

**T.C.
NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÖNLÜ VE YÖNSÜZ GRAFLARIN ENERJİSİ

**Tezi Hazırlayan
Kahraman BİRGİN**

**Tez Danışmanı
Yrd. Doç. Dr. Sezer SORGUN**

**Matematik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi**

**Eylül 2014
NEVŞEHİR**

**T.C.
NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÖNLÜ VE YÖNSÜZ GRAFLARIN ENERJİSİ

**Tezi Hazırlayan
Kahraman BİRGİN**

**Tez Danışmanı
Yrd. Doç. Dr. Sezer SORGUN**

**Matematik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi**

**Eylül 2014
NEVŞEHİR**

Yrd. Doç. Dr. Sezer SORGUN danışmanlığında **Kahraman BİRGİN** tarafından hazırlanan "**Yönlü ve Yönsüz Grafların Enerjisi**" başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalında **Yüksek Lisans Tezi** olarak kabul edilmiştir.

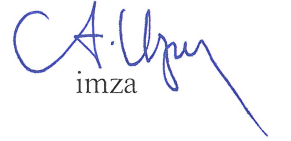
04/09/2014

JÜRİ

Başkan : (Doç.Dr.Necdet BATIR)


imza

Üye : (Doç. Dr. Aslıhan KARATEPE)


imza

Üye : (Yrd. Doç. Dr. Sezer SORGUN)


imza

ONAY:

Bu tezin kabulü Enstitü Yönetim Kurulunun...10/09/2014...tarih ve...2014/33-18... sayılı kararı ile onaylanmıştır.


Doç.Dr. Şahlan ÖZTÜRK
Enstitü Müdürü

TEZ BİLDİRİM SAYFASI

Tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada yer alan bütün bilgilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu ve bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.


Kahraman BİRGİN

TEŐEKKÜR

Bu tez, teŐekkürü hak eden kiŐilerin yardım, emek ve destekleri ile birlikte zorlu bir alıŐma sürecinin sonucudur. Öncelikle alıŐmam sırasında zorluklarla karŐılaŐıp ümidimi yitirdiĐim her anda motivasyonumun güçlenmesine sebep olan, tez yazma sürecimin baŐından sonuna kadar bana verdiĐi sınırsız destek ve teŐviklerini esirgemeyen, tezimin en ince ayrıntısıyla ilgilenip büyük bir sabır ve titizlik gösteren, Őüphesiz bir teŐekkürden çok fazlasını hak eden, bu tezin ortaya ıkmasında engin bilgi ve tecrübelerinden yararlandıĐım, alıŐmama bilimsel temeller ıŐıĐında en son Őeklini veren kıymetli tez hocam ve danıŐmanım Yrd. Do. Dr. Sezer Sorgun 'a, bu alıŐma süresince bana hep yardımcı olan ve desteĐini hiç esirgemeyen çok kıymetli arkadaŐım ArŐ. Gör. Hatice TOPCU' ya, manevi olarak hep yanımda olduklarını hissettiren sevgili aileme tüm kalbimle teŐekkür ediyorum.

YÖNLÜ VE YÖNSÜZ GRAFLARIN ENERJİSİ
(Yüksek Lisans Tezi)

Kahraman BİRGİN

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Eylül 2014

ÖZET

Bir grafin enerjisi komşuluk matrisinin mutlak değerlerinin toplamıdır. Bu kavram ilk olarak 1978 yılında Ivan Gutman tarafından ortaya koyulmuştur. Bu yıldan itibaren kapsamlı çalışmalar yapılmıştır. Bu tez çalışmasında graf enerjisi ile ilgili önemli bazı sonuçlar incelenmiştir. Çalışmanın ikinci bölümünde, graf teorisi ve lineer cebir üzerine temel kavramlar tanıtılmıştır. Aynı zamanda bu iki teori arasında önemli bağıntılarda verilmiştir.

Üçüncü bölümde, graf enerjisi için alt ve üst sınırlar incelenmiştir. Bu sınırlar literatürde enerji ile ilgili birçok açık problemin çözülmesi için oldukça kullanışlıdır. Son yıllarda maksimal ve minimal enerjili graflar üzerine birçok çalışma yapılmıştır. Bu çalışmalarda temel problemlerden biri, “hangi graflar maksimal veya minimal enerjiye sahiptir?” sorusudur. Bu noktada tezin dördüncü ve son bölümünde bazı bilinen graflar için minimal veya maksimal enerjili olup olmadıklarının karakterizasyonu yapılmıştır. Üstelik yukarıda belirtilen soruyla ilgili bazı açık problemler de verilmiştir.

Anahtar kelimeler: *Graf, Yönlü Graf, Komşuluk Matrisi, Spektrum, Enerji*
Tez Danışman: Yrd. Doç. Dr. Sezer SORGUN
Sayfa Adeti: 50

THE ENERGY OF DIRECTED AND UNDIRECTED GRAPHS
(M. Sc. Thesis)

Kahraman BİRGİN

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

September 2014

ABSTRACT

The energy of a graph is the sum of the absolute values of the eigenvalues of its adjacency matrix. This concept is first brought to mathematics by Ivan Gutman in 1978. In this thesis, it is aimed to do an extensively study on energy of directed and undirected graphs. In the 2nd section of this study, basic concepts on graph theory and linear algebra are introduced. Simultaneously, some important relations between them are introduced.

In the 3rd section, some known upper and lower bounds on graph energy for directed and undirected graphs are given. These bounds are useful for getting the solution of some open problems about the energy in the literature. Recently, researchers interest in graphs with maximal and minimal energy. That is; they search affirmative answer on the question “Which graphs have maximal or minimal energy?”. In this point, it is focused this question. In the last section of the study, the class of known graphs with maximal or minimal energy are characterized. Moreover, some open problems on the question are mentioned in the section.

Keywords: Graph, Digraph, Adjacency Matrix, Spectrum, Energy.
Thesis Supervisor: Asist. Prof. Dr. Sezer SORGUN
Page Number: 50

İÇİNDEKİLER

| | |
|---|------|
| KABUL VE ONAY SAYFASI | i |
| TEZ BİLDİRİM SAYFASI | ii |
| TEŞEKKÜR | iii |
| ÖZET..... | iv |
| ABSTRACT..... | v |
| İÇİNDEKİLER | vi |
| ŞEKİLLER LİSTESİ | viii |
| SİMGE VE KISALTMALAR LİSTESİ..... | ix |
| 1. BÖLÜM | |
| GİRİŞ | 1 |
| 2. BÖLÜM | |
| TEMEL TANIM VE KAVRAMLAR | 3 |
| 2.1. <i>Graf Teorisi</i> | 3 |
| 2.2. <i>Matris Teorisi</i> | 10 |
| 2.3. <i>Graflar ve Matrisler</i> | 14 |
| 3. BÖLÜM | |
| YÖNLÜ VE YÖNSÜZ GRAF ENERJİSİ İÇİN SINIRLAR..... | 21 |
| 3.1. <i>Yönsüz Graflar</i> | 21 |
| 3.2. <i>Yönlü Graflar</i> | 31 |
| 4. BÖLÜM | |
| MİNİMAL VE MAKSİMAL ENERJİLİ GRAFLAR VE BAZI AÇIK PROBLEMLER | 37 |
| 5. BÖLÜM | |
| SONUÇ VE ÖNERİLER | 45 |

| | |
|-----------------|----|
| KAYNAKLAR | 46 |
| ÖZGEÇMİŞ | 50 |

ŞEKİLLER LİSTESİ

| | | |
|-------------|---|----|
| Şekil 2.1. | Pendant nokta örneği. | 4 |
| Şekil 2.2. | İlmek ve katlı kenar örneği. | 4 |
| Şekil 2.3. | Bağlantılı ve bağlantısız graf örnekleri. | 5 |
| Şekil 2.4. | Graf çapı, yarıçapı, merkez noktası örnekleri | 6 |
| Şekil 2.5. | Tam graf örnekleri. | 6 |
| Şekil 2.6. | Yıldız, çift yıldız, kuyruklu yıldız örnekleri. | 7 |
| Şekil 2.7. | İki parçalı tam graf örneği. | 8 |
| Şekil 2.8. | Ağaç; tek döngülü ve çift döngülü graf örnekleri | 9 |
| Şekil 2.9. | Karışık (mixed) graf örneği | 10 |
| Şekil 2.10. | T_{d_i, d_j} graf örneği. | 15 |
| Şekil 2.11. | İzomorfik graf örneği. | 17 |
| Şekil 2.12. | Yönlü graf örneği. | 19 |
| Şekil 2.13. | Hiper enerjik graf örneği. | 20 |
| Şekil 3.1. | Pseudo regüler graf örneği. | 26 |
| Şekil 3.2. | 2 –uzunluklu $\frac{n}{2}$ adet yönlü döngü kopyasına sahip bir yönlü graf örneği. | 31 |
| Şekil 4.1. | \mathcal{F}_n ve \mathcal{M}_n graf örnekleri. | 40 |
| Şekil 4.2. | Bir tarafı iki noktalı İki parçalı tam graf örneği. | 40 |
| Şekil 4.3. | Tek döngülü graf örnekleri. | 41 |
| Şekil 4.4. | P_n^ℓ graf örneği. | 42 |
| Şekil 4.5. | $P_n^{6,6}$ graf örneği. | 43 |
| Şekil 4.6. | \mathfrak{B}_n graf örneği. | 43 |

