parçalı (bipartite) graf*** denir. Eğer A kümesindeki her bir köşe B kümesindeki her bir köşeyle birleşiyorsa bu grafa ***iki parçalı tam (complete bipartite) graf*** denir ve A kümesinin eleman sayısı r ve B kümesinin eleman sayısı s olmak üzere tam iki parçalı graf $K_{r,s}$ ile gösterilir.



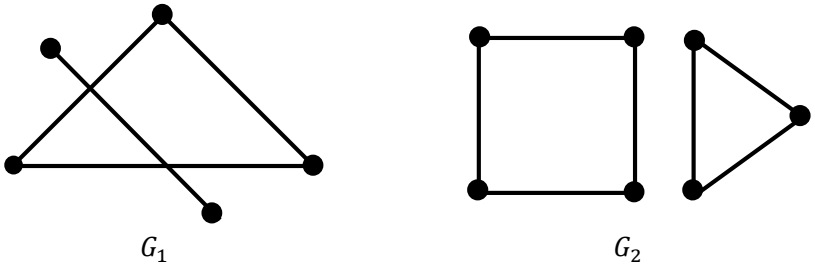
Şekil 1.14. $K_{2,3}$ **ve** $K_{3,3}$ iki parçalı tam grafı

1.19. Tanım. u ve v, G grafının iki köşesi olsun. Eğer u'dan v'ye giden bir patika bulunabilirse u ve v köşelerine G grafında ***bağlantılı köşeler*** denir.

Bir G grafında her köşe çifti bağlantılı bir köşe çifti ise G grafına ***bağlantılı graf*** denir. Bağlantılı olmayan grafa ise ***bağlantısız graf*** denir.



Şekil 1.15. Bağlantılı graf örnekleri



Şekil 1.16. Bağlantısız graf örnekleri

2. KURAMSAL TEMELLER

Graflar, matematiğin ve belki de birçok bilim dalının en hızlı büyüyen ve genişleyen dallarından birisidir. Bunun en başlıca nedeni grafları neredeyse tüm bilimlere uygulayabilmemiz ve çok değerli bilgilere kolayca ulaşabilmemizdir. Sosyal bilimlerden pozitif bilimlere, mühendislikten ulaştırmaya, enerjiden kimyaya, fizikten biyolojiye tüm dallarda graflardan faydalanarak sonuçlar elde etmek mümkündür. Basitçe bunu açıklayacak olursak bir graf köşe ve kenarlardan oluşan bir şekildir. Bu köşeleri üzerinde çalıştığımız nesneleri modellemede kullanabiliriz. Örneğin bir moleküldeki atomları birer köşe ile modellemek oldukça yaygın bir uygulamadır. Bir ulaştırma probleminde şehirler köşelerle modellenebilir. Tüm alanlarda benzer modellemeler yapılabilir. Köşeler arasındaki kenarlar ise bu köşelere karşılık gelen nesneler arasındaki ilişkileri yansıtır. Örneğin bir moleküldeki atomlardan birbirine bir kimyasal bağla bağlı olanları, model graftaki köşeler arasına bir kenar çizerek temsil edebiliriz. Ya da ulaştırma probleminde aralarında bir yol mevcut olan şehirlere karşılık gelen köşeler arasına bir kenar çizeriz. Hayattaki birçok kavramda bu tür ilişkiler mevcut olduğundan grafların uygulama alanları da hızla artmaktadır.

Modellediğimiz bir graf, matematikçiler için kolayca çalışılabilecek bir nesnedir. Bu grafı birçok matematiksel yöntem yardımıyla çalışabiliriz. Örneğin bir grafı 0 ve 1'lerden oluşan bir matrisle birebir bir şekilde ifade edebiliriz. Bu sayede bilgisayar dillerinden uygun olanları kullanabilir ve bu tür bir program yardımıyla grafın birçok parametresini hesaplayabiliriz. Küçük boyutlu graflarda el ile yapılabilecek bu işlemler, büyük boyutlu graflarda, örneğin networklerde ve sosyal medya ağlarında, bu tür programların ve yüksek hızlı işlemcilerin kullanımını gerektirmektedir.

Bir grafın matrislerle çalışılması fikri yaklaşık 40 yıl önce graf enerjisini tanımlayan Ivan Gutman tarafından Gutman (1978) makalesinde tanımlanmıştır. Gutman, binlerce atıf alan bu makalesinde bir grafın komşuluk matrisini tanımlamış ve bu matrisin özdeğerlerini lineer cebir yöntemleriyle hesaplayarak bu özdeğerlerin mutlak değerlerinin toplamı ile molekülün kimyasal enerjisi arasında bir ilişki bulunduğunu göstermiştir. Bu klasikleşmiş tanım, zaman içinde farklı graf matrislerinin kullanılmasıyla yüzün üzerinde farklı graf enerjisi kavramının tanımlanmasına ve çalışılmasına neden olmuştur.

Bu tezde Gutman'ın tanımladığı klasik enerji tanımı çalışılmış ve birçok yeni özellikleri elde edilmiştir. Çeşitli sık kullanılan graf sınıfları için graf enerjisinin hesaplanması, bu enerji değerleri arasında ilişkilerin kurulması esas hedef olarak belirlenmiştir. Büyük boyutlu bazı özel graf çeşitlerinin enerjilerini daha küçük boyutlu benzer grafların enerjileri yardımıyla hesaplamayı mümkün kılan indirgeme bağıntıları bu tezin en önemli sonuçları arasındadır. Ayrıca graflarda birleşim işleminin graf enerjisine etkisi, karakteristik polinom yardımıyla elde edilmiştir. Kimyada önemli uygulamaları olan alt bölüm graflarının karakteristik polinomları oluşturulmuş ve bunlar genel formüllerle ifade edilmiştir. Bu polinomlar yardımıyla alt bölüm graflarının enerjileri, grafın enerjisiyle ilişkilendirilmiştir.

3. MATERYAL ve YÖNTEM

Matematiğin en önemli alt dallarından biri olan lineer cebir oldukça geniş bir çalışma alanına sahiptir. Matematiğin uygulama alanı bulduğu birçok bilim dalında da lineer cebir yöntemlerine sıklıkla başvurulmaktadır.

Belirli kurallar çerçevesinde oluşturulan bir matrisin, determinantı yardımıyla elde edilen özdeğerleri, üzerinde çalışılan bir sistemin özel değerlerde nasıl davrandıklarını belirlemede önemli bir yer tutmaktadır. Örneğin bu değerler sisteme ait özel bir frekans değeri, dalgaların girişimi veya kuvvet dengesinin sağlandığı bir durum olabileceği gibi sisteme ait özel bir enerji türü de olabilir. Eğer verilen matris bir graf matrisi ise bu matrisin özdeğerlerinin mutlak değerleri toplamı, graf enerjisi adı verilen ve birçok uygulama alanı olan bir kavramı ortaya çıkarmaktadır. Bununla birlikte farklı graf matrislerine bağlı olarak farklı graf enerjileri de tanımlanmaktadır.

Bu tezde literatürde bilinen bazı özel graf türleri için ve tezde yeni tanımlanan graflar üzerindeki bazı operasyonlar için öncelikle grafların komşuluk matrisleri oluşturulmuştur. Ardından ise lineer cebirde yer alan determinantın özellikleri, satır-sütun operasyonları gibi işlemlerle oluşturulan yeni graf türlerinin karakteristik polinomları, bu polinomların kökleri yani özdeğerleri hesaplanmış, özel indirgeme bağıntıları oluşturulmuş böylece enerjisi hesaplanmak istenen graf sistemleri için birçok kolaylaştırıcı sonuç elde edilmiştir.

4. GRAFLARIN SPEKTRAL POLİNOMLARI, İNDİRGEME BAĞINTILARI ve ENERJİLERİ

Grafların uygulamada kullanılan önemli özelliklerinden biri, üzerinde çalışılan sistemin enerjisi hakkında bilgi veriyor oluşudur. Graf enerjisi olarak adlandırılan bu terim, ilk olarak 1930'larda, bir organik molekül sınıfı için, içinde sistemin enerjisini de bulunduran Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümlerini bulma arayışı içinde olan Alman Matematikçi Erich Hückel tarafından ortaya atılmıştır. 1978'li yıllarda ise Ivan Gutman sadece moleküler graflar için tanımlı olan enerji kavramını tüm graflara genelleştirmiştir.

Bu bölümde tez boyunca sıklıkla kullanılacak olan $G = P_n, S_n, K_n, C_n$ ve $K_{m,n}$ graf türleri için bu grafların spektral polinomları verilmiş, bu polinomlar kullanılarak spektrumlarına geçilmiş ve spektrumları kullanarak da grafların enerji bağıntıları oluşturulmuştur. Bununla birlikte bu polinomların sağladıkları indirgeme bağıntılarına da yer verilmiştir.

4.1. Grafların Karakteristik Polinomları

$G(V, E)$ grafı, döngü ve çoklu kenar içermeyen n boyutlu basit ve bağlantılı bir graf olsun. $v_1, v_2, v_3, \dots, v_n \in V(G)$ için G grafının $n \times n$ tipindeki komşuluk matrisi

$$[A]_{i,j} = \begin{cases} 1, & v_i \; ve \; v_j \; komşu \; (adjacent) \; köşeler \; ise \\ 0, & diğer \; durumlarda \end{cases}$$

olacak şekilde oluşturulur. Bu oluşturulan A matrisi için $|A - \lambda I_n| = 0$ denkleminin kökleri G grafının özdeğerlerini verirken eşitliğin solundaki determinantın açık hali ise λ'ya bağlı, derecesi n olan bir polinom vermektedir. Bu polinoma spektral polinom, polinomun köklerinin oluşturduğu kümeye ise grafın spektrumu denir. Spektral polinom *Pol(G)* ile spektrum ise $S(G)$ ile gösterilir.

Literatürde birçok özelliği iyi bilinen $G = K_n$, S_n ve $K_{m,n}$ graflarının karakteristik polinomlarını veren teorem aşağıda verilmiştir (Brouwer ve Haemers 2012).

Lemma 4.1.1. [Çelik 2016] $G = K_n$, S_n ve $K_{m,n}$ graflarının karakteristik polinomları

$$Pol(G) = \begin{cases} (-1)^n(\lambda+1)^{n-1}(\lambda-n+1), & G = K_n, \\ (-\lambda)^{n-2}(\lambda^2-n+1), & G = S_n, \\ (-1)^{m+n}\lambda^{m+n-2}(\lambda^2-mn), & G = K_{m,n} \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. A komşuluk matrisi oluşturulan $G = K_n$, S_n ve $K_{m,n}$ grafları için $|A - \lambda I_n|$ determinantına lineer cebirin uygun satır-sütun işlemleri uygulanılarak istenilen sonuca kolayca ulaşılmaktadır.

Sonuç 4.1.2. $G = K_n$, S_n ve $K_{m,n}$ graflarının spektrumları

$$S(G) = \begin{cases} \{(-1)^{n-1}, n-1\}, & G = K_n, \\ \{0^{n-2}, \mp\sqrt{n-1}\}, & G = S_n, \\ \{0^{m+n-2} \mp \sqrt{mn}\}, & G = K_{m,n} \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. Bir G grafının karakteristik polinomunun köklerinin oluşturduğu kümeye o grafın spektrumu denildiği daha önce belirtilmiştir. Dolayısıyla Lemma 4.1.1.'de verilen polinomların köklerinin oluşturduğu kümenin, istenilen sonucu verdiği açıktır.

Spektrumlarının elemanları, yalnızca trigonometrik ifadeler cinsinden yazılabilen P_n ve C_n grafları için bu grafların karakteristik polinomları aşağıda verilmiştir.

Lemma 4.1.3. [Çelik 2016, Çelik ve Cangül 2017] P_n yol grafının karakteristik polinomu

$$Pol(P_n) = \begin{cases} \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}} (-1)^k \binom{n-k}{k} \lambda^{n-2k}, & n\ çift\ sayı, \\ \sum_{k=0}^{\frac{n-1}{2}} (-1)^{k+1} \binom{n-k}{k} \lambda^{n-2k}, & n\ tek\ sayı \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. P_n n köşeli bir yol grafı olmak üzere bu graf için A komşuluk matrisi oluşturulup $|A - \lambda I_n|$ determinantı için gerekli satır-sütun işlemleri yapıldığında istenilen sonuca ulaşılmaktadır.

Lemma 4.1.3.'de bulunan $Pol(P_n)$ polinomunun köklerinin

$$\lambda_i = 2\,cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right) \qquad i = 1, 2, 3, \dots, n$$

şeklinde olduğu iyi bilinen bir sonuçtur (Brouwer ve Haemers 2012, Li ve ark. 2012). Dolayısıyla P_n polinomunun spektrumu

$$S(P_n) = \left\{\lambda_i : \lambda_i = 2\,cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right), \quad i = 1, 2, 3, \dots, n\right\}$$

şeklindedir.

Lemma 4.1.4. [Çelik 2016] $n \geq 3$ için C_n devir grafın karakteristik polinomu

$$Pol(C_n) = \begin{cases} \left(\sum_{k=0}^{\frac{n-1}{2}} (-1)^k T(n,k) \lambda^{n-2k} - 2\right) + 2(-1)^{\frac{n}{2}}, & n\ çift\ sayı, \\ \left(\sum_{k=0}^{\frac{n-1}{2}} (-1)^{k+1} T(n,k) \lambda^{n-2k}\right) + 2, & n\ tek\ sayı \end{cases}$$

şeklindedir. Burada $T(n,k)$ sayısı, Lucas (Cardan) polinomunun katsayıları $(OEİS\ A034807)$ olmak üzere

$$T(n,0) = 1$$

ve

$$T(n,k) = \binom{n-k}{k} + \binom{n-k-1}{k-1} = \frac{n(n-k-1)!}{(n-2k)!\,k!}, \qquad k \leq \frac{n}{2}$$

olarak tanımlanmaktadır.

İspat. C_n grafının karakteristik polinomunu bulmak için tümevarım uygulanarak istenilen sonuca ulaşılmaktadır. Bulunan polinom incelendiğinde katsayıları $OEİS\ A034807$'de verilen Lucas (Cardan) polinomunun katsayıları ile aynı olduğu görülmektedir. Gerekli düzenlemeler ile istenilen sonuca kolayca ulaşılmaktadır.

Lemma 4.1.4.'de bulunan $Pol(C_n)$ polinomunun köklerinin

$$\lambda_i = 2\,cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right) \qquad i = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

şeklinde olduğu iyi bilinen bir sonuçtur (Brouwer ve Haemers 2012, Li ve ark. 2013). Dolayısıyla C_n polinomunun spektrumu

$$S(C_n) = \left\{\lambda_i : \lambda_i = 2\,cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right), \quad i = 1, 2, 3, \dots, n-1\right\}$$

şeklindedir.

Örnek 4.1.5. K_5 tam grafı için bu grafın polinomunu ve spektrumunu belirleyelim.

$n = 5$ için K_n tam grafının karakteristik polinomu ve spektrumu Lemma 4.1.1. ve Sonuç 4.1.2. gereği

$$Pol(K_5) = -(\lambda+1)^4(\lambda-4) \text{ ve } S(K_5) = \{-1^4, 4\}$$

şeklindedir.

Örnek 4.1.6. S_7 yıldız grafı için bu grafın polinomunu ve spektrumunu belirleyelim.

$n = 7$ için S_n yıldız grafının karakteristik polinomu ve spektrumu Lemma 4.1.1. ve Sonuç 4.1.2. gereği

$$Pol\ (S_7)\ =\ (-\lambda)^5\ (\lambda^2 - 6) \text{ ve } S(S_7) = \{\ 0^5, \mp\sqrt{6}\}$$

olarak bulunur.