SİMGE VE KISALTMALAR LİSTESİ

| | |
|---|--|
| $\mathbf{G} = (\mathbf{V}, \mathbf{E})$ | V noktalı E kenarlı yönsüz graf |
| \mathcal{D} | Yönlü graf |
| $\mathbf{v} \sim \mathbf{u}$ | Komşu noktalar |
| $\mathbf{d}(\mathbf{v})$ | Bir v noktasının derecesi |
| $\Delta(\mathbf{G})$ | Maksimum derece |
| $\delta(\mathbf{G})$ | Minimum derece |
| \mathbf{K}_n | Tam graf |
| $\mathbf{K}_{n,m}$ | $n + m$ noktalı iki parçalı tam graf |
| \mathbf{P}_n | Yol graf |
| \mathbf{C}_n | Döngü graf |
| \mathbf{S}_p | p noktalı yıldız graf |
| $\mathbf{S}_{p,q}$ | $p + q$ noktalı çift yıldız graf |
| \mathcal{T}_n | Bütün n noktalı ağaçların ailesi |
| Φ_n | Mükemmel eşlemeli ağaçların ailesidir. |
| $\Omega_{n,d}$ | Nokta dereceleri $d + 1$ veya küçük olan mükemmel eşlemeli alt ağaç ailesi |
| $\mathcal{G}(n, \ell)$ | n noktalı ve C_ℓ döngü içeren bütün tek döngülü grafların ailesi |
| \mathcal{A}_n^ℓ | C_ℓ döngüsünün bir noktasına $n - \ell$ kenar eklenerek elde edilen graf |
| \mathcal{P}_q | Paley graf |
| \mathcal{F}_n | $K_{1, \frac{n}{2}-1}$ yıldız grafının her bir noktasına bir kenar eklenerek elde edilen graftır |
| \mathcal{M}_n | Tarak graf |
| $\mathbf{A} \in \mathbf{M}_n$ | $n \times n$ tipinde matris |
| $\rho(\mathbf{A})$ | A matrisinin spektral yarıçapı |

| | |
|-------------------------------|--|
| $\mathbf{R}_A(\mathbf{x})$ | Rayleigh oranı |
| $\mathbf{A}(\mathbf{G})$ | Komşuluk matrisi |
| λ_i | G grafinin i . öz değeri |
| ζ_i | Yönlü \mathcal{D} grafinin i . öz değeri |
| $\mathbf{n}_0(\mathbf{G})$ | G' nin sıfırlık değeri |
| $\mathcal{E}(\mathbf{G})$ | G' nin enerjisi |
| $\mathbf{G} \cong \mathbf{H}$ | İzomorfik graflar |

1.BÖLÜM

GİRİŞ

Graf enerji kavramı ilk defa 1978 yılında Avusturya’ da düzenlenen bir konferansta matematik literatürüne Gutman tarafından getirilmiştir [1]. Bu tarihten itibaren çeşitli kitap ve makalelerde konu olarak yer almıştır [2,3,4,5]. Fakat kimyasal kökleri 1940’ lı yıllara dayanır. Yüzyılın sonuna doğru bu konu matematik dünyasının ilgisini çekmiştir. Böylece graf enerjisinin dünya çapında matematiksel araştırması etkin bir biçimde başlamıştır. Enerjinin matematiksel çalışmaları üzerine son zamanlarda yapılan çalışmalar ki özellikle 2000’ li yıllarda yapılanlar dikkate değerdir.

Graf enerjisi kuantum teorisine dayanan kimyasal çalışmaların matematikte tasarlanmış olması yönüyle teorik kimyacıların büyük bir kısmının da ilgisini çekmiştir. Çünkü graf enerjisi matematik alanındaki araştırmalardan kimya odaklı olan ender konulardan biridir.

Graf enerjisi özellikle Spektral Graf Teorisi alanının bir konusudur. Spektral Graf Teorisi lineer cebir uygulamaları yönünden zengin bir disiplin olup komşuluk matrisi, Laplasyan matrisi gibi grafların temsil ettiği matrislerin öz değerleri, öz vektörleri ve karakteristik polinomları v.b. konularla ilgilenir.

Enerji konusu genel olarak iki temel probleme odaklanır. Birinci problem, grafların bazı özel sınıfları içinde enerji için ekstrem değerler veya en iyi sınırlar bulmaktır. Diğer problem ise verilen graf sınıflarından hangi grafların maksimum ve minimum enerjili olması problemidir. Genelde bu problemlere olumlu cevaplar bulmak zordur. Literatürde bu iki probleme dayalı birçok araştırma yapılmış olup hala bazı önemli açık problemler çözülememiştir.

Yukarıda belirtilen problemler ışığında bu tezin amacı da temel problemlerle ilgili yapılan çalışmaları geniş bir biçimde incelemektir. Tezin ikinci bölümünde bazı temel tanım ve kavramlar verilmiştir. Ayrıca bu bölümde literatürde temel teşkil eden bazı önemli teorem ve sonuçlarda yer almaktadır. Graf enerjisi tanımı verilerek lineer cebir konuları ile yakın ilişkilerini içeren önemli sonuçlar da sunulmuştur.

Üçüncü bölümde, grafların enerjisi için nokta sayısı, kenar sayısı, v.b. birçok graf parametresine bağlı bazı alt ve üst sınırlar verilmiştir. Bu bölüm yönlü graflar ve yönsüz graflar olmak üzere iki kısma ayrılmıştır.

Dördüncü ve son bölümde, maksimal enerjili ve minimal enerjili graflar karakterize edilmiştir. Ayrıca bu bölümde temel problemlerden hareketle bazı özel graf sınıfları (minimal veya maksimal enerjili) incelenmiştir. Ayrıca halen açık olan birçok problemlerden de bahsedilmiştir.

2. BÖLÜM

TEMEL TANIM VE KAVRAMLAR

2.1. Graf Teorisi

Tanım 2.1.1. Bir $G = (V, E)$ grafi boştan farklı sonlu bir V kümesi ve $E = \{u, v\}: u, v \in V\}$ kümesinden oluşur. V kümesinin elemanlarına grafin *noktaları*, E kümesinin elemanlarına da grafin *kenarları* denir.

Tanım 2.1.2. $G = (V, E)$ bir graf ve $u, v \in V$ olsun. Eğer, $e = \{u, v\}$ olacak biçimde bir $e \in E$ kenarı varsa u ve v noktaları *komşu noktalar*dır denir ve $u \sim v$ ile gösterilir. Eğer $e = \{v\}$ ise v noktası kendisine komşudur denir. $v \in V$ olmak üzere v ' nin *komşuluk* kümesi

$$N_G(v) = \{u \in V: u \sim v\} \quad (2.1)$$

şeklinde tanımlanır.

Tanım 2.1.3. $G = (V, E)$ bir graf ve $v \in V$ olsun. Bir v noktasının *derecesi*, v noktasına komşu olan noktaların sayısıdır. $deg(v)$ ya da $d(v)$ ile gösterilir. $G = (V, E)$ grafının noktaları v_1, v_2, \dots, v_n olsun. Buna göre bu grafin *maksimum* ve *minimum dereceleri* sırasıyla

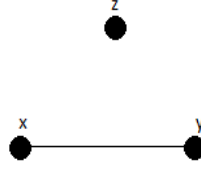
$$\Delta(G) = \max\{deg(v_i): 1 \leq i \leq n\}$$

ve

$$\delta(G) = \min\{deg(v_i): 1 \leq i \leq n\}$$

olarak tanımlanır. $v_i \in V$ olmak üzere v_i ye komşu olan noktaların derecelerinin ortalaması m_i ile gösterilir. Ayrıca m_i , V ' nin ortalama 2-derecesi olarak da bilinir.

Tanım 2.1.4. Derecesi sıfır olan noktaya *ayrık nokta* (*isolated vertex*) ve derecesi bir olan noktaya *pendant nokta* denir.



Şekil 2.1. z noktası ayırık noktadır.

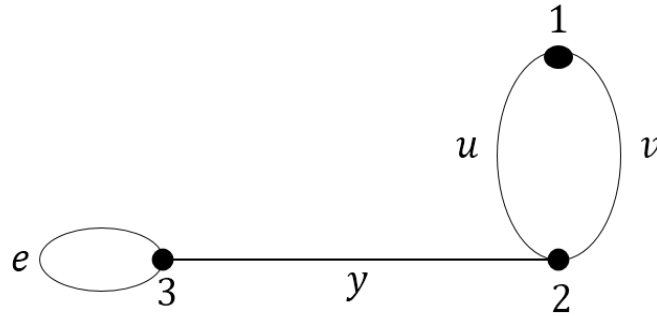
Tanım 2.1.5. Bir grafın derecelerinin artmayan biçimde sıralanmasıyla oluşturulan diziyeye *derece dizisi* denir.

Teorem 2.1.6. Bir grafın derecelerinin toplamı kenarlarının iki katına eşittir. Yani, d_i , i noktasının derecesi ve e , grafın kenar sayısı olmak üzere

$$\sum_{i=1}^n d_i = 2e$$

eşitliği sağlanır [6].

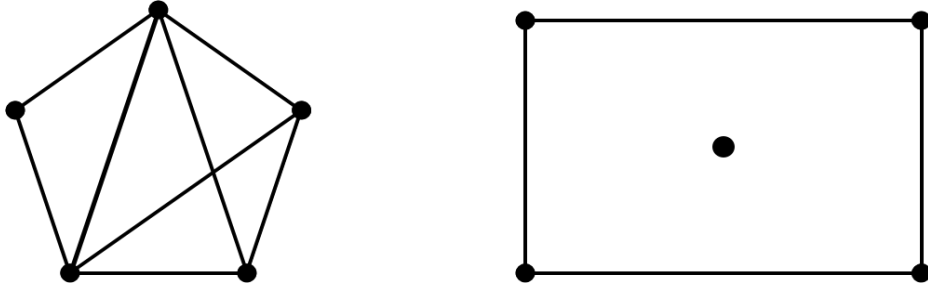
Tanım 2.1.7. $G = (V, E)$ bir graf ve $u, v \in V$ olsun. Eğer $e = \{V\}$ olacak biçimde bir $e \in E$ varsa e' ye bir *ilmek (loop)* denir. Eğer E kümesinde $g = \{u, v\} = f$ olacak biçimde farklı iki g ve f kenarı varsa bu kenarlara *katlı kenar (multiple edge)* denir.



Şekil 2.2. İlmek ve katlı kenar örneği

Tanım 2.1.8. Yönsüz bir G grafı, herhangi bir *ilmek (loop)* ve katlı kenar içermiyorsa bu grafa *basit graf* denir.

Tanım 2.1.9. G boştan farklı bir graf olmak üzere G 'nin herhangi iki noktası bir yol (path) oluşturuyorsa G 'ye *bağlantılı (connected)* graf denir. Bağlantılı olmayan grafa *bağlantısız* graf denir.



Şekil 2.3. Bağlantılı ve bağlantısız graf örnekleri

Tanım 2.1.10. $G = (V, E)$ bir graf ve $v_0, v_1, \dots, v_n \in V$, $e_0, e_1, \dots, e_n \in E$ olmak üzere v_0 ve v_n noktaları arasında $v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_n, v_n \in V$ şeklinde yazılan n –uzunluklu noktaların ve kenarları oluşturduğu sonlu diziye bir *yürüme* denir. Bir yürüyüşteki kenar sayısına o yürümenin *uzunluğu* denir. Hiçbir kenarın tekrarlanmadığı yürümeye *gezi (trail)* ve hiçbir noktanın tekrarlanmadığı yürümeye *yol (path)* denir.

Tanım 2.1.11. G grafında alınan herhangi iki nokta çifti arasındaki en büyük uzaklığa G 'nin çapı (diameter) denir ve $diam(G)$ biçiminde gösterilir.

Bir u noktasının *dışmerkezliği*

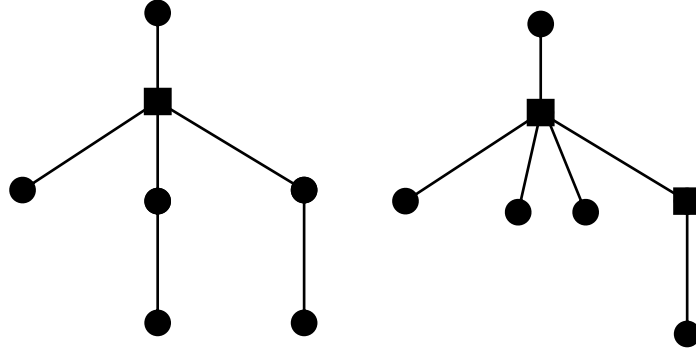
$$\varepsilon(u) = \max_{v \in V} d(u, v)$$

ve G 'nin *yarıçapı*

$$r(G) = \min_{u \in V} \varepsilon(u)$$

ile gösterilir. Üstelik bir grafın *merkezi* $r(G)$ 'ye eşit olan graf dış merkezliklerinin kümesi olarak tanımlanır.

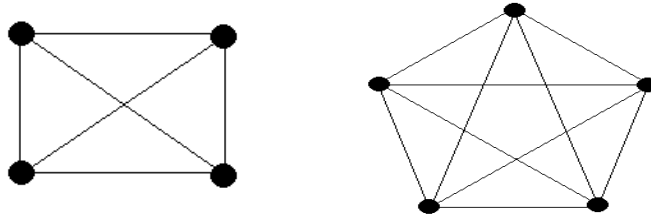
Tanım 2.1.10 ve Tanım 2.1.11' deki kavramlar aşağıdaki graf örneklerinde gösterilmiştir. (Bknz Şekil 2.4.)



Şekil 2.4. Sırasıyla G_1 ve G_2 grafları

Şekil 2.4.' de verilen graflar için merkez noktaları ■ sembolü ile verilmiştir. Dikkatli bakılırsa $r(G_1) = r(G_2) = 2$ ve $diam(G_1) = 4$, $diam(G_2) = 3$ olduğu görülür.

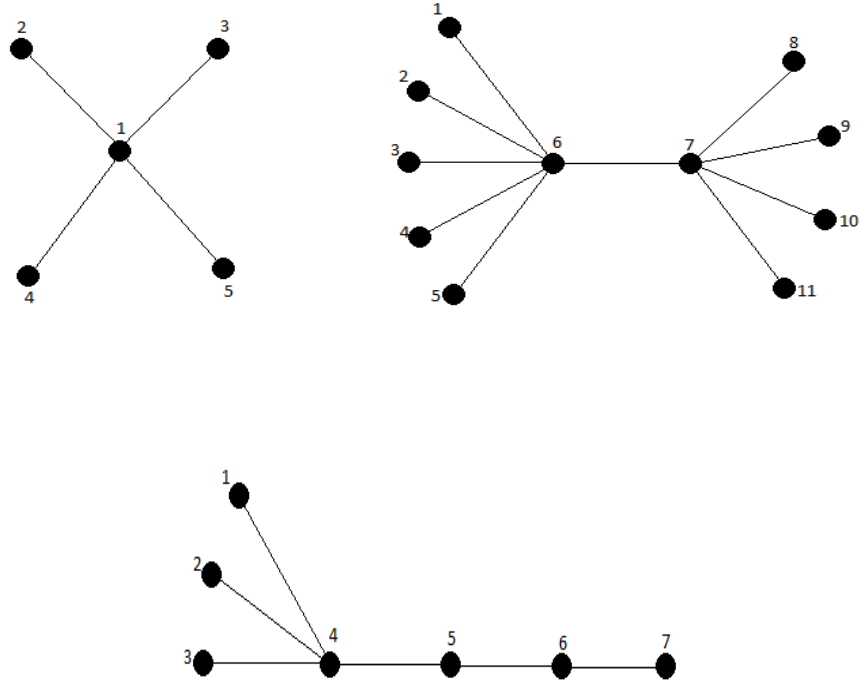
Tanım 2.1.12. Bir G grafinde her noktanın derecesi aynı ise G grafinde *regüler graf* denir. Bir graf iki parçalı ve aynı parçadaki her bir nokta aynı dereceye sahipse *yarı regüler (semi-regular)* iki parçalı graf olarak adlandırılır. Her bir farklı nokta çiftinin sadece bir tek kenar oluşturduğu grafa *tam graf* denir ve nokta sayısı n olmak üzere K_n ile gösterilir.



Şekil 2.5. K_4 ve K_5 tam grafları

Tanım 2.1.13. n noktalı bir grafta, bir noktasının derecesi $n - 1$, diğer noktalarının derecesi 1 olan grafa *yıldız (star) graf* denir. $K_{1,n-1}$ ya da S_n ile gösterilir. S_p ve S_q iki yıldız graf olmak üzere merkez noktalarının bir kenar ile birleştirilmesi ile oluşan $p + q$ noktalı grafa *çift yıldız (double star) grafi* denir ve $S_{p,q}$ ile gösterilir.

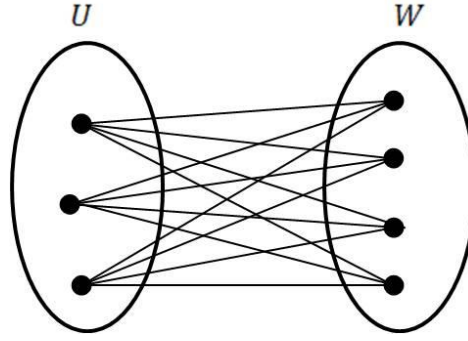
Üstelik bir yıldız grafa yol graf eklenerek elde edilen grafa *kuyruklu yıldız (comet)* denir ve $P_{n,k}$ ile gösterilir.



Şekil 2.6. S_5 , $S_{6,5}$, $P_{7,3}$ grafları.

Tanım 2.1.14. $G = (V, E)$ grafi verilsin. Eğer V noktalar kümesi U ve W ayrık iki kümeye parçalanabiliyorsa, G grafinin *iki parçalı graf (bipartite)* denir. Daha da genellersek, bir grafin V noktalar kümesi r tane kümeye parçalanabiliyorsa, grafa *r -parçalı graf (çok parçalı graf)* denir.

İki parçalı tam graflar, n sayısı bir parçasının noktaları ve m sayısı da diğer parçasının noktalar sayısı olmak üzere $K_{n,m}$ biçiminde gösterilir.



Şekil 2.7. $K_{3,4}$ grafi

Lemma 2.1.15. G , n noktalı ve m kenarlı bağlantılı iki parçalı bir graf ve derece dizisi d_1, d_2, \dots, d_n olmak üzere

$$d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_n^2 \leq mn$$

eşitsizliği sağlanır. Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul G ' nin iki parçalı tam bir graf olmasıdır [7].

İspat. G nin herhangi bir uv kenarı için, $d_u + d_v \leq n$ olacak biçimde

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n d_i^2 &= \sum_{uv} (d_u + d_v) \\ &\leq mn \end{aligned}$$

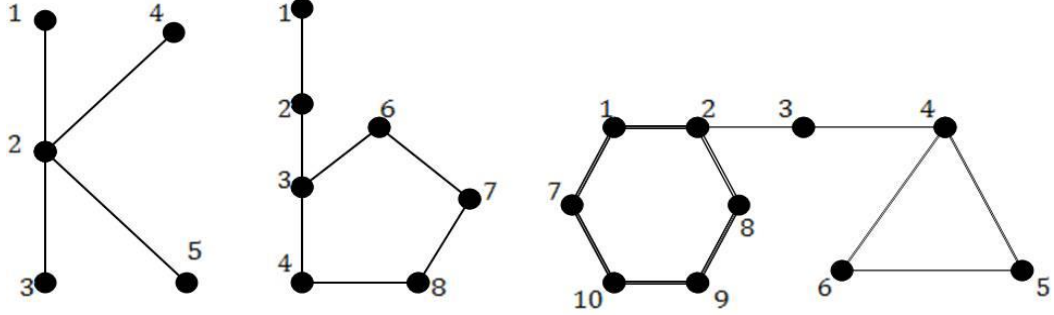
eşitsizliği elde edilir.

Tanım 2.1.16. $V = \{1, 2, 3, \dots, n\}$ ve $E = \{\{1,2\}, \{2,3\}, \dots, \{n-1, n\}, \{n, 1\}\}$ olacak biçimdeki $C_n(V, E)$ grafına *döngü (cycle)* graf denir. Bir döngü grafın kenar sayısı nokta sayısına eşittir.