Örnek 4.1.7. $K_{3,2}$ tam iki parçalı graf için bu grafın polinomunu ve spektrumunu bulalım.

$m = 3, n = 2$ için $K_{m,n}$ tam iki parçalı grafın karakteristik polinomu ve spektrumu Lemma 4.1.1. ve Sonuç 4.1.2. gereği

$$Pol\ (K_{3,2}) =\ (-1)^5 \cdot \lambda^3 \cdot (\lambda^2 - 6) \text{ ve } S\big(K_{3,2}\big) = \{\ 0^3, \mp\sqrt{6}\}$$

olarak belirlenir.

Örnek 4.1.8. P_6 yol grafı için bu grafın polinomunu bulalım.

$n = 6$ için P_n yol grafının karakteristik polinomu Lemma 4.1.3. gereği

$$\begin{aligned} Pol\ (P_6) &= \sum_{k=0}^{3} (-1)^k \binom{6-k}{k} \lambda^{6-2k} \\ &= \lambda^6 - 5\lambda^4 + 6\lambda^2 - 1 \end{aligned}$$

olarak bulunur.

Örnek 4.1.9. C_5 devir grafı için bu grafın polinomunu belirleyelim.

$n = 5$ için C_n devir grafının karakteristik polinomu Lemma 4.1.4. gereği

$$Pol\ (C_5) = \left(\sum_{k=0}^{2}(-1)^{k+1}T(5,k)\lambda^{5-2k}\right) + 2$$
$$= -\lambda^5 + 5\lambda^3 - 5\lambda + 2$$

olarak belirlenir.

4.2. Karakteristik Polinomların İndirgeme Bağıntıları

Bir grafın enerjisini hesaplayabilmek için o grafın komşuluk matrisinden gelen özdeğerlerinin mutlak değerleri alınarak bu verilerin toplanması gerektiği Tanım 1.13.'de verilmiştir. Özdeğerlerinin hesaplanmasında oldukça kullanışlı bir yöntem olarak geliştirilen, kökleri bu özdeğerleri veren karakteristik polinomlar graf teoride önemli bir yer tutar. Bu bölümde karakteristik polinomları bilinen graflar ile köşe sayısı daha fazla olan aynı tür graflar arasında ilişkiler verilecektir (Çelik 2016).

İlk olarak K_n tam grafı için *Pol(K_n)* polinomunun sağladığı indirgeme bağıntısı verilecektir.

Teorem 4.2.1. K_n tam grafı için *Pol(K_n)* polinomunun sağladığı indirgeme bağıntısı,

$$Pol(K_n) = -\lambda\ Pol(K_{n-1}) - (n-1)(-\lambda - 1)^{n-2}, \quad n \geq 3$$

şeklindedir. Bu polinoma gerekli düzenlemeler yapıldığında

$$Pol(K_n) = -(\lambda + n - 1)Pol\ (K_{n-1}) - (n-1)(\lambda + 1)Pol\ (K_{n-2})$$

eşitliği elde edilir.

İspat. n köşeli bir K_n tam grafının komşuluk matrisi,

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{n\times n}$$

olup köşegeninin elemanları 0, diğer tüm elemanlarının 1 olduğu $n \times n$ tipinde bir kare matristir. Dolayısıyla

$$Pol(K_n) = |A - \lambda I_n| = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{n\times n}$$

şeklindedir. Bu determinant birinci sütuna göre açılırsa

$$= -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)} - (n-1) \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)}$$

$$= -\lambda Pol(K_{n-1}) - (n-1) \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)} \qquad (\mathbf{4.1})$$

elde edilir. Son determinanttaki birinci satır -1 ile çarpılıp diğer satırlara eklenirse

$$\begin{vmatrix} (-1-\lambda) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (-1-\lambda) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & (-1-\lambda) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & (-1-\lambda) \end{vmatrix}_{(n-2)\times(n-2)}$$

determinantı elde edilir ve bu determinantın değeri olan $(-1-\lambda)^{n-2}$ değeri (4.1)'de yerine yazıldığında

$$Pol(K_n) = -\lambda\, Pol(K_{n-1}) - (n-1)(-\lambda-1)^{n-2}$$

ifadesinin elde edildiği kolayca görülür.

Benzer şekilde yukarıdaki indirgeme bağıntısına gerekli düzenlemeler yapıldığında aşağıdaki bağıntı da elde edilebilir:

Sonuç 4.2.2. K_n grafının özdeğerlerini kök kabul eden $Pol(K_n)$ polinomunun indirgeme bağıntısı

$$Pol(K_n) = -(\lambda+n-1)Pol\,(K_{n-1}) - (n-1)(\lambda+1)Pol\,(K_{n-2})$$

şeklindedir.

Bir sonraki teoremde ise S_n yıldız grafı için indirgeme bağıntısı oluşturulacaktır.

Teorem 4.2.3. S_n yıldız grafı için $Pol(S_n)$ polinomunun sağladığı indirgeme bağıntısı

$$Pol(S_n) = -\lambda\, Pol(S_{n-1}) - (-\lambda)^{n-2}, \qquad n \geq 4$$

şeklindedir.

İspat. n köşeli bir S_n tam grafının komşuluk matrisi

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{n\times n}$$

olup, $n \times n$ tipinde bir matristir. Bu matriste $a_{nn} = 0$ olup n. satır ve n. sütundaki diğer tüm elemanlar 1 sayısına eşit iken diğer tüm elemanlar da 0'a eşittir. Dolayısıyla

$$Pol(S_n) = |A - \lambda I_n| = \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & -\lambda & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & -\lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{n\times n}$$

şeklindedir. Bu determinant birinci sütuna göre açılırsa

$$= -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & -\lambda & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & -\lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)} + (-1)^{n+1} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -\lambda & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & -\lambda & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)}$$

İkinci kısımda elde edilen determinant her seferinde 1. sütuna göre açılıp bu işlem 3×3 tipindeki determinant elde edilene kadar tekrarlanırsa

$$= -\lambda\, Pol(S_{n-1}) + (-1)^{n+1}[(-\lambda)^{n-4}(-\lambda)^{n-4}(-\lambda)^2]$$

bağıntısı elde edilir. Uygun düzenlemeler yapılarak

$$Pol(S_n) = -\lambda Pol(S_{n-1}) - 1(-\lambda)^{n-2}, \qquad n \geq 4$$

olduğu kolayca görülür.

Üçüncü olarak $K_{m,n}$ tam iki parçalı graf için $Pol(K_{m,n})$ polinomunun sağladığı indirgeme bağıntısı aşağıdaki teoremde verilecektir.

Teorem 4.2.4. $K_{m,n}$ tam iki parçalı graf için $Pol(K_{m,n})$ polinomunun sağladığı indirgeme bağıntısı

$$Pol(K_{m,n}) = -\lambda Pol(K_{m-1,n}) - n(-\lambda)^{m+n-2} \qquad m > 1$$

ve

$$Pol(K_{1,n}) = -\lambda Pol(K_{1,n-1}) - (-\lambda)^{n-1} \qquad m = 1$$

olacak şekilde yazılabilir.

İspat. $m = 1$ için $K_{1,n}$ grafı S_{n+1} yıldız grafı ile $K_{1,n-1}$ grafı da S_n yıldız grafı aynı yapıya sahiplerdir. Dolayısıyla Teorem 4.2.3.'de gerekli düzenlemeler yapılarak istenilen sonuca ulaşılır.

$m > 1$ için Lemma 4.1.1.'de verilen $K_{m,n}$ grafının polinomunda uygun düzenlemeler yapılarak

$$\begin{aligned} Pol(K_{m,n}) &= (-1)^{m+n}\lambda^{m+n-2}(\lambda^2 - mn) \\ &= (-\lambda)^{m+n-2}(\lambda^2 - mn) \\ &= (-\lambda)(-\lambda)^{m+n-3}(\lambda^2 - mn + n - n) \\ &= -\lambda[(-\lambda)^{m+n-3}(\lambda^2 - mn + n)] - n(-\lambda)^{m+n-2} \\ &= -\lambda Pol(K_{m-1,n}) - n(-\lambda)^{m+n-2} \end{aligned}$$

Teorem 4.2.4.'ün ispatı tamamlanır.

Bundan sonraki iki teoremde ise P_n yol graflarının ve C_n devir graflarının karakteristik polinomlarının sağladıkları indirgeme bağıntıları oluşturulacaktır.

Teorem 4.2.5. P_n yol grafı için $Pol(P_n)$ polinomunun sağladığı indirgeme bağıntısı

$$Pol(P_n) = -\lambda Pol(P_{n-1}) - Pol(P_{n-2}), \qquad n \geq 3$$

şeklindedir.

İspat. n köşeli bir P_n yol grafının komşuluk matrisi

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{n\times n}$$

olup karakteristik polinom tanımından

$$Pol(P_n) = |A - \lambda I| = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{n\times n}$$

elde edilir. Bu determinant birinci satıra göre açılırsa

$$= -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)} - \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)}$$

ifadesine ulaşılır. Burada soldaki determinantın değeri $Pol(P_{n-1})$'e eşit olurken sağdaki determinant birinci sütuna göre tekrar açılırsa

$$= -\lambda Pol(P_{n-1}) - \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-2)\times(n-2)}$$

ifadesi elde edilir. Son elde edilen determinantın $Pol(P_{n-2})$'yi veren determinant olduğu açıktır. Buradan hareketle

$$Pol(P_n) = -\lambda Pol(P_{n-1}) - Pol(P_{n-2})$$

olduğu kolayca görülür.

Teorem 4.2.6. C_n devir grafı için $Pol(C_n)$ polinomunun sağladığı indirgeme bağıntısı

$$Pol(C_n) = -\lambda Pol(C_{n-1}) - Pol(C_{n-2}) + (-1)^{\mathrm{n}} Pol(C_1), \qquad n \geq 3$$

şeklindedir.

İspat. $Pol(P_n)$ ifadesinin indirgeme bağıntısı için uygulanan işlem basamaklarının benzerleri $Pol(C_n)$ için de uygulanarak istenilen indirgeme bağıntısı kolayca elde edilir.

4.3. Grafların Enerji Bağıntıları

İlk olarak Erick Hückel tarafından ortaya atılan grafların enerjisi kavramı, moleküler grafların bazı özelliklerini çalışmada oldukça fayda sağladığından, Kimyasal Graf Teori'de önemli bir yere sahiptir. Özellikle literatürde sık kullanılan ve birçok özelliği iyi bilinen bazı özel graf türleri için bu grafların enerjileri bu bölümde hatırlatılacaktır. Tanım 1.13.'de de belirtildiği gibi bir grafın enerjisi, o grafa ait spektrumun tüm elemanlarının mutlak değerce toplamına eşittir. Bu tanım gereği n köşeli bir G grafının spektrumu $\{\lambda_i, i = 1,2,\cdots,n\}$ olmak üzere grafın enerjisi

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

bağıntısı ile hesaplanır. Buradan hareketle bu bölümde $G = K_n, S_n, K_{m,n}, P_n$ ve C_n grafları için enerji bağıntıları verilecektir.

Enerji kavramı ile ilgili ek bilgi olarak Gutman (1978), Walikar ve ark. (1999), Adiga ve ark. (2007), Nikiforov (2007) çalışmalarına bakılabilir.

Lemma 4.3.1. [Çelik 2016] $G = K_n, S_n$ ve $K_{m,n}$ graflarının enerji bağıntıları

$$E(G) = \begin{cases} 2(n-1), & G = K_n, \\ 2\left|\sqrt{n-1}\right|, & G = S_n, \\ 2\left|\sqrt{mn}\right|, & G = K_{m,n} \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. $G = K_n, S_n$ ve $K_{m,n}$ graflarının her biri için Sonuç 4.1.2.'de verilen spektrumların elemanlarının mutlak değerleri alınarak toplandığında istenilen sonuca kolayca ulaşıldığı görülmektedir.

Burada P_n ve C_n graflarının özdeğerleri trigonometrik değerler içerdiğinden enerji bağıntıları da diğer graflara göre farklılık göstermektedir. Bu graflar için enerji bağıntılarına ulaşırken faydalandığımız Çelik ve Cangul (2016)'da verilen aşağıdaki sonuçları hatırlayalım.

Lemma 4.3.2. P_n'in spektrumunda her $k = 1, 2, \ldots, n$ için

$$\lambda_k = -\lambda_{n+1-k}$$

olur.

İspat. $S(P_n) = \left\{\lambda_i : \lambda_i = 2\,cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right), i = 1, 2, 3, \dots, n\right\}$ olmak üzere

$$\begin{aligned}\lambda_{n+1-k} &= 2\,cos\left(\frac{\pi(n+1-k)}{n+1}\right)\\ &= 2\,cos\left(\frac{\pi(n+1)}{n+1} - \frac{\pi k}{n+1}\right)\\ &= 2\,cos\left(\pi - \frac{\pi k}{n+1}\right)\\ &= -2\,cos\left(\frac{\pi k}{n+1}\right)\\ &= -\lambda_k.\end{aligned}$$

Lemma 4.3.3. C_n'in spektrumunda her $k = 0,1,2,\dots,n-1$ için

$$\lambda_k = \lambda_{n-k}$$

olur.

İspat.
$$\begin{aligned}\lambda_{n-k} &= 2\,cos\left(\frac{2\pi(n-k)}{n}\right) = 2\,cos\left(\frac{2\pi n}{n} - \frac{2\pi k}{n}\right)\\ &= 2\,cos\left(n - \frac{2\pi k}{n}\right)\\ &= 2\,cos\left(-\frac{2\pi k}{n}\right)\\ &= 2\,cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)\\ &= \lambda_k.\end{aligned}$$

Teorem 4.3.4. P_n bir yol grafı olmak üzere yol grafının enerjisi

$$E(P_n) = \sum_{i=1}^{n} 2\left|\cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right)\right| = \begin{cases} 2\sum_{i=1}^{\frac{n-1}{2}} |\lambda_i| & n\ tek\ \ iken,\\ 2\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} |\lambda_i| & n\ çift\ iken \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. $\{\lambda_i \mid i = 1, 2, 3, \dots, n\}$ kümesi P_n'in spektrumu olmak üzere enerji tanımından

$$E(P_n) = \sum_{i=1}^{n} 2 \left| \cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right) \right|$$

elde edilir. Bununla birlikte ilk olarak Lemma 4.3.2. gereği n tek sayı iken

$$\lambda_1 = -\lambda_n,\ \lambda_2 = \lambda_{n-1},\ \dots,\ \lambda_{\frac{n-1}{2}} = \lambda_{\frac{n+3}{2}} \text{ ve } \lambda_{\frac{n+1}{2}} = 0$$

olur. Dolayısıyla

$$E(P_n) = 2 \sum_{i=1}^{\frac{n-1}{2}} |\lambda_i|$$

olduğu kolayca görülür. İkinci olarak n çift sayı iken Lemma 4.3.2. gereği

$$\lambda_1 = -\lambda_n,\ \lambda_2 = \lambda_{n-1},\ \dots,\ \lambda_{\frac{n}{2}} = \lambda_{\frac{n+2}{2}}$$

olur. Buradan da enerjinin tanımı kullanılarak P_n grafının enerjisinin

$$E(P_n) = 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} |\lambda_i|$$

olduğu kolaylıkla yazılabilir.