Tanım 2.1.17. G grafi n noktalı m kenarlı graf olmak üzere

- i. $m = n - 1$ ise G bir ağaç (*tree*)
- ii. $m = n$ ise tek döngülü (*unicyclic*)
- iii. $m = n + 1$ ise çift döngülü (*bicyclic*)

- iv. Bağlantısız olacak biçimde en az iki ağacın oluşturduğu grafa *orman (forest)* denir.



Şekil 2.8. Sırasıyla ağaç; tek döngülü ve çift döngülü graf örnekleri

Tanım 2.1.18. n noktalı k -regüler boş yada tam olmayan bir G grafi (n, k, s, r) parametreleriyle birlikte aşağıdaki koşulları sağlarsa *güçlü regüler (strongly regular)* graf olarak isimlendirilir.

- i) Birbirine komşu olan bütün nokta ikililerini $s \geq 0$ adet aynı sayıda ortak komşuya sahiptir.
- ii) Birbirine komşu olmayan bütün nokta ikilileri de $r > 0$ adet aynı sayıda ortak komşuya sahiptir.
- iii) Eğer $r \geq 0$ ise G tam grafların ayrık birleşimidir. $r \neq 0$ ve G tam olmayan graf ise G nin öz değerleri k ve aşağıdaki kuadratik denklemin kökleri olur.

$$x^2 + (r - s)x + (r - k) = 0 \quad (2.2)$$

Bu köklere u ve v diyelim. k öz değerlerinin katı 1 olur. u ve v öz değerlerinin katları sırasıyla m_u ve m_v ise aşağıdaki denklemlerin çözümüyle elde edilir.

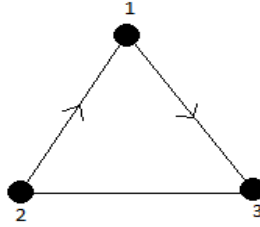
$$m_u + m_v = n - 1 \quad , \quad k + m_u u + m_v v = 0$$

Tanım 2.1.19. $(n, \frac{n-1}{2}, \frac{n-5}{4}, \frac{n-1}{4})$ parametrelili güçlü regüler grafa *konferans (conference)* graf denir. Özel olarak, n asal kuvvetli ise konferans grafa *Paley grafi* denir.

Tanım 2.1.20. Bir grafın tüm kenarları, bu kenarları oluşturan noktalardan biri çıkış noktası diğeri varış noktası olacak biçimde yönlendirilmiş ise bu grafa *yönlü graf* (digraph) denir. Yönlü bir grafın kenarları *yay* (arc) olarak isimlendirilir.

G bir yönlü graf olmak üzere her u, v nokta çifti için u noktasından v noktasına ve v noktasından u noktasına bir yol varsa grafa *güçlü bağlantılı graf* denir.

Tanım 2.1.21. Bir graf hem kenar hem de yay içeriyorsa bu grafa *karışık (mixed) graf* denir.



Şekil 2.9. Karışık (mixed) graf örneği

2.2. Matris Teorisi

Tanım 2.2.1. $A \in M_n$ olmak üzere $AX = \lambda X$ denklemini sağlayan bir λ skaleri varsa sıfır olmayan X vektörüne A kare matrisinin *öz vektörü* denir. λ skalerine de *öz değer* denir. Ayrıca bir A matrisinin karakteristik polinomu

$$K_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

dır. Bu denklemin kökleri matrisin öz değerlerini verir.

Tanım 2.2.2. $A \in M_n$ olmak üzere

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda, A \text{ nin özdeğeri}\}$$

kümesine A matrisinin *spektral yarıçapı* denir.

Tanım 2.2.3. Bir $A = (a_{ij})$ matrisinin eşlenik transpozu

$$A^* = (\bar{a}_{ij})$$

olarak tanımlanır.

Tanım 2.2.4. Bir A matrisinin Hermit transpozu A^H 'nin karmaşık eşlenik transpozudur ve

$$A^H = \overline{A}^T$$

biçiminde gösterilir.

Tanım 2.2.5. $A = (a_{ij})$ matrisi elemanları karmaşık sayılardan oluşan bir kare matris olmak üzere

$$A^H = A$$

koşulu sağlanıyorsa A matrisine *Hermit matris* denir.

Teorem 2.2.6. Hermit bir matrisin bütün öz değerleri reeldir.

İspat. λ bir A matrisinin herhangi bir öz değeri ve x ilgili öz vektörü olsun. O zaman Öklid iç çarpımı altında

$$\begin{aligned}\lambda \langle x, x \rangle &= \langle \lambda x, x \rangle \\ &= \langle Ax, x \rangle \\ &= \langle x, A^* x \rangle \\ &= \langle x, A^H x \rangle \\ &= \langle x, Ax \rangle \\ &= \langle x, \lambda x \rangle \\ &= \overline{\lambda} \langle x, x \rangle\end{aligned}$$

olur. x öz vektör olduğundan sıfırdan değildir ve $\langle x, x \rangle \neq 0$ dir. Böylece $\lambda = \overline{\lambda}$ bulunur ki bu da λ öz değerinin reel olduğunu verir.

Tanım 2.2.7. A ve B matrisleri $n \times n$ kare matrisler olmak üzere

$$B = P^{-1}AP$$

olacak biçimde tekil olmayan bir P matrisi varsa A ve B matrislerine benzerdir denir.

Teorem 2.2.8. Benzer matrisler aynı öz değerlere sahiptir [8].

Teorem 2.2.9. Bir matrisin öz değerleri ile transpozunun öz değerleri aynıdır.

İspat. λ , A 'nın bir öz değeri olsun. Bu takdirde

$$0 = \det(A - \lambda I)$$

yazılabilir. Determinant özelliklerinden

$$0 = \det(A - \lambda I)$$

$$= \det((A^T)^T - \lambda I^T)$$

$$= \det[A^T - \lambda I]^T$$

$$= \det(A^T - \lambda I)$$

elde edilir. Böylece λ , A^T 'nin de bir öz değeri olur.

Teorem 2.2.10. (Schur Birimsel Üçgenselleştirme) A $n \times n$ tipinde bir matris ve $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ öz değerleri olmak üzere $T = U^*AU$ üst üçgensel olacak biçimde bir $U \in M_n$ birimsel matrisi vardır ve T 'nin her bir t_{ii} köşegen elemanı, λ_i 'lere eşittir [9].

Tanım 2.2.11. A keyfi matris olmak üzere $A^*A = AA^*$ ise A 'ya normal matris denir.

Teorem 2.2.12. A ve B normal matrisler alalım. $AB = BA$ ise U birimsel matris olacak şekilde U^*AU ve U^*BU köşegen matrisler vardır [9].

Teorem 2.2.13. $A = (a_{ij}) \in M_n$ matrisinin öz değerleri $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ olsun. Bu durumda aşağıdakiler denktir.

- i. A normal matris
- ii. A birimsel köşegenleştirilebilirdir
- iii. $\sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2$
- iv. A matrisinin n öz vektörlerinin bir ortonormal kümesi vardır [9].

Spektral graf teoride problemlerin çözümünde sıklıkla kullanılan lineer cebir teoremleri aşağıda verilmiştir.

A matrisi $n \times n$ tipinde bir simetrik matris ve öz değerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ biçiminde sıralansın. Bu taktirde

1. (Arada olma) $k = 1, \dots, m$ için A ' nın $B_{m \times m}$ alt matrisinin öz değerleri $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_m$ olmak üzere
 $\lambda_k \geq \mu_k \geq \lambda_{n-m+k}$
eşitsizliği sağlanır [10].

2. (Aritmetik-Geometrik Ortalama Eşitsizliği) Aritmetik ortalama karesel ortalamadan daha az ise

$$\frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n}{n} \leq \sqrt{\frac{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2}{n}} \quad (2.3)$$

eşitsizliği sağlanır [11].

3. (Rayleigh prensibi) Belirli bir x vektörü için Rayleigh oranı bütün $0 \neq x \in R^n$ için

$$R_A(x) = \frac{xAx^t}{xx^t}$$

olmak üzere

$$\lambda_n \leq R_A(x) \leq \lambda_1 \quad (2.4)$$

dir [12].

4. (Ky Fan Eşitsizliği) A, B ve C $n \times n$ kare matrisler ve $A + B = C$ olmak üzere

$$\sum_{i=1}^n |\lambda_i(A)| + \sum_{i=1}^n |\lambda_i(B)| \geq \sum_{i=1}^n |\lambda_i(C)| \quad (2.5)$$

dir. Eşitliğin sağlanması için yeter ve gerek koşul P ortogonal bir matris olmak üzere, PA ve PB her ikisinde pozitif yarı tanımlı (semidefinite) matris olmasıdır [13].

2.3. Graflar ve Matrisler

Tanım 2.3.1. (Komşuluk Matrisi) $G = (V, E)$ bir graf olmak üzere

$$A(G) = (a_{i,j}) = \begin{cases} 1, & i \sim j \\ 0, & d.d. \end{cases}$$

biçiminde tanımlı $A(G)$ matrisine grafın *komşuluk matrisi* denir.

Tanım 2.3.2. $G = (V, E)$ grafının derece matrisi, köşegen elemanları noktaların derecelerinden oluşan köşegen bir matristir ve $D(G)$ biçiminde gösterilir.

Tanım 2.3.3. Bir $G = (V, E)$ grafının komşuluk matrisinin öz değerlerine grafın öz değerleri denir. En büyük öz değeri G ' nin spektral yarıçapı olarak tanımlanır ve $\rho(G)$ veya $\lambda_1(G)$ biçiminde gösterilir.

Tanım 2.3.4. $G = (V, E)$ ve $G' = (V', E')$ grafları verilsin. Eğer $V' \subseteq V$ ve $E' \subseteq E$ ise G' , G grafının bir alt grafıdır.