Teorem 4.3.5. $n \geq 3$ için C_n bir devir grafı olmak üzere bu grafın enerjisi

$$E(C_n) = \sum_{i=0}^{n-1} 2\left|\cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right)\right| = \begin{cases} 2 + 2\sum_{i=1}^{\frac{n-1}{2}} |\lambda_i| & n\ tek\ \ iken, \\ 4 + 2\sum_{i=1}^{\frac{n-2}{2}} |\lambda_i| & n\ çift\ iken \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. $\{\lambda_i \mid\ i = 0,1, \dots, n-1\}$ kümesi C_n'in spektrumu olmak üzere enerji tanımından

$$E(C_n) = \sum_{i=0}^{n-1} 2\left|\cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right)\right|$$

elde edilir. Burada ilk olarak n tek olduğu durumda Lemma 4.3.3. gereği

$$\lambda_0 = 2,\ \lambda_1 = \lambda_{n-1},\ \lambda_2 = \lambda_{n-2},\ \dots,\ \lambda_{\frac{n-1}{2}} = \lambda_{\frac{n+1}{2}}$$

elde edilir. Enerji tanımından

$$E(C_n) = \sum_{i=0}^{n-1} |\lambda_i| = 2 + 2\sum_{i=1}^{\frac{n-1}{2}} |\lambda_i|$$

olduğu kolayca görülür.

İkinci olarak n çift olduğu durumda Lemma 4.3.3. gereği

$$\lambda_0 = 2, \lambda_1 = \lambda_{n-1},\ \lambda_2 = \lambda_{n-2}, \dots, \lambda_{\frac{n-2}{2}} = \lambda_{\frac{n+2}{2}}$$

elde edilir. Enerji tanımı kullanılarak

$$E(C_n) = \sum_{i=0}^{n-1} |\lambda_i| = 4 + 2\sum_{i=1}^{\frac{n-2}{2}} |\lambda_i|$$

olduğu kolaylıkla görülür.

Yukarıda verilen $E(C_n)$ bağıntısına alternatif olarak Li ve ark. (2012)'da

$$E(C_n) = \begin{cases} 4\cot\dfrac{\pi}{n} & n \equiv 0(mod4) \\ 4\csc\dfrac{\pi}{n} & n \equiv 2(mod4) \\ 2\csc\dfrac{\pi}{2n} & n \equiv 1(mod2) \end{cases}$$

bağıntısı da verilmiştir.

Örnek 4.3.6. Köşe sayısı 8 olan tam grafın enerjisi Lemma 4.3.1. gereği

$$E(K_8) = 2.(8-1) = 14$$

şeklindedir.

Örnek 4.3.7. Köşe sayısı 5 olan yıldız grafın enerjisi Lemma 4.3.1. gereği

$$E(S_5) = 2\left|\sqrt{5-1}\right| = 4$$

şeklindedir.

Örnek 4.3.8. Köşe sayısı 13 olan iki parçalı tam grafın enerjisi Lemma 4.3.1. gereği

$$E\left(K_{4,9}\right) = 2\left|\sqrt{4.9}\right| = 12$$

şeklindedir.

Örnek 4.3.9. Köşe sayısı 16 olan yol grafın enerjisi Teorem 4.3.4. gereği

$$E(P_{16}) = \sum_{i=1}^{16} |\lambda_i| = 2\sum_{i=1}^{8} \left|2\cos\frac{\pi i}{17}\right|$$

şeklindedir.

Örnek 4.3.10. Köşe sayısı 7 olan yol grafın enerjisi Teorem 4.3.4. gereği

$$E(P_7) = \sum_{i=1}^{7} |\lambda_i| = 2\sum_{i=1}^{3} \left|2\cos\frac{\pi i}{8}\right|$$

şeklindedir.

Örnek 4.3.11. Köşe sayısı 7 olan devir grafın enerjisi Teorem 4.3.5. gereği

$$E(C_7) = \sum_{i=0}^{6} |\lambda_i| = 2 + 2\sum_{i=1}^{3} \left|2\cos\frac{2\pi i}{7}\right|$$

şeklindedir.

Örnek 4.3.12. Köşe sayısı 16 olan devir grafın enerjisi Teorem 4.3.5. gereği

$$E(C_{16}) = \sum_{i=0}^{15} |\lambda_i| = 4 + 2\sum_{i=1}^{7} \left|2\cos\frac{2\pi i}{16}\right|$$

şeklindedir.

5.GRAFLARDA ENERJİ İNDİRGEME BAĞINTILARI

Grafların uygulama alanlarından enerji kavramı, graf teoride oldukça önemli bir yer tutmaktadır. Bu doğrultuda birçok graf türünün enerjisini hesaplamada kolaylık sağlayan bağıntılar geliştirilmiştir. Bu bölümde literatürden de iyi bilinen bazı graf türleri için, aynı türe ait graflarda, köşe sayısı daha küçük olan graflar ile köşe sayısı daha büyük olan graflar arasındaki enerji ilişkileri incelenecek, incelemelerin sonunda yeni enerji indirgeme bağıntıları oluşturulacaktır. Bununla birlikte özellikle köşe sayısı 2'nin kuvvetleri şeklinde olan devir grafları için enerji hesaplamada yeni yöntemler geliştirilecektir.

5.1. C_n Devir Grafında Enerji İndirgeme Bağıntısı

C_n bir devir graf olmak üzere, literatürden de bilindiği gibi bu graf türünün spektrumunun elemanları $\lambda_i = 2\cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right), \quad i = 0,1,2,\dots,n-1$ şeklindedir. Burada daha önce C_n için bulunan spektrumlar arası geçiş bağıntıları kullanılarak 2^n köşeye sahip devir grafının enerjisini hesaplamaya yarayan yeni ve kullanışlı bir bağıntı geliştirilecektir (Çelik 2016).

C_n grafının enerji indirgeme bağıntısına geçmeden önce, enerji için gerekli olan spektrumun elemanlarında gerekli düzenlemeler yapılmalıdır. Bu grafın spektrumunun elemanlarını ayrı ayrı hesaplamak yerine Lemma 4.3.3. kullanılarak $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{\left[\left[\frac{n}{2}\right]\right]}$ değerlerini hesaplamak daha kullanışlı olacaktır. Bununla birlikte $n \geq 3$ için C_n grafının spektrumu $S(C_n) = \{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{n-2}, \lambda_{n-1}\}$ şeklinde ve C_{2n} grafının spektrumu $S(C_{2n}) = \{\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{2n-2}, \mu_{2n-1}\}$ şeklinde gösterildiğinde her $j = 1,2,3 \dots, 2n-1$ için λ_i ve μ_j arasında

$$\mu_{2j} = 2\cos\left(\frac{2\pi 2j}{2n}\right) = 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right) = \lambda_j$$

bağıntısı vardır. Trigonometrik yarım açı formülleri kullanılarak her $k = 1,2,\dots,n-1$ için

$$\mu_k = \mu_{2n-k} = \mp\sqrt{\lambda_k + 2}$$

bağıntısı elde edilir (Çelik 2016).

İlk olarak C_{2^n} grafının enerjisini hesaplamak için geliştirilen bağıntı verilecektir.

Teorem 5.1.1. $n \geq 3$ için $E(C_{2^n})$ ifadesi 2^n köşeye sahip devir grafının enerjisi olmak üzere

$$E(C_{2^n}) = 4\left(1 + \sqrt{2} + 2\sqrt{\sqrt{2}+2} + 2^2\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2} + \cdots + 2^{n-3}\sqrt{\sqrt{\ldots\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+\cdots+2}}\right)$$

şeklindedir. Burada son terimde $n-2$ tane karekök iç içedir.

İspat. Eşitliğin doğruluğu tümevarım yöntemi kullanılarak gösterilecektir.

Tümevarımın ilk adımı olarak $n = 3$ değeri için teoremin doğruluğu incelensin.

$$S(C_4) = S(C_{2^2}) = \{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\} \text{ ve } S(C_8) = S(C_{2^3}) = \{\mu_0, \mu_1, \ldots, \mu_7\}$$

şeklinde olsun. Burada

$$S(C_4) = \{\lambda_0 = 2, \lambda_1 = 0, \lambda_2 = -2, \lambda_3 = 0\}$$

olup yukarıda verilen bağıntılar kullanılarak

$$\mu_0 = \lambda_0 = 2,\ \ \mu_2 = \lambda_1 = 0,\ \ \mu_4 = \lambda_2 = -2,\ \ \mu_6 = \lambda_3 = 0$$

ve

$$\mu_1 = \mu_7 = \sqrt{\lambda_1 + 2},\ \ \mu_3 = \mu_5 = \sqrt{\lambda_3 + 2}$$

elde edilir. Bu değerler teoremde yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} E(C_{2^3}) = \sum_{i=0}^{7} |\mu_i| &= |\mu_0| + |\mu_1| + |\mu_2| + |\mu_3| + |\mu_4| + |\mu_5| + |\mu_6| + |\mu_7| \\ &= |\lambda_0| + |\lambda_1| + |\lambda_2| + |\lambda_3| + 2(|\mu_1| + |\mu_3|) \\ &= E(C_4) + 2\left(\sqrt{\lambda_1 + 2} + \sqrt{\lambda_3 + 2}\right) \\ &= 4\left(1 + \sqrt{2}\right) \end{aligned}$$

olur. Böylece $n = 3$ için teoremin doğruluğu açıktır.

Şimdi $C_{2^{n-1}}$'nin spektrumunun $\{\beta_0, \beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_{2^{n-1}-1}\}$ olduğu ve teoremin $C_{2^{n-1}}$ için de doğru olduğu kabul edilsin. Spektrumun $(2k+1)$. terimi

$$\beta_{2k+1} = \sqrt{\sqrt{\ldots\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+\cdots+2}}$$

şeklinde $n-3$ kez karekök ifadesinin kullanılmasıyla hesaplanır. Tüm bunlar göz önünde bulundurularak $C_{2^{n-1}}$'in enerjisi

$$E(C_{2^{n-1}}) = 4\left(1+\sqrt{2}+2\sqrt{\sqrt{2}+2}+2^2\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+\cdots\right.$$
$$\left.+2^{n-4}\sqrt{\sqrt{\ldots\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+\cdots+2}}\right)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Tümevarımın son adımında ise köşe sayısı 2^n olan her devirli graf için enerji

$$E(C_{2^n}) = \sum_{k=0}^{2^n-1}|\alpha_k|$$
$$= \sum_{k=0}^{2^{n-1}-1}|\alpha_{2k}| + \sum_{k=0}^{2^{n-1}-1}|\alpha_{2k+1}|$$
$$= \sum_{k=0}^{2^{n-1}-1}|\beta_k| + \sum_{k=0}^{2^{n-1}-1}|\sqrt{\beta_{2k+1}+2}|$$
$$= 4\left(1+\sqrt{2}+2\sqrt{\sqrt{2}+2}+\cdots\right.$$
$$\left.+2^{n-3}\sqrt{\sqrt{\ldots\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+\cdots+2}}\right)$$

olup verilen teoremin her $n \geq 3, n \in N$ için doğruluğu kanıtlanmış olur.

Teorem 5.1.2. $n \geq 3$ olmak üzere C_{2^n} devirli grafının enerjisi için indirgeme bağıntısı

$$E(C_{2^n}) = E(C_{2^{n-1}}) + 2^{n-1}\sqrt{\sqrt{\ldots\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+\cdots+2}}$$

şeklindedir. Burada eşitliğin sağında $n-3$ kez karekök iç içedir.

Örnek 5.1.3. $E(C_{32})$ değerini hesaplayalım.

$E(C_{32}) = E(C_{2^5})$ olduğundan Teorem 5.1.1. kullanılarak

$$E(C_{2^5}) = 4\left(1+\sqrt{2}+2\sqrt{\sqrt{2}+2}+2^2\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}\right)$$
$$\approx 55{,}808$$

olduğu hesaplanır.

Örnek 5.1.4. $E(C_{64})$ değerini hesaplayalım.

$E(C_{64}) = E(C_{2^6})$ olduğundan Teorem 5.1.1. kullanıldığında

$$E(C_{2^6}) = 4\left(1+\sqrt{2}+2\sqrt{\sqrt{2}+2}+2^2\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}\right.$$
$$\left.+2^3\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+2}\right)$$
$$\approx 119{,}496$$

değerine ulaşılır.

Örnek 5.1.5. $E(C_{32}) \approx 55{,}808$ olarak veriliyor. Buna göre $E(C_{64}) \approx 119{,}496$ olduğunu Teorem 5.1.2.'yi kullanarak gösterelim.

$$E(C_{2^6}) = E(C_{2^5}) + 2^5\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{2}+2}+2}+2}$$
$$\approx 55{,}808 + 32.1{,}990$$
$$\approx 119{,}496.$$

Devir grafında spektrumun elemanlarının trigonometrik ifadeler olması, diğer bazı özel graf türlerine göre, literatürdeki bilgilere alternatif olacak farklı sonuçlar ortaya çıkarmaktadır. Bir sonraki teoremde $n \geq 3$ için spektrumu ve enerjisi bilinen C_n grafının verilerini kullanarak $2n$ köşeye sahip C_{2n} grafının enerjisini hesaplamada kolaylık sağlayan indirgeme bağıntısı verilecektir.

Teorem 5.1.6. $n \geq 3$ için, $S(C_n) = \{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_{n-2}, \lambda_{n-1}\}$ olsun. $E(C_n)$ ile $E(C_{2n})$ arasındaki ilişki

$$\frac{E(C_{2n}) - E(C_n)}{2} = \begin{cases} \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1}+2}, & n\ çift\ iken \\ \sum_{j=1}^{\frac{n-1}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1}+2}, & n\ tek\ iken \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. Enerjinin tanımından

$$E(C_n) = \sum_{j=0}^{n-1} |\lambda_j|$$

olduğu bilinmektedir. Bununla birlikte Çelik ve Cangül (2017)'de verilen $S(C_n)$ ve $S(C_{2n})$ arasındaki bağıntıdan

$$E(C_{2n}) = E(C_n) + \sum_{j=1}^{[\![\frac{n}{2}]\!]} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}$$

elde edilir. Buradan da

$$\frac{E(C_{2n}) - E(C_n)}{2} = \begin{cases} \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}, & m\ çift\ iken \\ \sum_{j=1}^{\frac{n-1}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}, & m\ tek\ iken \end{cases}$$

sonucuna ulaşılır.

5.2. P_n Yol Grafında Enerji İndirgeme Bağıntısı

P_n bir yol grafı olmak üzere bu graf türünün spektrumunun elemanlarının trigonometrik bağıntılarla hesaplanması spektrumlar arası geçişlerde farklılıklar gösterdiği gibi enerjiler arası geçişlerde de farklılıklar göstermektedir. Bir sonraki teoremde $E(P_n)$ ile $E(P_{2n})$ arasındaki ilişki verilecektir.

Teorem 5.2.1. $n \geq 1$ için, $S(P_n) = \{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_{n-1}, \lambda_n\}$ olsun. $E(P_n)$ ile $E(P_{2n})$ arasında

$$\frac{E(P_{2n}) - E(P_n)}{2} = \begin{cases} \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}, & n\ çift\ iken \\ \sum_{j=1}^{\frac{n-1}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}, & n\ tek\ iken \end{cases}$$

bağıntısı vardır.

İspat. Enerjinin tanımından

$$E(P_n) = \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j|$$

olduğu bilinmektedir. Bununla birlikte Celik ve Cangül(2017)'de verilen $S(P_n)$ ve $S(P_{2n})$ arasındaki bağıntıdan

$$E(P_{2n}) = E(P_n) + \sum_{j=1}^{[\![\frac{n}{2}]\!]} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}$$

elde edilir ve buradan da

$$\frac{E(P_{2n}) - E(P_n)}{2} = \begin{cases} \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}, & n\ çift\ iken \\ \sum_{j=1}^{\frac{n-1}{2}} \sqrt{\lambda_{2j-1} + 2}, & n\ tek\ iken \end{cases}$$

sonucu elde edilir.

5.3. K_n Tam Grafında Enerji İndirgeme Bağıntısı

K_n tam grafının spektrumun elemanlarının $-1^{(n-1)}$ ve $n-1$ olduğu Sonuç 4.1.2.'de verilmiştir. Enerji tanımı gereği bu değerlerin mutlak değerlerinin toplamı olan $2(n-1)$ değeri $E(K_n)$ değerine eşittir. $E(K_n)$ ile $E(K_{2n-1})$ arasındaki indirgeme bağıntısı aşağıdaki teoremde verilecektir.