Lemma 2.3.5. G bağlantılı bir graf ve G' grafı G ' nin bir alt grafı olsun. Bu durumda

$$\lambda_1(G') \leq \lambda_1(G)$$

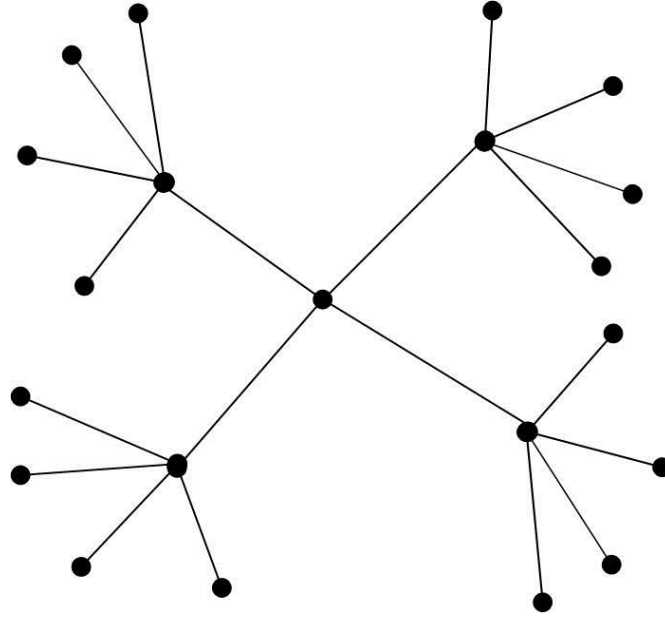
dir [10].

Lemma 2.3.6. T derece dizisi d_1, d_2, \dots, d_n ve ortalama 2 – derece dizisi m_1, m_2, \dots, m_n olan n noktalı bir ağaç olsun. Bu takdirde

$$\lambda_1(T) \geq \max\{\sqrt{d_i + m_i - 1} : 1 \leq i \leq n\} \quad (2.6)$$

eşitsizliği sağlanır. Ayrıca, eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul T ağacının T_{d_i, d_j} grafi olmasıdır [10].

Yukarıdaki teoremden T_{d_i, d_j} grafi, $d_j \geq 2$ olmak üzere K_{1, d_j-1} grafinin d_i -kopyasının merkezine yeni bir v_i noktası eklenerek elde edilen graftır (Şekil 2.9).



Şekil 2.10. $T_{4,5}$ ağacı

Tanım 2.3.7. G ' nin spektrumundaki sıfırın katına G ' nin sıfırlık (nullity) değeri denir ve $n_0(G)$ ile gösterilir.

Bazı özel grafların spektrumları aşağıdaki tabloda verilmiştir.

| Graf | Spektrumu |
|-----------|--|
| K_n | $\left(n-1, \underbrace{-1, \dots, -1}_{n-1}\right)$ |
| $K_{n,m}$ | $\left(\sqrt{mn}, \underbrace{0, \dots, 0}_{m+n-2}, -\sqrt{mn}\right)$ |
| C_n | $2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right) (j = 0, 1, \dots, n-1)$ |
| P_n | $2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) (j = 1, \dots, n)$ |
| S_n | $\left(\sqrt{n-1}, \underbrace{0, \dots, 0}_{n-2}, -\sqrt{n-1}\right)$ |

Önerme 2.3.8. n noktalı m kenarlı bir G grafi ve $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ öz değerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ olarak sıralansın. Bu durumda

- i. $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ reel sayılar ve $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$ dir.
- ii. $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n$ ve $m = 0$ ise böylece $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m$, $\sum_{i < j}^n \lambda_i \lambda_j = -m$ dir.
- iii. Her bir λ öz değeri orijine göre simetriktir ancak ve ancak G iki parçalı bir graftır. Yani λ öz değer ise $-\lambda$ da aynı katlı öz değerdir [10].

Teorem 2.3.9. n noktalı m kenarlı bir G grafi ve $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ öz değerleri verilsin. Bu durumda,

- i. $\lambda_1 \geq 2m/n$ dir. Üstelik eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul G grafi $2m/n$ –regüler olmasıdır.

ii. G bağlantılı bir graf ise $\lambda_1 > \lambda_2$ dir [10].

Teorem 2.3.10. Eğer G ' nin spektrumu tam olarak bir pozitif öz değer içerirse G çok parçalı tam grafa bazı izole noktaların eklenmesiyle oluşan graftır [10].

Tanım 2.3.11. G ve H iki graf olsun. G ve H graflarının noktalar kümesi $V(G), V(H)$ olmak üzere " G ' de keyfi u ve v noktaları için $u \sim v$ olması için gerek ve yeter koşul H grafında $f(u) \sim f(v)$ " olacak biçimde

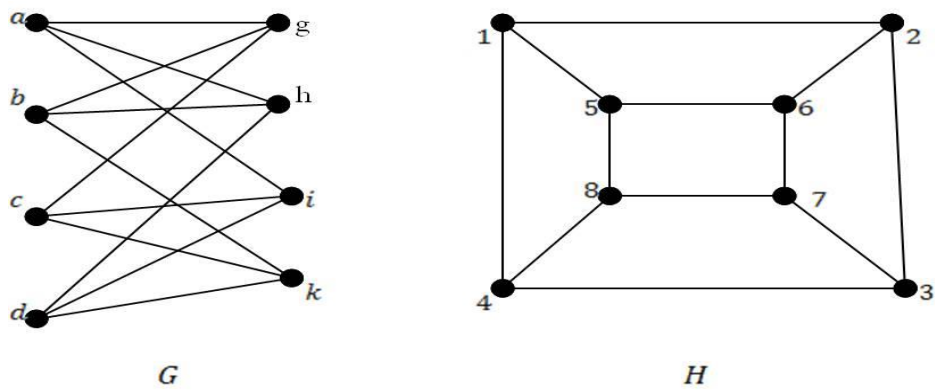
$$f: V(G) \rightarrow V(H)$$

bire bir ve örten f fonksiyonu varsa G ve H grafları izomorfiktir denir ve $G \cong H$ ile gösterilir.

Teorem 2.3.12. Bir G grafının tüm izomorfik değişmezleri aşağıda sıralanmıştır.

- i. Grafın noktalarının sayısı
- ii. Grafın kenarları sayısı
- iii. Derecesi k olan noktaların sayısı
- iv. Derece dizisi
- v. Bağlantılı bileşen sayısı
- vi. Uzunluğu k olan noktaların sayısı
- vii. Uzunluğu k olan basit döngü sayısı [14]

Örnek 2.3.13. Aşağıdaki şekilde verilen G ve H grafları izomorf graflardır.



Şekil 2.11. Bir izomorfik graf örneği

Sonuç 2.3.14. İki grafın izomorfik olması için gerek ve yeter koşul komşuluk matrislerinin izomorfik olmasıdır.

Teorem 2.3.15. $T \in \mathcal{T}_n$ ve spektral yarıçap λ_1 olmak üzere

$$\lambda_1(S_n) \geq \lambda_1(T) \geq \lambda_1(P_n)$$

eşitsizlikleri sağlanır [15].

Tanım 2.3.16. $G = (V, E)$ bir graf olsun. G ' nin enerjisi $\mathcal{E}(G)$ olarak gösterilir ve G ' nin öz değerlerinin mutlak toplamıdır.

Yani; G ' nin öz değerleri $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ olmak üzere enerji

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

olarak hesaplanabilir. Örneğin, bir tam grafın spektrumu $\left(n - 1, \underbrace{-1, \dots, -1}_{n-1 \text{ tane}}\right)$ olmak üzere enerjisi

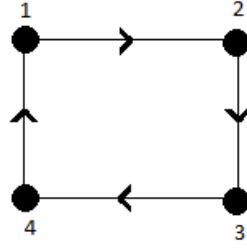
$$\begin{aligned} \mathcal{E}(K_n) &= |n - 1| + |-1|. (n - 1) \\ &= 2n - 2 \end{aligned}$$

olarak hesaplanabilir.

Tanım 2.3.17. \mathcal{D} yönlü bir graf olsun. \mathcal{D} ' nin öz değerleri $\zeta_k = a_k + b_k i$ olmak üzere enerjisi

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) = \sum_{j=1}^n |a_j|$$

olarak tanımlanır. Yani \mathcal{D} ' nin enerjisi öz değerlerinin reel kısımlarının toplamıdır.



Şekil 2.12.

Örnek 2.3.18. Şekil 2.12' deki C_4 yönlü grafi inceleyelim. Bu grafi karakteristik polinomu $x^4 - 1$ ve böylece öz deęerleri $1, -1, i, -i$ karmaşık sayıdır. Bu durumda $\mathcal{E}(C_4) = 2$ olarak hesaplanır.

Tanım 2.3.19. \mathcal{D} yönlü bir graf olsun. Eęer komşuluk matrisi normal matris ise \mathcal{D} grafına normal yönlü graf denir.

Teorem 2.3.20. n kenarlı bütün yönlü graflar ile tek döngüsel C_t arasında $t = 2, 3$ ya da 4 ise minimal enerji ve $t = n$ olduğunda maksimal enerji elde edilir [6].

Teorem 2.3.21. n kenarlı bir \mathcal{D} yönlü grafi verilsin. $A = (a_{ij})$ komşuluk matrisi olmak üzere karakteristik polinomu

$$\Phi_{\mathcal{D}}(x) = \det(xI - A) = x^n + b_{n-1}x^{n-1} + \dots + b_0$$

olsun. Bu durumda

$$b_{n-i} = \sum_{L \in \mathcal{L}_i} (-1)^{c(L)} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (2.7)$$

eşitlięi sağlanır [10].