Teorem 5.3.1. $n \geq 3$ için $E(K_{2n-1})$ tam grafının enerji indirgeme bağıntısı

$$E(K_{2n-1}) = 2E(K_n)$$

şeklindedir.

İspat. Özel bazı graf türlerinin enerjileri için Çelik (2016), Çelik ve Cangül (2017), Brouwer ve Haemers (2012), Li ve ark. (2012) çalışmalarına bakıldığında K_n tam grafının spektrumun elemanlarının $-1^{(n-1)}$ ve $n-1$ olduğu ve enerji tanımından da enerjisinin $2(n-1)$ değerine eşit olduğu bilinen bir sonuçtur. Buradan hareketle Lemma 4.3.1. kullanılarak

$$\begin{aligned} E(K_{2n-1}) &= 2(2n-1-1) \\ &= 2(2n-2) \\ &= 2.2(n-1) \\ &= 2E(K_n) \end{aligned}$$

elde edilir.

5.4. $K_{m,n}$ İki Parçalı Tam Grafta Enerji İndirgeme Bağıntısı

$K_{m,n}$ iki parçalı tam grafının spektrumunun elemanlarının $0^{(mn-2)}$ ve $\mp\sqrt{mn}$ şeklinde, enerjisinin ise $2\sqrt{mn}$ şeklinde olduğu Sonuç 4.1.2.'de ve Lemma 4.3.1.'de verilmiştir. Bir sonraki teoremde ise $E(K_{m,n})$ ile $E(K_{2m,n})$ arasındaki indirgeme bağıntısı verilecektir.

Teorem 5.4.1. $2m+n$ köşeli iki parçalı tam bir grafın enerjisini veren $E(K_{2m,n})$ ile veya $m+2n$ köşeli iki parçalı tam bir grafın enerjisini veren $E(K_{m,2n})$ ile $m+n$ köşeli iki parçalı tam grafın enerjisini veren $E(K_{m,n})$ arasında

$$E(K_{2m,n}) = E(K_{m,2n}) = \sqrt{2}E(K_{m,n})$$

olacak şeklinde bir indirgeme bağıntısı vardır.

İspat. Lemma 4.3.1.'den

$$E(K_{2m,n}) = E(K_{m,2n})$$
$$= 2\sqrt{2mn}$$
$$= 2\sqrt{2}\sqrt{mn}$$
$$= \sqrt{2}E(K_{m,n})$$

sonucuna ulaşılır. Bununla birlikte köşe sayısı $rm + sn$ olan iki parçalı tam grafı için enerji indirgeme bağıntısı aşağıda sonuçta verilmiştir.

Sonuç 5.4.2. $K_{rm,sn}$ grafı için enerji indirgeme bağıntısı

$$E(K_{rm,sn}) = \sqrt{rs} \cdot E(K_{m,n})$$

şeklindedir.

İspat. Lemma 4.3.1.'den

$$E(K_{rm,sn}) = 2\sqrt{rm \cdot sn}$$
$$= 2\sqrt{rs} \cdot \sqrt{mn}$$
$$= \sqrt{rs} \cdot E(K_{m,n})$$

olup istenilen bağıntı elde edilir.

5.5. S_n Yıldız Grafında Enerji İndirgeme Bağıntısı

S_n yıldız grafının özdeğerlerinin $0^{(n-2)}$ ve $\mp\sqrt{n-1}$, enerjisinin ise $2\sqrt{n-1}$ olduğu Sonuç 4.1.2.'de ve Lemma 4.3.1.'de verilmiştir. Burada ise bu veriler kullanılarak $E(S_n)$ ile $E(S_{2n-1})$ arasında enerji indirgeme bağıntısı verilecektir.

Teorem 5.5.1. n köşeli yıldız grafın enerjisi ile $2n-1$ köşeli yıldız grafın enerjisi arasında

$$E(S_{2n-1}) = \sqrt{2}E(S_n)$$

şeklinde bir indirgeme bağıntısı vardır.

İspat. Lemma4.3.1. kullanıldığında

$$\begin{aligned} E(S_{2n-1}) &= 2\sqrt{2n-1-1} \\ &= 2\sqrt{2n-2} \\ &= 2\sqrt{2}\sqrt{n-1} \\ &= \sqrt{2}E(S_n) \end{aligned}$$

olacak şekilde indirgeme bağıntısı elde edilir.

6. GRAFLARDA BİRLEŞİM ve BİRLEŞİMİN KARAKTERİSTİK POLİNOM ÜZERİNDEKİ ETKİSİ

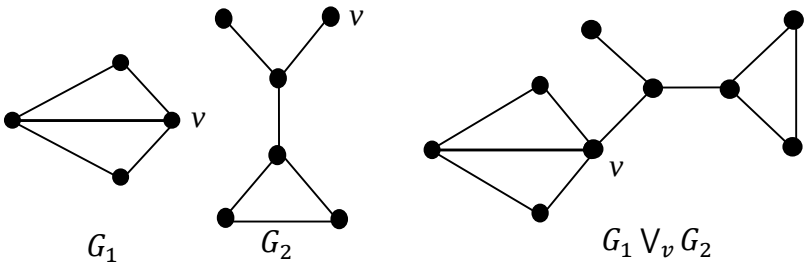
Günlük hayatta sık sık karşılaştığımız ve kullanım alanı oldukça yaygın olan grafların incelenmesi ve bu graflar üzerinde yapılan çalışmalar akıllara farklı sorular getirmekte, bunun da bir sonucu olarak graflar üzerinde pek çok operasyonlar tanımlanmaktadır. İki grafın kartezyen çarpımı, belirlenen bir köşeden iki grafın birleşimi, bir kenar ile köprü kurularak birleşim, bir graftan kenar ekleme ya da kenar silme, köşe ekleme ya da graftan köşe silme gibi pek çok operasyon tanımlanabilmektedir. Örneğin $G_1 = (V_1, E_1)$ ve $G_2 = (V_2, E_2)$ olarak verilen iki grafın birleşimi denildiğinde klasik birleşim işlemi düşünülerek $G_1 \cup G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$ grafı oluşturulur. Bu bölümde klasik birleşim yönteminden farklı olarak K_n, S_n *ve* P_n grafları için iki yeni birleşim metodu tanımlanacak, birleşim sonucunda oluşan yeni grafların karakteristik polinomları belirlenecek ve bu polinomlar ile bileşenlerin karakteristik polinomları arasındaki ilişki araştırılacaktır.

6.1. İki Grafın Bir Köşede Birleşimi

Bu bölümde üzerinde çalışılacak olan yeni bir birleşim metodu tanımlanacaktır:

Tanım 6.1. G_1 ve G_2 iki graf olsun. $V(G_1)$ ve $V(G_2)$ kümelerinden belirlenen birer köşe v olarak isimlendirilsin. Bu v köşelerini özdeşleyecek şekilde iki graf v köşesinde birleştirilsin. Elde edilen grafa, verilen grafların ***v* köşesinde birleşimi** denir ve $\boldsymbol{G_1 \bigvee_v G_2}$ ile gösterilir. Burada $G_1 \bigvee_v G_2$ grafının köşe kümesi $V(G_1 \bigvee_v G_2) = V(G_1) \cup V(G_2)$ ve kenar kümesi $E(G_1 \bigvee_v G_2) = E(G_1) \cup E(G_2)$ dir.

Ayrıca $|V(G_1)| = n_1$ ve $|V(G_2)| = n_2$ olmak üzere $|V(G_1 \bigvee_v G_2)| = n_1 + n_2 - 1$; $|E(G_1)| = m_1$ ve $|E(G_2)| = m_2$ olmak üzere $|E(G_1 \bigvee_v G_2)| = m_1 + m_2$ dir.



Şekil 6.1. G_1, G_2 ve $G_1 \bigvee_v G_2$ köşe birleşim grafı

Birçok kullanım alanı olan graflar, özellikle kimyasal moleküller için oldukça önemli bir yere sahiptir. Hakkında literatürde pek çok veri bulunan molekül yapıları, çeşitli kurallar çerçevesinde, bir araya gelerek daha büyük moleküllere dönüşebilmektedir. Yapısal değişiklik gösteren yeni molekül yapılarının incelenmesi sırasında kullanılan graf teorinin uygulama basamakları için hem zamandan hem de işlem kalabalığından tasarruf sağlayacak bazı bağıntılar bu bölümde verilecektir.

Simetri ve düzenlilik, grafları konu alan birçok alanda en çok aranan özellikler arasındadır. Moleküler grafların geneli belirli bir noktaya göre simetrik olan iki alt grafın birleşimi şeklindedir. Bu yüzden de bu bölümde iki aynı grafın belirlenen bir köşede simetrik olacak şekilde birleştirilmesi ile oluşan birleşim grafları ve bu grafların karakteristik polinomları oluşturulacaktır. Böylece oluşturulan polinomlar sayesinde, büyük bir grafın karakteristik polinomunu baştan yazmak yerine bileşenler cinsinden polinomu oluşturma kolaylığı elde edilmiş olacaktır. Literatürden de iyi bilinen P_n, K_n ve S_n graflarının karakteristik polinomlarını kullanarak $P_n \bigvee_v P_n$, $K_n \bigvee_v K_n$ ve $S_n \bigvee_v S_n$ graflarının karakteristik polinomları formülize edilecektir.

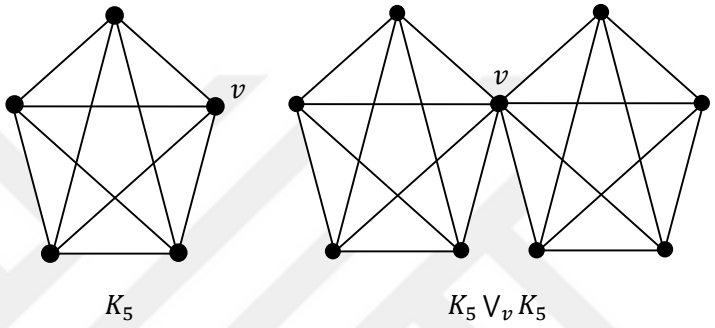
İlk olarak K_n tam grafı için $K_n \bigvee_v K_n$ köşe birleşim grafı ve bu grafın karakteristik polinomu verilecektir.

Teorem 6.1.1. K_n tam grafı için bir v köşesinde köşe birleşim grafı olan $K_n \bigvee_v K_n$ için karakteristik polinom

$$Pol(K_n \bigvee_v K_n) = (1+\lambda)^{n-2}[(-1)^{n+1}((n-2)Pol(K_{n-1}) + (\lambda - n + 2)Pol(K_n)) - Pol(K_{n-1})]$$

şeklindedir.

İspat. K_n tam grafı için bir v köşesinde köşe birleşim grafı olan $K_n \bigvee_v K_n$ grafının karakteristik polinomunun hesaplanmasına geçilmeden önce $K_5 \bigvee_v K_5$ grafı açıklık sağlamak amacıyla aşağıdaki Şekil 6.2.'de verilmiştir.



Şekil 6.2. K_5 ve $K_5 \bigvee_v K_5$ köşe birleşim grafı

$2n-1$ köşeye sahip $K_n \bigvee_v K_n$ grafının komşuluk matrisi,

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & 0 \end{bmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

şeklinde oluşturulur. Bu komşuluk matrisinin bazı satır ve sütunları incelendiğinde sol üst kısmının K_n tam grafının komşuluk matrisine, sağ alt kısmının ise K_{n-1} tam grafınnn komşuluk matrisine ait olduğu kolayca görülmektedir. Literatürden $K_n \bigvee_v K_n$ grafının karakteristik polinomu $Pol(K_n \bigvee_v K_n) = |A - \lambda I_{2n-1}|$ olup

$$Pol(K_n \vee_v K_n) = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & -\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -\lambda & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & -\lambda \end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

şeklindedir. Bu determinanta önce elementer işlemlerden $-C_{2n-1} + C_{n+1} \to C_{n+1}$, $-C_{2n-1} + C_{n+2} \to C_{n+2}$, $-C_{2n-1} + C_{n+3} \to C_{n+3}$, $\cdots$, $-C_{2n-1} + C_{2n-2} \to C_{2n-2}$ olacak şekilde önce sütun işlemleri uygulanıp ardından da $\frac{1}{\lambda}R_{2n-1} + R_{n+1} \to R_{n+1}$, $\frac{1}{\lambda}R_{2n-1} + R_{n+2} \to R_{n+2}$, $\frac{1}{\lambda}R_{2n-1} + R_{n+3} \to R_{n+3}$, $\cdots$, $\frac{1}{\lambda}R_{2n-1} + R_{2n-2} \to R_{2n-2}$ satır işlemleri uygulandıktan sonra $(n+1)$. satırdan $(2n-2)$. satıra kadar her bir satır $\frac{(1+\lambda)}{\lambda}$ parantezine alınırsa yukarıdaki determinantın eşiti

$$= \left(\frac{1+\lambda}{\lambda}\right)^{n-2} \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1-\lambda & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1-\lambda & \cdots & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1-\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1+\lambda & 1+\lambda & \cdots & 1+\lambda & -\lambda \end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

şekline dönüşür. Bu adımda $(n+1)$. satır (-1) ile çarpılıp altında kalan tüm satırlara eklenir ve ardından son $n-2$ satırın her biri λ parantezine alınırsa

$$= (1+\lambda)^{n-2} \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1-\lambda & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

determinantı elde edilir. Burada ise $(n+2)$. satırdan $(2n-2)$. satıra kadar olan tüm satırlar $(n+1)$. satıra eklenip elde edilen determinant son satıra göre açılırsa

$$= (1+\lambda)^{n-2} \left(\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & (n-2-\lambda) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \end{vmatrix}_{(2n-2)\times(2n-2)} \right.$$

$$\left. +(-1)^{3n} \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}_{(2n-2)\times(2n-2)} \right)$$

ifadesi elde edilir. Birinci determinantta elementer sütun işlemlerinden $C_{2n-2} + C_{2n-3} + C_{2n-4} + \cdots + C_{n+1} \to C_{n+1}$ işlemi uygulanıp ikinci determinantta son satırına göre açılırsa

$$= (1+\lambda)^{n-2} \left(\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & 1 & (n-2) & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & (n-2-\lambda) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \end{vmatrix}_{(2n-2)\times(2n-2)} \right.$$

$$\left. + (-1)^{3n} \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}_{(2n-3)\times(2n-3)} \right)$$

şeklinde yeni determinantlar elde edilir. Elde edilen bu deterninantlardan başta elde edilen $(2n-2)\times(2n-2)$ tipindeki determinantı önce son satırına göre açıp ardından ise her iki determinantı da $(n+2)$. satıra gelinceye kadar son satırlarına göre açma işlemi devam ettirildiğinde

$$= (1+\lambda)^{n-2}\left((-1)^{n-4}\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & n-2 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & (n-2-\lambda) \end{vmatrix}_{(n+1)\times(n+1)} \right.$$

$$\left. +(-1)^{3n}\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}_{(n+1)\times(n+1)} \right)$$

toplamı elde edilir. Bu iki determinant önce son satırlarına göre açılıp ardından da yeni determinantlar son sütunlarına göre açılırsa

$$= (1+\lambda)^{n-2}\left((-1)^{n+1}(n-2)\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \ldots & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)} \right.$$

$$\left. +(-1)^{n}(n-2-\lambda)\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & -\lambda \end{vmatrix}_{n\times n} - \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)} \right)$$

ifadesi elde edilir. En son elde edilen determinantlar K_n ve K_{n-1} tam graflarının karakteristik polinomlarını veren determinantlar olup yerine yazıldığında istenen sonuca ulaşılmış olur.