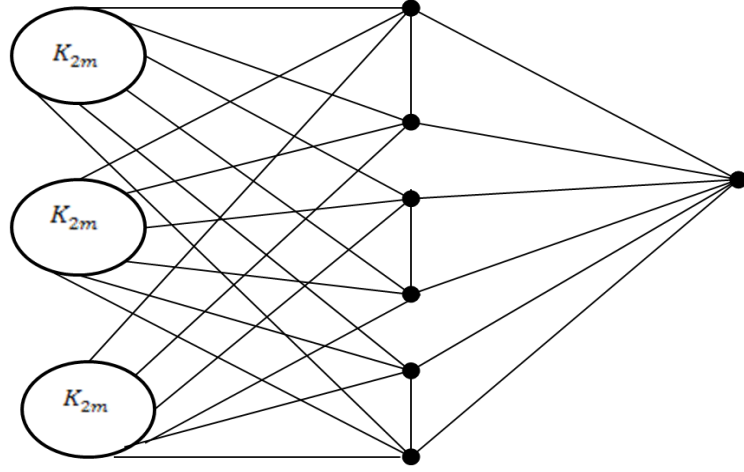
Aşağıdaki teorem enerjinin integral gösterimi olarak bilinir.

Teorem 2.3.22. \mathcal{D} n kenarlı ve ζ_1, \dots, ζ_n öz deęerleri olmak üzere bir yönlü graf olsun. Bu takdirde,

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(n - \frac{ix\Phi'_G(iz)}{\Phi_G(iz)} \right) dz = \sum_{i=1}^n |\operatorname{Re}(\zeta_i)| \quad (2.8)$$

eşitliği sağlanır [6].

Tanım 2.3.23. n noktalı bir G grafi için eğer $\mathcal{E}(G) > 2n - 2$ ise bu grafa *Hiper-Enerjik* graf denir. (Bknz Şekil 2.13).



Şekil 2.13.

Teorem 2.3.24. Konferans graflar hiper-enerjiktir [16].

Teorem 2.3.25. $q \equiv 3(mod 4)$ bir asal kuvvet olsun. q dereceli bir yönlü \mathcal{P}_q Paley grafinin enerjisi yönsüzünün enerjisinin yarısına eşittir [17].

3. BÖLÜM

YÖNLÜ VE YÖNSÜZ GRAF ENERJİSİ İÇİN SINIRLAR

Bu bölüm, yönlü ve yönsüz graflar için sınırlar olarak iki kısımda ele alınacaktır.

3.1. Yönsüz Graflar

m kenar ve n noktalı bir G grafi için, ilk sınır 70' li yılların başında alt ve üst sınır McClelland tarafından verilmiştir [18].

Teorem 3.1.1. (McClelland) G , n noktalı m kenarlı bir graf ve A komşuluk matrisi olsun. Bu durumda

$$\sqrt{2m + n(n-1)|\det(A)|^{\frac{2}{n}}} \leq \mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2mn} \quad (3.1)$$

eşitsizlikleri sağlanır.

İspat. G ' nin özdeğerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ olsun. $i < j$ olacak biçimde $\frac{n(n-1)}{2}$ -tane farklı $|\lambda_i||\lambda_j|$ terimlerinin aritmetik ortalaması μ olsun. Yani,

$$\mu = \frac{2 \sum_{i < j} |\lambda_i||\lambda_j|}{n(n-1)}$$

ve $|\lambda_i||\lambda_j|$ terimlerinin geometrik ortalaması η olmak üzere

$$\begin{aligned} \eta &= \left(\prod_{i < j} |\lambda_i||\lambda_j| \right)^{\frac{2}{n(n-1)}} \\ &= \left(\prod_{i=1}^n |\lambda_i|^{(n-1)} \right)^{\frac{2}{n(n-1)}} \\ &= \left(\prod_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^{\frac{2}{n}} \end{aligned}$$

$$= |\det A|^{\frac{2}{n}}$$

elde edilir. Önerme 2.3.8' den

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^2(G) &= \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + 2 \sum_{i<j} |\lambda_i| |\lambda_j| \\ &= 2m + n(n-1)\mu\end{aligned}$$

eşitlikleri elde edilir. Negatif olmayan sayıların aritmetik ortalaması geometrik ortalamasından daha büyük olduğundan (3.1)' de ki alt sınır kolaylıkla görülür. Diğer taraftan,

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (|\lambda_i| - |\lambda_j|)^2 > 0$$

olduğundan

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (|\lambda_i| - |\lambda_j|)^2 &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n (|\lambda_i|)^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (|\lambda_j|)^2 \\ &\quad - 2 \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right) \left(\sum_{j=1}^n |\lambda_j| \right) \\ &= 2mn + 2mn - 2\mathcal{E}^2(G)\end{aligned}$$

elde edilir. Böylece $4mn - 2\mathcal{E}^2(G) \geq 0$ olur ki bu da (3.1)' deki üst sınırdır.

Teorem 3.1.2. m kenarlı bir G grafi için

$$2\sqrt{m} \leq \mathcal{E}(G) \leq 2m \tag{3.2}$$

dir. Soldaki eşitliğinin sağlanması için gerek ve yeter koşul G ' nin $ab = m$ olacak şekilde bir $K_{a,b}$ keyfi izole noktaları içeren iki parçalı tam graf olmasıdır. Sağdaki

eşitliğinin sağlanması için gerek ve yeter koşul G nin bazı izole noktaları içeren K_2 ' nin m adet kopyası olmasıdır [3].

İspat. Eğer G izole noktalara sahip ise her bir izole nokta bir tane özdeğerin sifıra eşit olmasını sağlayacaktır. Böylece G ' ye izole noktaların eklenmesi m ya da $\mathcal{E}(G)$ ' yi değiştirmeyecektir. G grafının enerji tanımından aşağıdaki eşitlik elde edilir.

$$\mathcal{E}(G)^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + 2 \sum_{i<j} |\lambda_i \lambda_j| \quad (3.3)$$

Diğer taraftan, Önerme 2.3.8' den

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

ve

$$\sum_{i<j} |\lambda_i \lambda_j| = -m$$

eşitlikleri (3.3)' deki eşitlikte yerine koyulursa

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G)^2 &= 2m + 2 \sum_{i<j} |\lambda_i| |\lambda_j| \\ &\geq 2m + 2 \left| \sum_{i<j} \lambda_i \lambda_j \right| \\ &= 4m \end{aligned}$$

elde edilir.

Teorem 3.1.3. Eğer G ' nin sıfırlık (nullity) değeri sıfır ise

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2m(n - n_0)} \quad (3.4)$$

eşitsizliği sağlanır [19].

Teorem 3.1.4. G ' nin öz değerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ olsun. Bu durumda

$$\mathcal{E}(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)} \quad (3.5)$$

eşitsizliği elde edilir [20].

İspat. Enerji tanımını kullanılarak,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \\ &= \lambda_1 + \sum_{i=2}^{n-1} |\lambda_i| \quad (\text{Cauchy - Schwarz}) \\ &\leq \lambda_1 + \sqrt{n-1} \sqrt{\sum_{i=2}^{n-1} |\lambda_i|^2} \quad (\text{Önerme 2.3.8 (ii)}) \\ &= \lambda_1 + \sqrt{n-1} \sqrt{2m - \lambda_1^2} \end{aligned}$$

elde edilir.

Teorem 3.1.5 (Koolen-Moulton) G bir graf olsun. Eğer $2m \geq n$ ise

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left[2m - \left(\frac{2m}{n} \right)^2 \right]} \quad (3.6)$$

Üstelik (3.6)'deki eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul G 'nin K_2 'nin $n/2$ tane kopyasını içermesi ya da $G \cong K_n$ olmasıdır [20].

İspat. G 'nin öz değerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ olsun. Bir

$$F(x) := x + \sqrt{(n-1)(2m - x^2)}$$

fonksiyonu verildiğinde bu fonksiyon $x \in (\sqrt{2m/n}, \sqrt{2m})$ değişkenine bağlı azalan bir fonksiyon olur. (3.5) eşitsizliğinden

$$\mathcal{E}(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)} \quad (3.7)$$

ve Teorem 2.3.9' dan

$$\lambda_1 \geq 2m/n \quad (3.8)$$

olduğundan

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &\leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)} \\ &\leq 2m/n + \sqrt{(n-1) \left(2m - \left(\frac{2m}{n} \right)^2 \right)} \end{aligned}$$

elde edilir.

$(n/2)K_2$ ' nin öz değerleri ± 1 (her ikisinde $n/2$ katlı) ve K_n ' nin öz değerleri $n-1$ (1 katlı) ve -1 ($n-1$ katlı) olduğundan (3.6)' deki eşitliği görmek kolaydır.

Tersine (3.6)' deki eşitlik sağlanıyorsa $\lambda_1 = 2m/n$ olmalıdır. Bu ise G ' nin derecesi $2m/n$ - regüler graf olduğunu gösterir. Şimdi eşitlik aynı zaman da Cauchy-Schwarz eşitsizliğini de sağladığından $2 \leq i \leq n$ için

$$|\lambda_i| = \sqrt{(2m - (2m/n)^2)/(n-1)}$$

elde edilir. $G \cong (n/2)K_n$ durumunda G ' nin mutlak değerleri eşit olan iki öz değeri vardır ya da $G \cong K_n$ durumunda G ' nin mutlak değerleri farklı iki öz değeri vardır.

Lemma 3.1.6. G bir graf ve derece dizisi d_1, d_2, \dots, d_n olsun. Bu durumda

$$\lambda_1 \geq \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2} \quad (3.9)$$

sağlanır. Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul G ' nin regüler veya semi regüler graf olmasıdır [21].

Teorem 3.1.7. G , n noktalı ve m kenarlı ve derece dizisi (d_1, d_2, \dots, d_n) olan bir graf olmak üzere

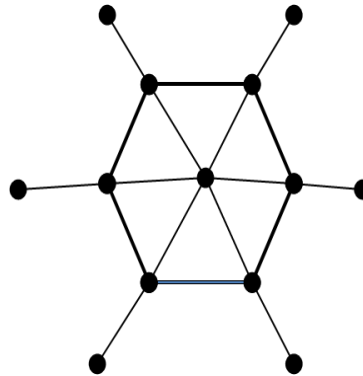
$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2} + \sqrt{(n-1) \left[2m - \left(\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2} \right)^2 \right]} \quad (3.10)$$

eşitsizliği sağlanır. Bunun yanı sıra (3.10)' deki eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul aşağıdakilerden birinin sağlanmasıdır.