Teorem 6.1.1.'in bir sonucu olarak $Pol(K_n \vee_v K_n)$'in formülü λ cinsinden aşağıdaki şekilde de formülize edilebilir.

Sonuç 6.1.2. λ, $K_n \vee_v K_n$ grafının karakteristik polinomunun kökleri olmak üzere

$$Pol(K_n \vee_v K_n) = -(\lambda - n + 2)(\lambda^2 - (n-2)\lambda - 2n + 2)(\lambda + 1)^{2n-4}$$

şeklinde yazılabilir.

İspat. Lemma 4.1.1. gereği $Pol(K_n)$ ve $Pol(K_{n-1})$ formülleri Teorem 6.1.1.'de yerine yazılırsa istenen sonuç kolaylıkla elde edilir.

Örnek 6.1.3. $K_6 \vee_v K_6$ grafı için bu grafın karakteristik polinomunu ve spektrumunu hesaplayalım.

$n = 6$ için

$$Pol(K_6 \vee_v K_6) = -(\lambda - 6 + 2)(\lambda^2 - (6-2)\lambda - 2 \cdot 6 + 2)(\lambda + 1)^{2 \cdot 6 - 4}$$

$$= -(\lambda - 4)(\lambda^2 - 4\lambda - 10)(\lambda + 1)^8$$

şeklindedir ve bu polinomun kökleri spektrumu verir. Bu durumda $S(K_6 \vee_v K_6)$ spektrum olmak üzere

$$S(K_6 \vee_v K_6) = \{-1^{(8)}, 4, 2 \pm \sqrt{14}\}$$

şeklindedir.

Yukarıdaki örnekte görüldüğü gibi $K_n \vee_v K_n$ grafı için bulunan sonuçlar, bu grafın karakteristik polinomunu ve spektrumunu bulmada oldukça kolaylık sağlamaktadır.

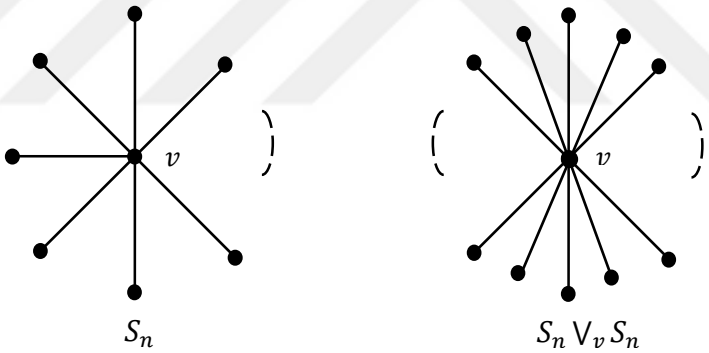
İkinci olarak S_n yıldız grafı için $S_n \vee_v S_n$ köşe birleşim grafı ve bu grafın karakteristik polinomu incelenecektir.

Teorem 6.1.4. S_n yıldız grafı için bir v köşesinde köşe birleşim grafı olan $S_n \vee_v S_n$ grafının karakteristik polinomu

$$Pol(S_n \vee_v S_n) = \begin{cases} Pol(S_{2n-1}), & v \text{ köşesi merkez köşe ise} \\ (-\lambda)^{n-3}(\lambda^2 - n + 2)(Pol(S_n) - (-\lambda)^{n-2}), & \text{diğer tüm durumlar} \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat. İlk olarak alınan iki tane n köşeli S_n yıldız grafın merkez köşeleri v olarak isimlendirilsin. Bu v köşeleri özdeşlenecek şekilde iki graf birleştirildiğinde oluşan $S_n \vee_v S_n$ grafı, merkezi v olan $2n-1$ köşeli S_{2n-1} yıldız grafıdır.



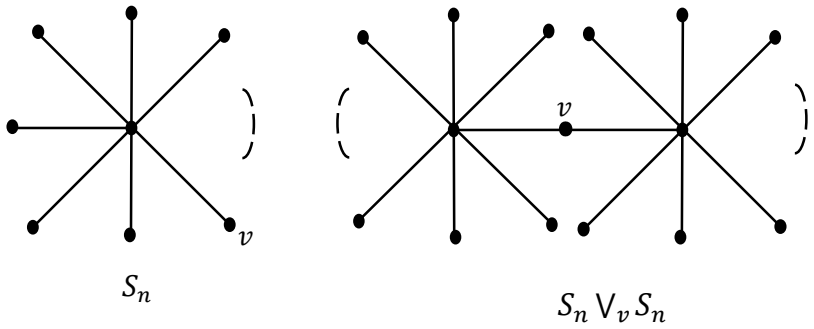
Şekil 6.3. S_n ve S_n graflarında merkez köşe birleşim grafı

Lemma 4.1.1.'e göre

$$Pol(S_n \vee_v S_n) = Pol(S_{2n-1}) = (-\lambda)^{n-2}(\lambda^2 - n + 1)$$

şeklindedir.

İkinci adımda v köşesi, alınan S_n grafları için merkez dışında herhangi bir köşe olacak şekilde etiketlensin ve bu v köşelerini özdeşleyecek şekilde graflara köşe birleşim işlemi uygulansın. Elde edilen $S_n \vee_v S_n$ grafının daha anlaşılır olması için Şekil 6.4. verilmiştir.



Şekil 6.4. S_n ve S_n grafları için merkez dışında köşe birleşim grafı

$2n-1$ köşeye sahip $S_n \vee_v S_n$ grafının komşuluk matrisi

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

şeklindedir. Literatürden $S_n \vee_v S_n$ grafının karakteristik polinomu

$$Pol(S_n \vee_v S_n) = |A - \lambda I_{2n-1}|$$

$$= \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & -\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda \end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

ile bulunur. Yukarıdaki determinant incelendiğinde sol üstteki $n \times n$'lik kısım S_n yıldız grafının karakteristik polinomunu hesaplamaya yarayan determinanta, sağ altta kalan $(n-1) \times (n-1)$'lik kısım ise S_{n-1} yıldız grafına ait karakteristik polinomu hesaplamaya yarayan determinanta ait olduğu kolayca görülür. Bu determinanta önce elementer sütun işlemlerinden $\frac{1}{\lambda}C_{2n-1} + C_{n+1} \to C_{n+1}$, $\frac{1}{\lambda}C_{2n-1} + C_{n+2} \to C_{n+2}$, $\frac{1}{\lambda}C_{2n-1} + C_{n+3} \to C_{n+3}$, $\cdots$, $\frac{1}{\lambda}C_{2n-1} + C_{2n-2} \to C_{2n-2}$ işlemleri uygulanıp ardından da $\frac{1}{\lambda}C_{n+2} + C_{n+1} \to C_{n+1}$, $\frac{1}{\lambda}C_{n+3} + C_{n+1} \to C_{n+1}$, $\frac{1}{\lambda}C_{n+4} + C_{n+1} \to C_{n+1}$, $\cdots$, $\frac{1}{\lambda}C_{2n-2} + C_{n+1} \to C_{n+1}$ işlemleri uygulandığında

$$= \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{n-2-\lambda^2}{\lambda} & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & -\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda \end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

determinantı elde edilir. Bu determinantta her $i = n+2, \cdots, 2n-1$ ve her $j = 1, \cdots, n+1$ için $a_{ij} = 0$ olduğu görülmektedir. Sıfıra eşit olan terimler, determinantın hesaplanmasında kolaylık sağlayan bir metodu kullanma olanağı sağlar. Bu metodun bir sonucu olarak yukarıdaki determinant, determinantın sol üst kısmındaki $(n+1) \times (n+1)$'lik terimlerin determinantı ile sağ alt kısımdaki $(n-2) \times (n-2)$'lik terimlerin determinantı çarpımına eşittir. Bu çarpım

$$= \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & -\lambda & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \dfrac{-\lambda^2 + (n-3)\lambda + 1}{\lambda} \end{vmatrix}_{(n+1)\times(n+1)} \cdot \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda \end{vmatrix}_{(n-2)\times(n-2)}$$

şeklinde gösterilir. Elde edilen ikinci determinant $(n-2) \times (n-2)$ tipindeki diyagonal matrisin determinantı olup değeri diyagonal elemanların çarpımına eşittir. Baştaki $(n+1) \times (n+1)$ tipindeki kare matrisin determinantı ise son satıra göre açılırsa yukarıdaki determinantlar çarpımı

$$= (-\lambda)^{n-2} \left(\frac{-\lambda^2 + (n-3)\lambda + 1}{\lambda} Pol(S_n) + (-1)^{n+2} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda & 0 \end{vmatrix}_{n\times n} \right)$$

şekline dönüşür. Son determinanta, uygun elementer satır ve sütun işlemleri uygulanmaya devam edildiğinde

$$= (-\lambda)^{n-2} \left(\frac{-\lambda^2 + (n-3)\lambda + 1}{\lambda} \cdot Pol(S_n) \right.$$

$$+(-1)^{n+2}\left(\frac{-\lambda^2+n-2}{\lambda}\right)\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -\lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda & 0 \end{vmatrix}_{n\times n}\Bigg)$$

toplamı elde edilir. Bu toplam yer alan $n \times n$ tipindeki determinanta her $i = 3, \cdots, n$ için $-R_2 + R_i \to R_i$ şeklinde elementer satır işlemi uygulanıp ardından da son satıra göre açılırsa istenilen sonuca ulaşılır.

Teorem 6.1.4'ün bir sonucu olarak $Pol(S_n \vee_v S_n)$'in formülü λ cinsinden aşağıdaki şekilde de formülize edilebilir.

Sonuç 6.1.5. λ, $S_n \vee_v S_n$ grafının karakteristik polinomunun kökleri olmak üzere

$$Pol(S_n \vee_v S_n) = -\lambda^{2n-5}(\lambda^2 - n + 2)(\lambda^2 - n)$$

şeklinde yazılabilir.

İspat. Lemma 4.1.1. kullanılarak $Pol(S_n)$ bağıntısı Teorem 6.1.4.'te yerine yazılırsa istenen sonuç kolaylıkla elde edilir.

Örnek 6.1.6. v köşesi merkez köşe olmasın. Bu durumda $S_7 \vee_v S_7$ grafının karakteristik polinomunu ve spektrumunu hesaplayalım.

$n = 7$ için

$$Pol(S_7 \vee_v S_7) = -\lambda^{2\cdot 7-5}(\lambda^2 - 7 + 2)(\lambda^2 - 7)$$

$$= -\lambda^9(\lambda^2 - 5)(\lambda^2 - 7)$$

şeklindedir ve bu polinomun kökleri spektrumu verir. Bu durumda $S(S_7 \vee_v S_7)$ spektrum olmak üzere

$$S(S_7 \vee_v S_7) = \{0^{(9)}, \mp\sqrt{5}, \mp\sqrt{7}\}$$

şeklindedir.

Bu bölümde son olarak P_n yol grafı için köşe birleşim grafı incelenecektir.

Teorem 6.1.7. P_n yol grafında, uç köşe olan bir v köşesi için köşe birleşim grafı $P_n \vee_v P_n$'in karakteristik polinomu

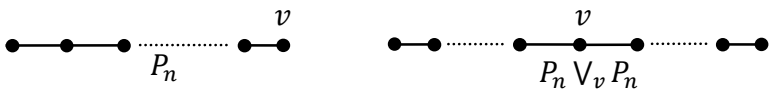
$$Pol(P_n \vee_v P_n) = Pol(P_{n-1})[Pol(P_n) - Pol(P_{n-2})]$$

şeklindedir. Ayrıca bu eşitlik

$$Pol(P_n \vee_v P_n) = -Pol(P_{n-1})[\lambda Pol(P_{n-1}) + 2Pol(P_{n-2})]$$

olarak da ifade edilebilir.

İspat. İki tane P_n grafı alınarak her ikisinin de uç noktalarından biri v olarak isimlendirilsin. Ardından ise bu iki aynı isme sahip köşeler özdeşleşecek şekilde birleştirilip elde edilen graf $P_n \vee_v P_n$olsun.



Şekil 6.5. P_n ve $P_n \vee_v P_n$ köşe birleşim grafı

Yukarıdaki Şekil 6.5.'te de görüldüğü gibi elde edilen $P_n \vee_v P_n$ grafı $2n-1$ köşeye sahip P_{2n-1} yol grafıdır. Lemma 4.1.3. ve Teorem 4.2.5. gereği sonuç aşikardır.

Sonuç 6.1.8. λ, $P_n \vee_v P_n$ grafının karakteristik polinomunun kökleri olmak üzere bu polinom

$$\sum_{k=0}^{n-1}(-1)^{k+1}\binom{2n-k-1}{k}\lambda^{2n-k-1}$$

olarak da ifade edilebilir.

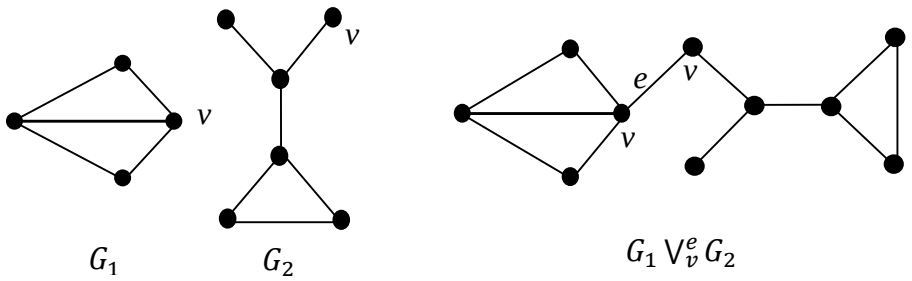
İspat. Lemma 4.1.3.'te verilen eşitlikte P_n, P_{n-1} ve P_{n-2} graflarına ait polinomlar Teorem 6.1.7'de yerine yazıldığında istenilen sonuç elde edilir.

6.2. İki Grafın Birer Köşelerinden Yeni Bir Kenar İle Birleşimi

Bu bölümde ise köprü görevi gören ilave bir kenar ile oluşturulacak farklı bir birleşim metodu tanımlanacaktır:

Tanım 6.2. G_1 ve G_2 iki graf olsun. $V(G_1)$ ve $V(G_2)$ kümelerinden belirlenecek birer köşe v olarak isimlendirilsin. İsimlendirilen v köşelerinin arasına bir e kenarı çizilerek G_1 ve G_2 graflarını birleştirilsin. Elde edilen bu grafa, verilen grafların **v köşesinde yeni bir kenar ile birleşimi** veya kısaca **v köşesinde kenar birleşimi** denir ve $\boldsymbol{G_1 \vee_v^e G_2}$ ile gösterilir.

Burada $G_1 \vee_v^e G_2$ grafının köşe kümesi $V(G_1 \vee_v^e G_2) = V(G_1) \cup V(G_2)$ ve kenar kümesi $E(G_1 \vee_v^e G_2) = E(G_1) \cup E(G_2) \cup \{e\}$'dir. Ayrıca $|V(G_1)| = n_1$ ve $|V(G_2)| = n_2$ olmak üzere $|V(G_1 \vee_v^e G_2)| = n_1 + n_2$ ve ayrıca $|E(G_1)| = m_1$ ve $|E(G_2)| = m_2$ olmak üzere $|E(G_1 \vee_v^e G_2)| = m_1 + m_2 + 1$'dir.