- (i) $G \cong (n/2)K_2$ $(n = 2m)$;
- (ii) $G \cong K_n$ $(m = n(n-1)/2)$;
- (iii) G , aşıkâr olmayan iki öz değerin mutlak değeri $\sqrt{(2m - (2m/n)^2)/(n-1)}$ olan tam olmayan bağlantılı güçlü regüler graftır;
- (iv) $G \cong nK_1$ $(m = 0)$ [22].

Tanım 3.1.8. Bir p sabiti için G grafında her bir noktanın ortalama 2 –derecesi p ' ye eşit (yani, $m_i = p$) ise G grafına *regülerimsi* (*pseudoregular*) ya da p – *regülerimsi* graf denir. İki parçalı bir $G(X, Y)$ grafı, X ' deki her bir nokta için $m_i = p_x$ ve Y ' deki her bir nokta için $m_i = p_y$ ise grafa (p_x, p_y) –*yarı regülerimsi* (*pseudosemiregular*) graf denir.

Açık olarak herhangi bir r –regüler graf aynı zamanda bir r – regülerimsi graftır. Herhangi bir (a, b) –yarı regüler iki parçalı grafı bir (b, a) –yarı regülerimsi iki parçalı graftır. Tersine bir regülerimsi graf, regüler graf olmayabilir, Gerçekten Şekil 3.1' de görüldüğü gibi graf regülerimsi olup regüler değildir.



Şekil 3.1.

Teorem 3.1.9. G boş olmayan n noktalı m kenarlı bir graf, derece dizisi d_1, d_2, \dots, d_n ve her $1 \leq i \leq n$ için $t_i = d_i m_i$ olsun. Bu durumda

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{\sum_{i=1}^n t_i^2 / \sum_{i=1}^n d_i^2} + \sqrt{(n-1) \left(2m - \sum_{i=1}^n t_i^2 / \sum_{i=1}^n d_i^2 \right)} \quad (3.11)$$

Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul aşağıdaki durumlardan birinin sağlanmasıdır.

- i. $G \cong (n/2)K_2$
- ii. $G \cong K_n$
- iii. $p > \sqrt{2m/n}$ olmak üzere G iki parçalı olmayan bağlantılı p –regülerimsi graftır ve üç farklı öz değeri $\left(p, \sqrt{\frac{2m-p^2}{n-1}}, -\sqrt{\frac{2m-p^2}{n-1}} \right)$ dir [23].

Teorem 3.1.10. G , n noktalı bir graf olsun. Bu durumda

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{n}{2} (\sqrt{n} + 1) \quad (3.12)$$

Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul G ' nin $\left(n, \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4} \right)$ parametrelere sahip güçlü regüler bir graf olmasıdır [20].

İspat. G , n noktalı ve m kenarlı bir graf olsun. Kabul edelim ki $2m \geq n$ olsun. Teorem 3.1.4' in ispatında verilen

$$F(x) := x + \sqrt{(n-1)(2m-x^2)}$$

fonksiyonu dikkate alınırsa (3.6) eşitsizliğinin sağ tarafındaki ifade $m = (n^2 + n\sqrt{n})/4$ için maksimum olur. Böylece (3.6)' de m yerine bu değer yazılmasıyla (3.12) eşitsizliği elde edilir. Yani,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &\leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left[2m - \left(\frac{2m}{n} \right)^2 \right]} \\ &= \frac{n}{2} (\sqrt{n} + 1) \end{aligned} \quad (3.13)$$

bulunur. Diğer taraftan Teorem 3.1.4 ve (2.3) eşitliğinden (3.12)' deki eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşulun G ' nin $\left(n, \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}\right)$ parametrelerine sahip güçlü regüler bir graf olması gerektiği görülür.

Kabul edelim ki $2m \leq n$ olsun. Bu durumda ise (3.13) eşitsizliğinden

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(G) &\leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left[2m - \left(\frac{2m}{n}\right)^2 \right]} \\ &\leq 2m \\ &\leq n\end{aligned}$$

elde edilir.

Teorem 3.1.11. G iki parçalı $n > 2$ noktalı bir graf olsun. Bu durumda

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{n}{\sqrt{8}} (\sqrt{n} + \sqrt{2}) \quad (3.14)$$

eşitsizliği sağlanır [24].

Teorem 3.1.12. G iki parçalı $n > 2$ noktalı ; m kenarlı ve derece dizisi d_1, d_2, \dots, d_n olan bir graf olmak üzere

$$\mathcal{E}(G) \leq 2 \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2} + \sqrt{(n-2) \left(2m - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2 \right)} \quad (3.15)$$

eşitsizliği sağlanır [22].

Teorem 3.1.13. G izole noktası olmayan n noktalı bir graf olsun. Bu durumda

$$\mathcal{E}(G) \geq 2\sqrt{n-1} \quad (3.16)$$

dir. Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul $G \cong S_n$ [3].

İspat.

G bağlantılı bir graf olduğundan en az $n - 1$ kenara sahiptir. G , ℓ –bileşenli bağlantılı olmayan graf ve G_1, G_2, \dots, G_ℓ alt grafları sırasıyla n_1, \dots, n_ℓ noktalı alınsın. Teorem 3.1.12’ den her bir bağlantılı bileşen için

$$\mathcal{E}(G_i) \geq 2\sqrt{n_i - 1} \quad (i = 1, \dots, \ell)$$

dir.. Böylece

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) &= \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{E}(G_i) \\ &\geq 2 \sum_{i=1}^{\ell} \sqrt{n_i - 1} \\ &= 2 \sqrt{\left(\sum_{i=1}^{\ell} \sqrt{n_i - 1} \right)^2} \\ &= 2 \sqrt{\sum_{i=1}^{\ell} (n_i - 1) + 2 \sum_{i < k} \sqrt{n_i - 1} \sqrt{n_k - 1}} \\ &\geq 2\sqrt{n - 1 + \ell(\ell - 1)} \quad (n_i \geq 2) \\ &= 2\sqrt{n - 1 + (\ell - 1)^2} \\ &\geq 2\sqrt{n - 1} \end{aligned}$$

elde edilir.

Teorem 3.1.14. T n noktalı m kenarlı bir graf, derece dizisi d_1, d_2, \dots, d_n ve ortalama 2-derece dizisi m_1, m_2, \dots, m_n olan bir orman olsun. Bu durumda

$$s = \max\{d_i + m_i - 1 : 1 \leq i \leq n\}$$

olmak üzere

$$\mathcal{E}(T) \leq 2\sqrt{s} + \sqrt{(n-2)(2m-2s)} \quad (3.17)$$

dir. Üstelik eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul aşağıdakilerden en az birisinin sağlanmasıdır.

- i) $T \cong (n/2)K_2$
- ii) $T \cong K_{1,m} \cup (n-1-m)K_1$ [25].

Teorem 3.1.15. Yeterince büyük n sayısı için

$$\mathcal{E}(G) \geq \frac{1}{2}n^{3/2} - n^{11/10} \quad (3.18)$$

olacak biçimde n noktalı bir G grafi vardır [25].

Sonuç 3.1.16. En az bir kenarlı keyfi basit graflar için

$$\mathcal{E}(G) \geq 2 \quad (3.19)$$

dir [25].

Sonuç 3.1.17. $\{e\}$ basit bir G grafinin kesme kenarı (cut edge) olmak üzere

$$\mathcal{E}(G - e) < \mathcal{E}(G) \quad (3.20)$$

eşitsizliği sağlanır. Üstelik bir T ağacının keyfi kenarı için

$$\mathcal{E}(T - e) < \mathcal{E}(T) \quad (3.21)$$

dir [25].

Sonuç 3.1.18. G n noktalı m kenarlı bir graf ve maksimum derecesi Δ olsun. Bu durumda

$$\mathcal{E}(G) \leq 2m - 2(\Delta - \sqrt{\Delta}) \quad (3.22)$$

elde edilir. Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter şart G' nin $S_{\Delta+1}$ yıldız grafi ile $m - \Delta$ ve $n - 2m + \Delta - 1$ tane izole noktaların birleşimi olmasıdır [13].

Sonuç 3.1.19. Bağlantılı bir G grafinin çapı d ile gösterilmek üzere

$$\mathcal{E}(G) \leq 2(m - d) + \mathcal{E}(P_{d+1}) \quad (3.23)$$

eşitsizliği sağlanır. $G \cong P_{d+1}$ ise

$$\mathcal{E}(G) < 2(m - d) + \mathcal{E}(P_{d+1}) \quad (3.24)$$

dir [25].

3.2. Yönlü Graflar

Lemma 3.2.1. \mathcal{D} , a yaylı n dereceli bir yönlü graf ve c_2 , \mathcal{D} ' nin 2 –uzunluklu kapalı yürüyüşlerinin sayısı olsun. ζ_1, \dots, ζ_n öz değerleri olmak üzere

$$\sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 + \sum_{k=1}^n [Im(\zeta_k)]^2 \leq a \quad (3.25)$$

ve

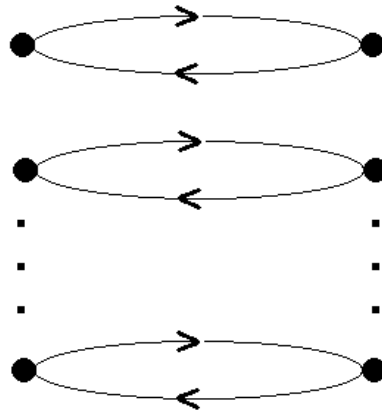
$$\sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 - \sum_{k=1}^n [Im(\zeta_k)]^2 = c_2 \quad (3.26)$$

dir [26].