Şekil 6.6. G_1, G_2 ve $G_1 \vee_v^e G_2$ grafları

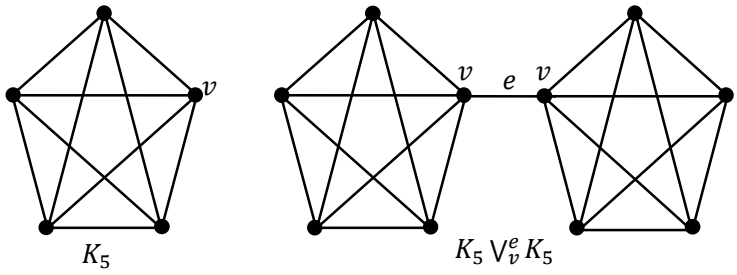
Bu bölümde iki aynı grafın belirlenen bir köşede simetrik olacak şekilde köprü görevi gören bir kenar eklenerek birleştirilmesi ile oluşan graflar ve bu grafların karakteristik polinomları hesaplanacaktır. Bu hesaplamalar büyük bir grafın karakteristik polinomunu baştan hesaplamak yerine bileşenler cinsinden polinomu oluşturma kolaylığı sağlayacak ve bu polinomun kökleri sayesinde de grafların enerjileri kolayca ifade edilebilecektir. Literatürden de iyi bilinen P_n, K_n ve S_n graflarının karakteristik polinomları kullanılarak $K_n \vee_v^e K_n$, $S_n \vee_v^e S_n$ ve $P_n \vee_v^e P_n$ graflarının karakteristik polinomları formülize edilecektir. İlk olarak K_n tam grafları için bir v köşesinde kenar birleşim grafı oluşturulup bu grafın polinomunu veren bağıntı yazılacaktır.

Teorem 6.2.1. K_n bir tam graf olmak üzere, $K_n \vee_v^e K_n$ grafının karakteristik polinomu

$$Pol(K_n \vee_v^e K_n) = \frac{\left(\lambda^2-(n-3)\lambda-(2n-3)\right)\left(\lambda^2-(n-1)\lambda-1\right)(\lambda+1)^{n-3}}{\lambda-n+1} \cdot Pol(K_n)$$

dir.

İspat. $K_n \vee_v^e K_n$ grafı $n = 5$ değeri için Şekil 6.7.'de çizilmiştir.



Şekil 6.7. K_5 ve $K_5 \vee_v^e K_5$ grafı

Benzer şekilde K_n tam grafı için v köşesinde kenar birleşim grafı olan $2n$ köşeli $K_n \vee_v^e K_n$ grafı oluşturulduğunda

$$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix}_{2n\times 2n}$$

komşuluk matrisi elde edilir. Yukarıdaki matris incelendiğinde sol üstte ve sağ altta kalan $n \times n$'lik kısımların K_n tam grafına ait komşuluk matrisi olduğu kolayca görülür. A matrisi kullanılarak elde edilen $K_n \bigvee_v^e K_n$ grafına ait karakteristik polinom

$$Pol(K_n \bigvee_v^e K_n) = |A - \lambda I_{2n}|$$

$$= \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & -\lambda & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & -\lambda \end{vmatrix}_{2n\times 2n}$$

şeklinde oluşturulur. Bu determinantta ilk olarak elementer satır işlemlerinden her $i = n+3, n+4, \cdots, 2n$ için $-R_{n+2} + R_i \to R_i$ operasyonu ardından ise elementer sütun işlemlerinden $C_{n+2} + C_{n+3} + C_{n+4} + \cdots + C_{2n} \to C_{n+2}$ operasyonu uygulanırsa

$$= \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & -\lambda & (n-1) & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & (n-2-\lambda) & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & -(1+\lambda) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -(1+\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -(1+\lambda) \end{vmatrix}_{2n\times 2n}$$

elde edilir. Burada her $i = n+3, n+4, \cdots, 2n$ ve $j = 1, 2, \cdots, n+2$ için $a_{ij} = 0$ olup determinantın değeri determinantın sol üstünde yer alan $(n+2)\times(n+2)$'lik kısmın determinantı ile sağ altta yer alan $(n-3)\times(n-3)$'lük kısmın determinantları çarpımına eşittir. Bu eşitlik

$$= \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda & (n-1) \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & (n-2-\lambda) \end{vmatrix}_{(n+2)\times(n+2)} \cdot \begin{vmatrix} -(1+\lambda) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -(1+\lambda) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -(1+\lambda) \end{vmatrix}_{(n-3)\times(n-3)}$$

şeklindedir. Elde edilen ikinci determinant $(n-3)\times(n-3)$ tipindeki diyagonal matrisin determinantı olup değeri diyagonal elemanların çarpımına eşittir. Baştaki $(n+2)\times(n+2)$ tipindeki kare matrisin determinantı ise son satıra göre açılırsa yukarıdaki determinantlar çarpımı

$$= (-1-\lambda)^{n-3} \cdot ((-1)^{2n+1} \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\lambda \end{vmatrix}_{(n+1)\times(n+1)}$$

$$+(n-2-\lambda)\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & \cdots & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -\lambda & \cdots & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\lambda \end{vmatrix}_{(n+1)\times(n+1)}\Bigg)$$

elde edilir. Her iki determinant son sütunlarına göre açılıp gerekli düzenlemeler yapıldığında K_n ve K_{n-1} tam graflarının karakteristik polinomlarını veren yeni determinantlar elde edilir. Bu polinomlar yerine yazıldığında istenen sonuca ulaşılır.

Sonuç 6.2.2. λ, $K_n \vee_v^e K_n$ grafının karakteristik polinomunun kökleri olmak üzere

$$Pol(K_n \vee_v^e K_n) = (\lambda+1)^{2n-4}(\lambda^2-(n-1)\lambda-1)(\lambda^2-(n-3)\lambda-(2n-3))$$

dir.

İspat. Lemma 4.1.1. kullanılarak $Pol(K_n)$'in formülü Teorem 6.2.1 de yerine yazılırsa istenen sonuç kolaylıkla elde edilir.

Örnek 6.2.3. $K_7 \vee_v^e K_7$ grafının karakteristik polinomunu ve spektrumunu hesaplayalım.

$n = 7$ için

$$\begin{aligned} Pol(K_7 \vee_v^e K_7) &= (\lambda+1)^{2\cdot 7-4}(\lambda^2-(7-1)\lambda-1)(\lambda^2-(7-3)\lambda-(2\cdot 7-3)) \\ &= (\lambda+1)^{10}(\lambda^2-6\lambda-1)(\lambda^2-4\lambda-11) \end{aligned}$$

şeklindedir ve bu polinomun kökleri spektrumu verir. Bu durumda $S(K_7 \vee_v^e K_7)$ spektrum olmak üzere

$$S(K_7 \vee_v^e K_7) = \{-1^{(10)}, 2 \pm \sqrt{15}, 3 \pm \sqrt{10}\}$$

olur.

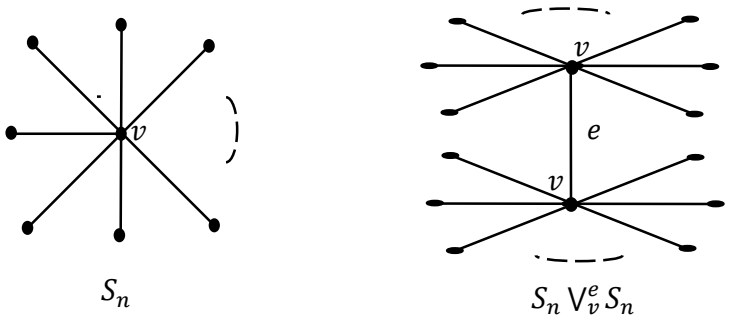
$K_n \vee_v^e K_n$ grafının karakteristik polinomunu ve spektrumunu bulmada oldukça kolaylık sağlayan yukarıdaki sonuçların benzerleri ikinci olarak da S_n yıldız grafı olmak üzere $S_n \vee_v^e S_n$ için oluşturulacaktır.

Teorem 6.2.4. S_n yıldız grafı için v köşesinde kenar birleşim grafı olan $S_n \vee_v^e S_n$'in karakteristik polinomu

$$Pol(S_n \vee_v^e S_n) = \begin{cases} -\lambda^{2n-2} + (-\lambda)^{n-2}(\lambda^2 - n + 1)Pol(S_n), & v \text{ köşesi merkez köşe ise} \\ (-\lambda)^{n-2}\left((\lambda^2 - n + 1)Pol(S_n) + \left(\frac{\lambda^2-n+2}{\lambda}\right)Pol(S_{n-1})\right) & \text{diğer durumlar} \end{cases}$$

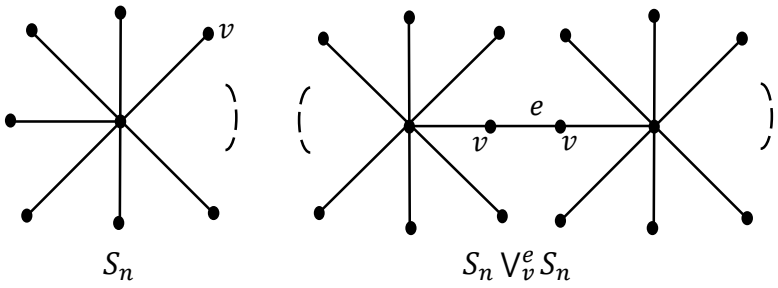
şeklindedir.

İspat. S_n yıldız grafında, v köşesi merkez köşe olmak üzere v köşesinde kenar birleşim grafı olan $S_n \vee_v^e S_n$ Şekil 6.8.'de, v köşesi uç köşe olmak üzere v köşesinde kenar birleşim grafı olan $S_n \vee_v^e S_n$ Şekil 6.9.'da verilmiştir.



S_n $\quad$ $S_n \vee_v^e S_n$

Şekil 6.8. S_n ile v merkez köşede kenar birleşim grafı $S_n \vee_v^e S_n$



Şekil 6.9. S_n ve v uç köşede kenar birleşim grafı $S_n \vee_v^e S_n$

$S_n \vee_v^e S_n$ grafının karakteristik polinomunu bulmak için öncelikle oluşturulan grafların A komşuluk matrisleri oluşturulur. Ardından ise $|A - \lambda I_{2n}|$ determinantı yazılıp $Pol(K_n \vee_v^e K_n)$ için yapılan elementer işlemlere benzer işlemler uygulandığında istenilen sonuçlara kolayca ulaşılır.

Sonuç 6.2.5. λ, $S_n \vee_v^e S_n$ grafının karakteristik polinomunun kökleri olmak üzere

$$Pol(S_n \vee_v^e S_n) = \begin{cases} \lambda^{2n-4}((\lambda^2 - n + 1)^2 - \lambda^2), & v \text{ köşesi merkez köşe ise} \\ \lambda^{2n-6}((\lambda^3 - (n-1)\lambda)^2 - (\lambda^2 - n + 2)^2) & \text{diğer durumlar} \end{cases}$$

ile ifade edilebilir.

İspat. Lemma 4.1.1.'de verilen $Pol(S_n)$ bağıntısı, Teorem 6.2.4.'de yerine yazılırsa istenilen sonuca kolayca ulaşılır.

Örnek 6.2.6. v köşesi S_6 grafının merkez köşesi olmak üzere $S_6 \vee_v^e S_6$ grafının karakteristik polinomunu ve spektrumunu hesaplayalım.

$n = 6$ için

$$\begin{aligned} Pol(S_6 \vee_v^e S_6) &= \lambda^{2\cdot 6-4}((\lambda^2 - 6 + 1)^2 - \lambda^2) \\ &= \lambda^8((\lambda^2 - 5)^2 - \lambda^2) \\ &= \lambda^8(\lambda^2 + \lambda - 5)(\lambda^2 - \lambda - 5) \end{aligned}$$

şeklindedir ve bu polinomun kökleri spektrumu verir. Bu durumda $S(S_6 \vee_v^e S_6)$ spektrum olmak üzere

$$S(S_6 \vee_v^e S_6) = \left\{0^{(8)}, \frac{1\pm\sqrt{21}}{2}, \frac{-1\pm\sqrt{21}}{2}\right\}$$

olur.

Örnek 6.2.7. v köşesi S_5 grafının bir uç köşesi olmak üzere $S_5 \vee_v^e S_5$ grafının karakteristik polinomunu hesaplayalım.

$n = 5$ için

$$\begin{aligned} Pol(S_5 \vee_v^e S_5) &= \lambda^{2\cdot5-6}((\lambda^3-(5-1)\lambda)^2-(\lambda^2-5+2)^2) \\ &= \lambda^4((\lambda^3-4\lambda)^2-(\lambda^2-3)^2) \\ &= \lambda^4(\lambda^3-4\lambda+\lambda^2-3)(\lambda^3-4\lambda-\lambda^2+3) \end{aligned}$$

şeklindedir.

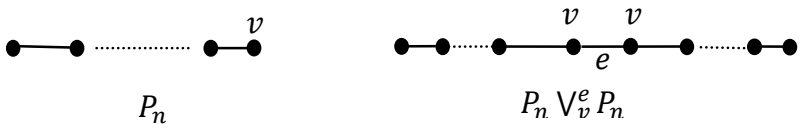
Bu bölümde son olarak P_n yol grafı olmak üzere $P_n \vee_v^e P_n$ köşe birleşim grafının polinomu incelenecektir.

Teorem 6.2.8. P_n yol grafının v uç köşesinde kenar birleşim grafı olan $P_n \vee_v^e P_n$'in karakteristik polinomu

$$Pol(P_n \vee_v^e P_n) = -\lambda Pol(P_n)Pol(P_{n-1}) - Pol^2(P_{n-1}) - Pol(P_n)Pol(P_{n-2})$$

şeklindedir.

İspat. P_n yol grafında v uç köşesinde kenar birleşim grafı olan $P_n \vee_v^e P_n$ Şekil 6.10.'da verilmiş olup bu grafın P_{2n} grafına ait olduğu aşikardır.



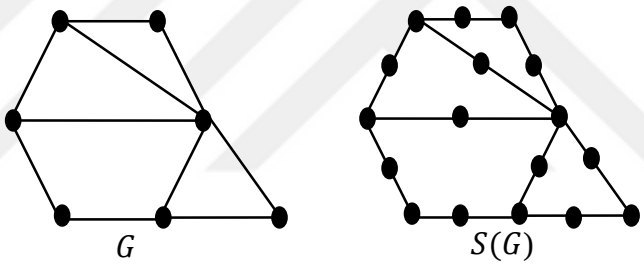
Şekil 6.10. P_n ve $P_n \vee_v^e P_n$ grafı

$Pol(K_n \vee_v^e K_n)$ ve $Pol(S_n \vee_v^e S_n)$ için yapılan hesaplamaların benzer adımları uygulandığında istenilen sonuca ulaşılır.

7. ALT BÖLÜM GRAFLARININ KARAKTERİSTİK POLİNOMLARI, İNDİRGEME BAĞINTILARI VE ENERJİLERİ

Yaygın bir kullanım alanına sahip olan grafları her an farklı bir şekilde görmek mümkündür. Bu bölümde alt bölüm graflarının tanımını verilip literatürde sıkça karşılaşılan özel graf türleri için önce alt bölüm grafları oluşturulacak ardından ise bu alt bölüm grafların karakteristik polinomları belirlenecektir. Bununla birlikte belirlenen bu polinomların literatürde bilinen polinomlar cinsinden indirgeme bağıntıları ve son olarak da enerji bağıntıları verilecektir.

Tanım 7.1. $G(V,E)$ bağlantılı, döngü içermeyen ve yönlendirilmemiş bir graf olsun. G grafının her bir kenarına derecesi 2 olacak şekilde yeni köşeler eklenmesi ile oluşturulan yeni grafa **alt bölüm grafı** denir ve $\mathbf{S}(\boldsymbol{G})$ ile gösterilir.



Şekil 7.1. Bir G grafı ve bu grafın $S(G)$ alt bölüm grafı

7.1. Alt Bölüm Grafların Karakteristik Polinomları

Bu bölümde literatürden iyi bilinen P_n, C_n, S_n, K_n ve $K_{m,n}$ graflarına ait alt bölüm grafları oluşturulup ardından elde edilen bu grafların karakteristik polinomları belirlenecektir.

İlk olarak P_n grafına Tanım 7.1'de verilen bilgi doğrultusunda alt bölüm işlemi uygulanacak ve elde edilen bölüm grafı incelenecektir.

Teorem 7.1.1. P_n'in alt bölüm grafı olan $\mathbf{S}(P_n)$ grafının karakteristik polinomu

$$Pol(\mathbf{S}(P_n)) = \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{k+1} \binom{2n-k-1}{k} \lambda^{2n-2k-1}$$

şeklindedir.

İspat. P_n yol grafında her kenara derecesi 2 olacak şekilde yeni köşeler eklenmesi ile oluşan $\mathbf{S}(P_n)$ grafı Şekil 7.2.'de verilmiş olup bu grafın P_{2n-1} grafına ait kolayca görülebilmektedir.



Şekil 7.2. $\boldsymbol{P_n}$ ve $\mathbf{S}(P_n)$ grafı

Bu durumda Sonuç 6.1.8 'den dolayı

$$\mathrm{Pol}\big(\mathbf{S}(P_n)\big) = \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{k+1} \binom{2n-k-1}{k} \lambda^{2n-2k-1}$$

şeklindedir.

İkinci olarak C_n grafı için alt bölüm işleminde elde edilen $\mathbf{S}(C_n)$ grafı incelenecektir.

Teorem 7.1.2. C_n'in alt bölüm grafı olan $\mathbf{S}(C_n)$ grafının karakteristik polinomu

$$Pol(\mathbf{S}(C_n)) = \left[\sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k T(2n,k) \lambda^{2n-2k} - 2 \right] + 2(-1)^n$$

şeklindedir. Burada $T(2n,k) = \binom{2n-k}{k} + \binom{2n-k-1}{k-1}$ olup $k \leq n$ ve $T(2n,0) = 1$ dir.

İspat. C_n devir grafında her kenara derecesi 2 olacak şekilde yeni köşeler eklenmesi ile oluşan $\mathbf{S}(C_n)$ grafının C_{2n} grafı ile aynı graflar olduğu oldukça açıktır. O halde

$$Pol(\mathbf{S}(C_n)\,) = Pol(C_{2n})$$

şeklindedir. Bu durumda Lemma 4.1.4. kullanılarak gerekli düzenlemeler yapıldığında

$$\mathrm{Pol}\big(\mathbf{S}(C_n)\big) = Pol(C_{2n}) = \left[\sum_{k=0}^{n-1}(-1)^k\, T(2n,k)\lambda^{2n-2k} - 2\right] + 2(-1)^n$$

olacak şekilde istenilen sonuca ulaşılır.

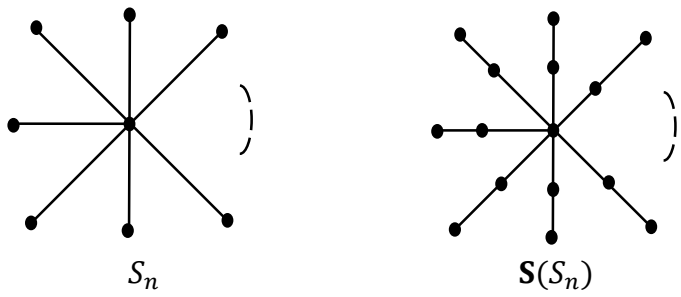
Bir sonraki adımda S_n grafı için alt bölüm işlemiyle elde edilen $\mathbf{S}(S_n)$ grafı incelenecektir.

Teorem 7.1.3. S_n'in alt bölüm grafı olan $\mathbf{S}(S_n)$ grafının karakteristik polinomu

$$Pol(\mathbf{S}(S_n)) = -\lambda(\lambda^2-1)^{n-2}(\lambda^2-n)$$

şeklindedir.

İspat. S_n devir grafında her kenara derecesi 2 olacak şekilde yeni köşeler eklenmesi ile oluşan $\mathbf{S}(S_n)$ grafı, daha anlaşılır olması açısından Şekil 7.3.'de verilmiştir.



Şekil 7.3. S_n ve S_n'in alt bölüm grafı $\mathbf{S}(S_n)$

Yukarıda verilen şekil dikkate alınarak oluşturulan $\mathbf{S}(S_n)$ grafının A komşuluk matrisi

$$A=\begin{bmatrix}0&0&\cdots&0&1&0&0&\cdots&0&0\\0&0&\cdots&0&0&1&0&\cdots&0&0\\0&0&\cdots&0&0&0&1&\cdots&0&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\0&0&\cdots&\cdots&0&0&0&\cdots&1&0\\1&0&\cdots&\cdots&0&0&0&\cdots&0&1\\0&1&\cdots&\cdots&0&0&0&\cdots&0&1\\0&0&1&\cdots&0&0&0&\cdots&0&1\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\0&0&0&\cdots&1&0&0&\cdots&0&1\\0&0&0&\cdots&0&1&1&\cdots&1&0\end{bmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

şeklindedir. Bu matris dikkatli bir şekilde incelendiğinde satır ve sütunlarının bazı özel durumlar oluşturduğu görülmektedir. Matrisin içi bu özel durumlar göz önünde bulundurularak parçalandığında $0_{(n-1)\times(n-1)}$, $0_{1\times(n-1)}$, $0_{(n-1)\times1}$, $0_{1\times1}$, $1_{(n-1)\times1}$, $1_{1\times(n-1)}$ ve I_{n-1} matrisleri elde edilir. Bu tezde I_{n-1} ifadesi $n-1$ boyutlu birim matris için, $0_{(n-1)\times(n-1)}$ ifadesi $n-1$ boyutlu sıfır matrisi için, $0_{1\times(n-1)}$ ifadesi tüm elemanları 0 dan oluşan $1\times(n-1)$ boyutlu matris için, $0_{(n-1)\times1}$ ifadesi tüm elemanları 0 dan oluşan $(n-1)\times1$ boyutlu matris için, $0_{1\times1}$ ifadesi elemanı yalnızca 0 olan 1×1 boyutlu kare matris için kullanılırken elemanları 1'den oluşan matrisler için de benzer gösterimlerden faydalanılacaktır. Bu gösterimleri kullanarak yukarıdaki komşuluk matrisi tekrar düzenlendiğinde

$$A=\begin{bmatrix}0_{(n-1)\times(n-1)}&I_{n-1}&0_{(n-1)\times1}\\I_{n-1}&0_{(n-1)\times(n-1)}&1_{(n-1)\times1}\\0_{(n-1)\times1}&1_{1\times(n-1)}&0_{1\times1}\end{bmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

elde edilir. $\mathbf{S}(S_n)$ grafının karakteristik polinomu $Pol(\mathbf{S}(S_n))=|\lambda I_{2n-1}-A|$ olup

$$Pol(\mathbf{S}(S_n))=\begin{vmatrix}\lambda I_{n-1}&-I_{n-1}&0_{(n-1)\times1}\\-I_{n-1}&\lambda I_{n-1}&-1_{(n-1)\times1}\\0_{1\times(n-1)}&-1_{1\times(n-1)}&\lambda\end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

şeklindedir. Bu son determinantta ilk $n-1$ sütun (-1) ile çarpılıp son sütuna eklenirse

$$Pol(\mathbf{S}(S_n)) = \begin{vmatrix} \lambda I_{n-1} & -I_{n-1} & -\lambda_{(n-1)\times 1} \\ -I_{n-1} & \lambda I_{n-1} & 0_{(n-1)\times 1} \\ 0_{1\times(n-1)} & -1_{1\times(n-1)} & \lambda \end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

elde edilir. Ardından son satır, ilk $n-1$ satıra eklenirse

$$Pol(\mathbf{S}(S_n)) = \begin{vmatrix} \lambda I_{n-1} & -I_{n-1} + (-1)_{(n-1)\times(n-1)} & 0_{(n-1)\times 1} \\ -I_{n-1} & \lambda I_{n-1} & 0_{(n-1)\times 1} \\ 0_{1\times(n-1)} & -1_{1\times(n-1)} & \lambda \end{vmatrix}_{(2n-1)\times(2n-1)}$$

şeklindeki determinant elde edilir. Bundan sonraki adımda uygun elementer satır-sütun işlemleri uygulanır ve gerekli düzenlemelerin ardından birinci sütuna göre determinant açılırsa

$$Pol\big(\mathbf{S}(S_n)\big) = -\lambda \begin{vmatrix} \lambda I_{n-1} & -I_{n-1} + (-1)_{(n-1)\times(n-1)} \\ -I_{n-1} & \lambda I_{n-1} \end{vmatrix}_{(2n-2)\times(2n-2)}$$

elde edilir. Elementer satır işlemlerinden $\frac{1}{\lambda}R_1 + R_n \to R_n$, $\frac{1}{\lambda}R_2 + R_{n+1} \to R_{n+1}$, $\cdots$, $\frac{1}{\lambda}R_{n-1} + R_{2n-2} \to R_{2n-2}$ işlemleri uygulanırsa

$$Pol\big(\mathbf{S}(S_n)\big) = -\lambda \begin{vmatrix} \lambda I_{n-1} & -I_{n-1} + (-1)_{(n-1)\times(n-1)} \\ 0_{(n-1)\times(n-1)} & \left(\frac{\lambda^2-1}{\lambda}\right) I_{n-1} + \left(-\frac{1}{\lambda}\right)_{(n-1)\times(n-1)} \end{vmatrix}_{(2n-2)\times(2n-2)}$$

$$= -\lambda |\lambda I_{n-1}| \cdot \left| \left(\frac{\lambda^2-1}{\lambda}\right) I_{n-1} + \left(-\frac{1}{\lambda}\right)_{(n-1)\times(n-1)} \right|_{(n-1)\times(n-1)}$$

$$= -\lambda^n \left| \left(\frac{\lambda^2-1}{\lambda}\right) I_{n-1} + \left(-\frac{1}{\lambda}\right)_{(n-1)\times(n-1)} \right|_{(n-1)\times(n-1)}$$

elde edilir. son determinantta elementer sütun işlemlerinden $C_2 + C_3 + C_4 + \cdots + C_{n-1} \to C_1$ uygulanırsa

$$Pol(\mathbf{S}(S_n)) = -\lambda^n \cdot \begin{vmatrix} \lambda-\frac{n}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ \lambda-\frac{n}{\lambda} & \lambda-\frac{2}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ \lambda-\frac{n}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \lambda-\frac{2}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ \lambda-\frac{n}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \lambda-\frac{2}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda-\frac{n}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & \lambda-\frac{2}{\lambda} \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)}$$

$$= -\lambda^n \left(\lambda-\frac{n}{\lambda}\right) \cdot \begin{vmatrix} 1 & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ 1 & \lambda-\frac{2}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ 1 & -\frac{1}{\lambda} & \lambda-\frac{2}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ 1 & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \lambda-\frac{2}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & \lambda-\frac{2}{\lambda} \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)}$$

elde edilir. Burada ise ilk satır -1 ile çarpılıp ikinci satırdan $(n-1)$. satıra kadar eklenirse

$$Pol(\mathbf{S}(S_n)) = -\lambda^n \left(\lambda-\frac{n}{\lambda}\right) \cdot \begin{vmatrix} 1 & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & -\frac{1}{\lambda} & \cdots & -\frac{1}{\lambda} \\ 0 & \lambda-\frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda-\frac{1}{\lambda} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda-\frac{1}{\lambda} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda-\frac{1}{\lambda} \end{vmatrix}_{(n-1)\times(n-1)}$$

determinantına ulaşılır. Bu determinantı birinci sütuna göre açılırsa

$$Pol(\mathbf{S}(S_n)) = -\lambda^n\left(\lambda - \frac{n}{\lambda}\right)\begin{vmatrix} \lambda - \frac{1}{\lambda} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda - \frac{1}{\lambda} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda - \frac{1}{\lambda} \end{vmatrix}_{(n-2)\times(n-2)}$$

elde edilir. Elde edilen $(n-2)\times(n-2)$ tipindeki determinant ise üst üçgen matrisin determinantı olup değeri köşegen üzerinde bulunan elemanların çarpımına eşittir. Böylece istenilen

$$Pol(\mathbf{S}(S_n)) = -\lambda(\lambda^2-1)^{n-2}(\lambda^2-n)$$

eşitliği elde edilir.

Teorem 7.1.3.'ün bir sonucu olarak $\mathbf{S}(S_n)$ grafının spektrumu

$$\mathrm{S}\big(\mathbf{S}(S_n)\big) = \{0, \mp\sqrt{n}, \mp 1^{(n-2)}\}$$

şeklindedir.

Benzer hesaplamalar K_n ve $K_{m,n}$ graflarının alt bölüm grafları için de yapılırsa aşağıdaki sonuçlara ulaşılır:

Teorem 7.1.4. K_n'in alt bölüm grafı olan $\mathbf{S}(K_n)$ grafının karakteristik polinomu $n \geq 1$ için

$$Pol(\mathbf{S}(K_n)) = (-1)^n\lambda^{\frac{n(n-3)}{2}}(\lambda^2-(n-2))^{n-1}(\lambda^2-2(n-1))$$

şeklindedir.

Teorem 7.1.4.'ün bir sonucu olarak $Pol(\mathbf{S}(K_n))$'in kökleri spektrumu vereceğinden $\mathbf{S}(K_n)$ grafına ait spektrumunun

$$S\big(\mathbf{S}(K_n)\big) = \left\{0^{\left(\frac{n(n-3)}{2}\right)}, \mp\sqrt{n-2}^{(n-1)}, \mp\sqrt{2(n-1)}\right\}$$

olduğu kolayca görülmektedir.

Teorem 7.1.5. $K_{m,n}$'nin alt bölüm grafı olan $\mathbf{S}(K_{m,n})$ grafının karakteristik polinomu

$$Pol\big(\mathbf{S}(K_{m,n})\big) = (-1)^n \lambda^{m+(m-1)(n-2)}(\lambda^2-(m+n))(\lambda^2-m)^{n-1}(\lambda^2-n)^{m-1}$$

şeklindedir.

Teorem 7.1.5.'in bir sonucu olarak $\mathbf{S}(K_n)$ grafının spektrumu

$$S\left(\mathbf{S}\big(K_{m,n}\big)\right) = \left\{0^{(m+(m-1)(n-2))}, \mp\sqrt{m}^{(n-1)}, \mp\sqrt{n}^{(m-1)}, \mp\sqrt{m+n}\right\}$$

şeklindedir.

7.2. Alt Bölüm Grafları için İndirgeme Bağıntıları

Bir önceki bölümde P_n, C_n, S_n, K_n ve $K_{m,n}$ grafları için alt bölüm graflarını oluşturup karakteristik polinomlarını belirlemiştik. Bu bölümde köşe sayısı artan bölüm grafların polinomlarını hesaplamada kolaylık sağlayacak bağıntılar geliştirilecektir.

Teorem 7.2.1. $\boldsymbol{S}(S_n)$, n köşeli bir yıldız grafın alt bölüm grafı olmak üzere $Pol\big(\boldsymbol{S}(S_n)\big)$ ile $Pol\big(\boldsymbol{S}(S_{n+1})\big)$ arasında

$$(\lambda^2-n)Pol\big(\boldsymbol{S}(S_{n+1})\big) = (\lambda^2-1)(\lambda^2-n-1)Pol\big(\boldsymbol{S}(S_n)\big) \qquad n \geq 4$$

şeklinde bir indirgeme bağıntısı vardır.

İspat. Teorem 7.1.3.'den $Pol(\mathbf{S}(S_{n+1})) = -\lambda(\lambda^2-1)^{n-1}(\lambda^2-n-1)$ şeklinde olduğu bilinmektedir. Buradan hareketle

$$\begin{aligned} Pol(\mathbf{S}(S_{n+1})) &= -\lambda(\lambda^2-1)^{n-1}(\lambda^2-n-1) \\ &= -\lambda(\lambda^2-1)^{n-2}(\lambda^2-1)(\lambda^2-n-1) \\ &= -\lambda(\lambda^2-1)^{n-2}(\lambda^2-1)(\lambda^2-n-1)\tfrac{(\lambda^2-n)}{(\lambda^2-n)} \\ &= (\lambda^2-1)\frac{(\lambda^2-n-1)}{(\lambda^2-n)}\cdot Pol\big(\boldsymbol{S}(S_n)\big) \end{aligned}$$

elde edilir. Gerekli düzenleme yapılarak

$$(\lambda^2-n)Pol\big(\boldsymbol{S}(S_{n+1})\big) = (\lambda^2-1)(\lambda^2-n-1)Pol\big(\boldsymbol{S}(S_n)\big) \qquad n \geq 4$$

sonucuna ulaşılır.

Teorem 7.2.2. $\boldsymbol{S}(K_n)$, n köşeli bir tam grafın alt bölüm grafı olmak üzere $Pol\big(\boldsymbol{S}(K_n)\big)$ ile $Pol\big(\boldsymbol{S}(K_{n+1})\big)$ arasında

$$Pol\big(\boldsymbol{S}(K_{n+1})\big) = -\lambda^{n-1}\frac{(\lambda^2-2n)(\lambda^2-n+1)^n}{(\lambda^2-n+2)^{n-1}(\lambda^2-2n+2)}Pol\big(\boldsymbol{S}(K_n)\big) \qquad n \geq 1$$

şeklinde bir indirgeme bağıntısı vardır.

İspat. Teorem 7.1.5.ten $Pol(\mathbf{S}(K_n))$ ve $Pol(\mathbf{S}(K_{n+1}))$ polinomlarının

$$Pol(\mathbf{S}(K_{n+1})) = (-1)^{n+1}\lambda^{\frac{(n+1)(n-2)}{2}}(\lambda^2-n+1)^n(\lambda^2-2n)$$

ve

$$Pol(\mathbf{S}(K_n)) = (-1)^n\lambda^{\frac{n(n-3)}{2}}(\lambda^2-n+2)^{n-1}(\lambda^2-2n+2)$$

şeklinde oldukları bilinmektedir. Teorem 7.2.1.'in ispatı için uygulanan işlem basamaklarının benzerleri burada da uygulanarak istenilen sonuca kolaylıkla ulaşılmaktadır.

Alt bölüm graflarında polinom indirgeme bağıntısı, son olarak iki parçalı tam grafın alt bölüm grafı olan $\mathbf{S}(K_{m,n})$ için oluşturulacaktır.

Teorem 7.2.3. $\boldsymbol{S}(K_{m,n})$, $m+n$ köşeli iki parçalı tam bir grafın alt bölüm grafı olmak üzere $Pol\left(\boldsymbol{S}(K_{m,n})\right)$ ile $Pol\left(\boldsymbol{S}(K_{m+1,n})\right)$ arasında

$$Pol\left(\boldsymbol{S}(K_{m+1,n})\right) = \frac{\lambda^{n-1}(\lambda^2-m-n-1)(\lambda^2-m-1)^{n-1}(\lambda^2-n)}{(\lambda^2-m-n)(\lambda^2-m)} Pol\left(\boldsymbol{S}(K_{m,n})\right)$$

şeklinde bir indirgeme bağıntısı vardır.

Buraya kadar alt bölüm operasyonu ile elde edilen yeni grafların polinomları ve bu polinomlar için indirgeme bağıntıları verilmiştir. Burada ise yeni bir alt bölüm operasyonu olan r-altbölüm işlemi tanımlanacaktır.

Tanım 7.2. $G(V,E)$ bir graf olsun. E kümesinden bir köşesi u diğer köşesi v olan bir uv kenarı alınsın. Alınan bu uv kenarı üzerine, her birinin derecesi 2 olacak şekilde, r- tane yeni köşe eklenerek uv kenarı P_{r+2} şekline dönüştürülsün. Bu işlem E kümesinin tüm elemanlarına uygulanarak oluşturulan yeni grafa $\boldsymbol{r}$**-alt bölüm graf** denir ve $\boldsymbol{S}^{\boldsymbol{r}}(G)$ ile gösterilir.

Teorem 7.2.4. $\boldsymbol{S}^{\boldsymbol{r}}(P_n)$, n köşeli yol grafın r-alt bölüm grafı olsun. Bu grafın karakteristik polinomu

$$Pol\left(\boldsymbol{S}^{\boldsymbol{r}}(P_n)\right) = Pol\left(P_{n(r+1)-r}\right) \quad \text{ve} \quad |V(\boldsymbol{S}^{\boldsymbol{r}}(C_n))| = n(r+1)-r$$

şeklindedir.

Teorem 7.2.5. $\boldsymbol{S^r}(C_n)$, n köşeli devir grafın r-alt bölüm grafı olsun. Bu grafın karakteristik polinomu

$$Pol\left(\boldsymbol{S^r}(C_n)\right) = Pol\left(C_{n(r+1)}\right) \quad \text{ve} \quad |V(\boldsymbol{S^r}(C_n))| = n(r+1)$$

şeklindedir.

7.3. Alt Bölüm Grafları için Enerji Bağıntıları

E. Hückel tarafından, bir G grafının özdeğerlerinin mutlak değerlerce toplamı olarak tanımlanan graf enerjisi kavramı, graf teorinin alt alanlarından biri olan spektral graf teori için de oldukça önemlidir (Hückel 1933). Ayrıca moleküler hesaplamalarda da oldukça sık başvurulan grafların enerjisi kavramı, bu bölümde yapısal olarak K_n, S_n ve $K_{m,n}$ graflarına ait alt bölüm graflar için incelenecektir (Cvetkovic ve ark. 1995, Adiga ve ark. 2007).

İlk olarak $\mathbf{S}(K_n)$ grafının enerji bağıntısı hesaplanacaktır.

Teorem 7.3.1. $E\left(\boldsymbol{S}(K_n)\right)$, $\mathbf{S}(K_n)$ grafının enerjisi olmak üzere bu grafın enerjisi

$$E\left(\boldsymbol{S}(K_n)\right) = 2\left((n-1)\sqrt{n-2} + \sqrt{2(n-1)}\right)$$

bağıntısı ile hesaplanır.

İspat. Teorem 7.1.4.'in bir sonucu olarak $\mathbf{S}(K_n)$ grafının spektrumu

$$\mathrm{S}\left(\mathbf{S}(K_n)\right) = \left\{0^{\left(\frac{n(n-3)}{2}\right)}, \mp\sqrt{n-2}^{(n-1)}, \mp\sqrt{2(n-1)}\right\}$$

şeklinde verilmiştir. Spektrumun elemanlarının mutlak değerlerinin toplamı alındığında istenilen sonuca kolaylıkla ulaşılır.

İkinci olarak $\mathbf{S}(S_n)$ grafının enerji bağıntısı hesaplanacaktır.

Teorem 7.3.2. $E\big(\boldsymbol{S}(S_n)\big)$, $\mathbf{S}(S_n)$ grafının enerjisi olmak üzere bu grafın enerjisi

$$E\big(\boldsymbol{S}(S_n)\big) = 2\big(n - 2 + \sqrt{n}\big)$$

bağıntısı ile hesaplanır.

İspat. Teorem 7.1.3.'ün bir sonucu olarak $\mathbf{S}(S_n)$ grafının spektrumu

$$\mathrm{S}\big(\mathbf{S}(S_n)\big) = \{0, \mp 1^{n-2}, \mp\sqrt{n}\}$$

şeklinde verilmiştir. Spektrumun elemanlarının mutlak değerlerinin toplamı alındığında istenilen sonuca kolaylıkla ulaşılır.

Bu bölümde son olarak ise $\mathbf{S}\big(K_{m,n}\big)$ grafı için enerji bağıntısı verilecektir.

Teorem 7.3.3. $E\left(\boldsymbol{S}\big(K_{m,n}\big)\right)$, $\mathbf{S}\big(K_{m,n}\big)$ grafının enerjisi olmak üzere bu grafın enerjisi

$$E\left(\boldsymbol{S}\big(K_{m,n}\big)\right) = 2\big(\sqrt{m+n} + (n-1)\sqrt{m} + (m-1)\sqrt{n}\big)$$

bağıntısı ile hesaplanır.

İspat. Teorem 7.1.5.'in bir sonucu olarak $\mathbf{S}\big(K_{m,n}\big)$ grafının spektrumu

$$\mathrm{S}\left(\mathbf{S}\big(K_{m,n}\big)\right) = \left\{0^{(m+(m-1)(n-2))}, \mp\sqrt{m}^{(n-1)}, \mp\sqrt{n}^{(m-1)}, \mp\sqrt{m+n}\right\}$$

şeklinde verilmiştir. Spektrumun elemanlarının mutlak değerlerinin toplamı alındığında istenilen sonuca kolaylıkla ulaşılır.

8. BULGULAR, TARTIŞMA VE SONUÇ

8.1. Bulgular

Bu tezde klasik graf enerjisi ile ilgili dört ana konu incelenmiştir. Bu dört konudan birisinde var olan sonuçlara yenileri eklenmiş, üçünde ise tamamen ilk defa çalışılan yeni sonuçlar elde edilmiştir.

Ele alınan ilk problem grafların spektral (karakteristik) polinomları ile ilgilidir. Bu problem daha önce çeşitli bilim insanları tarafından çalışılmış olup burada varolan sonuçlara yenileri eklenmiştir. Devir, patika, yıldız, tam graflar gibi belli başlı graf sınıflarının karakteristik polinomları hesaplanmış ve bunlar arasında indirgeme bağıntıları elde edilmiştir.

İkinci problemde patika ve devir graflarının graf enerjileri arasında indirgeme bağıntıları elde edilmiştir. Bu tür bir indirgeme bağıntısı yardımıyla örneğin 5 köşeli bir grafın enerjisini bildiğimizde 10 köşeli, 20 köşeli, 40 köşeli, vs. benzer grafların enerjilerini kolayca hesaplamak mümkün olmaktadır.

Üçüncü problemde graf birleşiminin karakteristik polinoma ve grafın enerjisine etkisi hesaplanmıştır.

Dördüncü problemde ise kimyasal uygulamaları olan alt bölme graflarının enerjileri, grafın kendi enerjisi cinsinden hesaplanmıştır.

8.2. Tartışma ve Sonuç

Bu tezde graf enerjisi ile ilgili büyük çoğunluğu yeni ve tümü orijinal sonuçlar elde edilmiştir. Enerji kavramının kimyasal uygulamaları nedeniyle bu tezde bulunan sonuçların hem bu konuda çalışacak matematikçilere, hem de konunun moleküler boyuttaki uygulamalarını yapan kimyacılara faydalı olacağı ve yol göstereceği düşünülmektedir.

Bu tezde elde edilen sonuçlardan hareketle daha ileri çalışmalar da yapılabilir. Örneğin, alt bölme grafları dışındaki diğer türetilmiş grafların enerjileri, ana grafın enerjisi cinsinden hesaplanabilir. Benzer şekilde iki graftan bir işlemle elde edilen yeni bir grafın

enerjisi, bileşen grafların enerjilerine bağlı olarak elde edilebilir. Graf enerjisi kavramı diğer graf enerjileriyle karşılaştırılabilir ve yapılacak mukayese sonucunda hangi uygulamalarda hangi enerji türünün kullanımının avantajlı olduğu belirlenebilir. Diğer graf türleri için enerji hesabı yapılabilir. Ayrıca graf enerjisi kavramı, diğer graf kavramlarıyla ilişkilendirilebilir.

KAYNAKLAR

Adiga, C., Khoshbakht, Z., Gutman, I., 2007. More graphs whose energy exceeds the number of vertices, *Iranian Journal of Mathematical Sciences and Informatics*, 2(2), 57-62.

Balakrishnan, R., Ranganathan, K. 2012. A Textbook of Graph Theory, Springer, New York., 425 pp.

Berge, C. 2001. The Theory of Graphs, Fletcher & Son Ltd., UK.

Biggs, N. L., Lloyd, E. K., Wilson, R. J. 1986. Graph Theory 1736-1936, *Oxford University Press, London.*

Bollobas, B. 1998. Modern Graph Theory, *Springer, New York.*

Bondy, J. A., Murty, U. S. R. 2008. Graph Theory, *Springer, New York.*

Brouwer, A. E., Haemers, W. H., 2012. Spectra of Graphs, *Springer, New York.*

Chen, W. 1976. Applied Graph Theory, *North-Holland Publishing Company, New York.*

Cvetkovic, D., Doob, M., Sachs, H., 1995. Spectra of Graphs - Theory and Aplications, *Academic Press, Heidelberg.*

Çelik, F. 2016. Graflar ve Enerji. Yüksek Lisans Tezi, Uludağ Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Matematik Anabilim Dalı, Bursa.

Çelik, F., Cangül, İ. N., 2017. Formulae and Recurrence Relations on Spectral Polynomials of Some Graphs. *Advanced Studies Contemporary Mathematics*, 27 (3): 325-332.

Çelik, F., Cangül, İ. N., 2018. Some Recurrence Relations for The Energy of Cycle and Path Graphs. *Proceeding of the Jangjeon Mathematical Society*, 21 (3): 347-355.

Çelik, F., Cangül, İ. N., 2019. On the Spectra of Cycles and Paths, *Turkic World of Mathematical Society Journal of Applied and Engineering Mathematics*, 9 (3): 571-580.

Çelik, F., Şanlı, U., Cangül, İ. N., 2021. The Spectral Polynomials of Two Joining Graphs: Splices and Links, *Boletim da Sociedade Paranaense de Matemática*, 39: 1-12.

Çevik, A. S., Gutman, I., Güngör, A. D., Bozkurt, S. B., 2010. Randic Matrix and Randic Energ, *Communications in Mathematical and in Computer*, 64 (1): 239-250.

Foulds, L. R. 1992. Graph Theory Applications, *Springer, New York.*

Golumbic, M. C., Hartman, I. B. 2005. Graph Theory, Combinatorics and Algorithms,

Springer, New York.

Gutman, I., 1978. The Energy of a Graph. *Ber. Math. Statist. Sekt. Forshungsz. Graz* 103, 1−22.

Hückel, E., 1933. Die freien Radikale der organischen Chemie, *Zeitschrift für Physik* 83, 632-668.

Harary, F. 1994. Graph Theory, *Addison-Wesley, USA.*

Harris, J. M., Hirst, J. L., Mossinghoff, M. J. 2008. Combinatorics and Graph Theory, *Springer, New York.*

Li, X., Shi, Y., Gutman, I., 2012. Graph Energy. *Springer, New York.*

Nikiforov, V., 2007. The energy of graphs and matrices. *J. Math. Anal. Appl.* 326, 1472-1475.

Şanlı, U., Çelik, F., Delen, S., Cangül, İ. N., 2020. Connectedness Criteria for Graphs by Means of Omega Invariant, *FILOMAT* 34 (2): 1-6

Togan, M., Yurttaş, A., Şanlı, U., Çelik, F., Cangül, İ. N., 2020. Inverse problem for Bell Index, *FILOMAT* 34 (2): 1-7.

Walikar, H. B., Ramane, H. S., Hampiholi, P. R., 1999. On the energy of a graph, in: R. Balakrishnan, H. M. Mulder, A. Vijayakumar (Eds.), Graph Connections, *Allied Publishers, New Delhi*, pp. 120-123.

West, D. B. 1996. Introduction to Graph Theory. *Upper Saddle River, Prentice Hall*.

Yurttaş Güneş, A., Togan, M., Çelik, F., Cangül, İ. N., 2019. Cut Vertex and Cut Edge Problem for the Topological Indices of Graphs, *Journal of Taibah University for Science*, 13 (1): 1175-1183.