Teorem 3.2.2. a yaylı n dereceli bir \mathcal{D} yönlü grafi tanımlansın. Bu durumda

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \leq \sqrt{\frac{1}{2}n(a + c_2)} \quad (3.27)$$

dir. Üstelik eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul \mathcal{D} ' nin 2 –uzunluklu $\frac{n}{2}$ adet yönlü döngü kopyasına sahip bir yönlü graf olmasıdır.(Şekil 3.2) [27].



Şekil 3.2.

Teorem 3.2.3. a yaylı bir \mathcal{D} yönlü grafi tanımlansın. Bu durumda

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \leq a \quad (3.28)$$

eşitsizliği elde edilir. Eşitlik için gerek ve yeter koşul \mathcal{D}' nin 2 – uzunluklu yönlü döngülerin $a/2$ adet kopyasını içermesi ve bazı izole noktalara sahip olmasıdır [28].

Teorem 3.2.4. \mathcal{D} , n noktalı ve ζ_1, \dots, ζ_n özdeğerleriyle bir yönlü graf olsun. Eğer A , \mathcal{D} nin komşuluk matrisi ve c_2 , \mathcal{D}' nin 2 – uzunluklu kapalı yürüyüşlerinin sayısı ise

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \geq \sqrt{2c_2} \quad (3.29)$$

dir. Bu sınır için eşitliğin sağlandığı durum döngüsüz yönlü veya yönlü graflar için $0, -\sqrt{\frac{c_2}{2}}, \sqrt{\frac{c_2}{2}}$ değerlerinin sırasıyla $n - 2, 1, 1$ katlı birer öz değer olmasıdır [28].

Teorem 3.2.5. a yaylı n noktalı bir \mathcal{D} yönlü grafi tanımlansın. Bu durumda c_2 , \mathcal{D}' nin 2 – uzunluklu kapalı yürüyüşlerinin sayısı olmak üzere

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \leq \frac{c_2}{n} + \sqrt{(n-1)\left[a - \left(\frac{c_2}{n}\right)^2\right]} \quad (3.30)$$

eşitsizliği sağlanır [28].

Teorem 3.2.6. \mathcal{D} yönlü grafi a yaylı n noktalı güçlü bağlantılı bir yönlü graf ve c_2 , \mathcal{D}' nin 2 – uzunluklu kapalı yürüyüşlerinin sayısı olsun. ζ , \mathcal{D}' nin spektral yarıçapı olmak üzere $\zeta \geq \frac{a+c_2}{2n} \geq 1$ ise

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \leq \frac{a+c_2}{2n} + \sqrt{(n-1)\left[\frac{a+c_2}{2} - \left(\frac{a+c_2}{2n}\right)^2\right]} \quad (3.31)$$

dir [29].

Teorem 3.2.7. \mathcal{D} grafi güçlü bağlantılı yönlü graf olmak üzere

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \geq 2 \quad (3.32)$$

dir. Üstelik eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul $r = 2, 3, 4$ için $\mathcal{D} = C_r$ [29].

Lemma 3.2.8. \mathcal{D} , n noktalı a yaylı bir yönlü graf olsun. $2 -$ uzunluklu kapalı yürüyüşlerin sayısı c_2 ve öz değerleri ζ_1, \dots, ζ_n olmak üzere aşağıdaki koşullar eşdeğerdir [29].

- i. \mathcal{D} normal bir yönlü graftır;
- ii. $\sum_{k=1}^n |\zeta_k|^2 = a$
- iii. $\sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 = \frac{a+c_2}{2}$
- iv. $\sum_{k=1}^n [Im(\zeta_k)]^2 = \frac{a-c_2}{2}$

İspat.

(i \Leftrightarrow ii) $a = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} = \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2$ olduğundan Teorem 2.2.13' den sonuç görülür.

(iii \Leftrightarrow iv) (3.26)' den kolayca elde edilir.

(iii \Rightarrow ii) $\sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 = \frac{a+c_2}{2}$ olsun. Bu durumda Lemma 3.2.1' den

$$\sum_{k=1}^n [Im(\zeta_k)]^2 = \frac{a - c_2}{2}$$

elde edilir. Böylece

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n |\zeta_k|^2 &= \sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 + \sum_{k=1}^n [Im(\zeta_k)]^2 \\ &= a \end{aligned}$$

olduğu görülür.

(ii \Rightarrow iii) Kabul edelim ki $\sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 \neq \frac{a+c_2}{2}$ olsun. Bu durumda

$$\sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 < \frac{a + c_2}{2}$$

elde edilir. Diğer taraftan (3.25) ve (3.26)' den

$$\sum_{k=1}^n [Im(\zeta_k)]^2 \leq \frac{a - c_2}{2}$$

ve

$$\sum_{k=1}^n |\zeta_k|^2 = \sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 + \sum_{k=1}^n [Im(\zeta_k)]^2$$

$$< a$$

eşitsizlikleri elde edilir. Bu ise bir (ii)' nin sağlanmasına bir çelişki oluşturur. Böylece $\sum_{k=1}^n [Re(\zeta_k)]^2 = \frac{a+c_2}{2}$ dir.

Lemma 3.2.9. \mathcal{D} , n noktalı a yaylı bir normal yönlü graf olsun. ρ \mathcal{D} ' nin spektral yarıçapı ise $\rho \geq \frac{a}{n}$ dir. Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul \mathcal{D} ' nin $\frac{a}{n}$ –regüler graf olmasıdır [30].

Teorem 3.2.10. \mathcal{D} , n noktalı a yaylı bir güçlü bağlantılı normal yönlü graf olsun. 2 –uzunluklu kapalı yürüyüşlerinin sayısı c_2 olmak üzere

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \leq \frac{a}{n} + \sqrt{(n-1) \left[\frac{a+c_2}{2} - \left(\frac{a}{n}\right)^2 \right]} \quad (3.33)$$

Üstelik, eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul spektral yarıçapından farklı bütün

öz değerlerin reel kısımlarının mutlak değerleri $\sqrt{\frac{\frac{a+c_2}{2} - \left(\frac{a}{n}\right)^2}{n-1}}$ olacak biçimde $\frac{a}{n}$ –regüler

yönlü graf olmasıdır [30].

İspat. \mathcal{D} ' nin öz değerleri $\rho = \zeta_1, \dots, \zeta_n$ olsun. $(|Re(\zeta_2)|, \dots, |Re(\zeta_n)|)$ ve $(1, \dots, 1)$ vektörleri verilsin. Diğer taraftan

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathcal{D}) &= \sum_{i=1}^n |Re(\zeta_i)| \\ &= \rho + \sum_{i=2}^n |Re(\zeta_i)| \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\leq \rho + \sqrt{(n-1) \sum_{i=2}^n [Re(\zeta_i)]^2} \quad (3.35)$$

$$= \rho + \sqrt{(n-1) \left(\frac{a+c_2}{2} - \rho^2 \right)} \quad (3.36)$$

elde edilir.

$\left[0, \sqrt{\frac{a+c_2}{2}}\right]$ aralığında iyi tanımlı bir $g(x) = x + \sqrt{(n-1) \left(\frac{a+c_2}{2} - x^2 \right)}$ fonksiyonu alındığında bu fonksiyon $\left[0, \sqrt{\frac{a+c_2}{2n}}\right]$ aralığında kesin artan ve $\left[\sqrt{\frac{a+c_2}{2n}}, \sqrt{\frac{a+c_2}{2}}\right]$ aralığında kesin azalan bir fonksiyondur. Diğer taraftan

$$\begin{aligned} \rho^2 &\leq \sum_{i=1}^n [Re(z_i)]^2 \\ &= \frac{a+c_2}{2} \end{aligned}$$

olduğundan $\rho \in \left[0, \sqrt{\frac{a+c_2}{2}}\right]$ elde edilir. $c_2 \leq a$ ve \mathcal{D} güçlü bağlantılı yönlü graf olduğundan

$$\sqrt{\frac{a+c_2}{2n}} \leq \sqrt{\frac{a}{n}} \text{ ve } a \geq n \text{ elde edilir. Böylece Lemma 3.2.9' den}$$

$$\sqrt{\frac{a+c_2}{2n}} \leq \sqrt{\frac{a}{n}} \leq \frac{a}{n} \leq \rho \leq \sqrt{\frac{a+c_2}{2}}$$

bulunur. $g(x)$ fonksiyonunun azalan özelliği kullanılarak, (3.36)' den

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathcal{D}) &\leq g(\rho) \\ &\leq g\left(\frac{a}{n}\right) \\ &= \frac{a}{n} + \sqrt{(n-1) \left[\frac{a+c_2}{2} - \left(\frac{a}{n}\right)^2 \right]} \end{aligned}$$

elde edilir.

(3.33)' deki eşitlik sağlansın. Bu durumda $g(\rho) = g\left(\frac{a}{n}\right)$ ve $\rho = \frac{a}{n}$ için g fonksiyonu kesin artan olduğundan Lemma 3.2.8' den \mathcal{D} , $\frac{a}{n}$ -regüler yönlü bir graftır. Diğer taraftan (3.35)' deki eşitlikten her bir $i \geq 2$ için

$$|Re(\zeta_i)| = \sqrt{\frac{\frac{a+c_2}{2} - \left(\frac{a}{n}\right)^2}{n-1}}$$

yazılır.

Tersine, \mathcal{D} grafi $\frac{a}{n}$ -regüler yönlü graf ise spektral yarıçapı $\frac{a}{n}$ dir. Böylece

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) = g\left(\frac{a}{n}\right)$$

olduğu açıkça görülür.

Teorem 3.2.11. \mathcal{D} , n noktalı a yaylı bir güçlü bağlantılı normal yönlü graf olsun. 2 -uzunluklu kapalı yürüyüşlerinin sayısı c_2 olmak üzere

$$\mathcal{E}(\mathcal{D}) \geq \sqrt{a+c_2}$$

dir. $\mathcal{E}(\mathcal{D}) = \sqrt{a+c_2}$ olması için gerek ve yeter koşul \mathcal{D} ' nin öz değerlerinin $\mp \sqrt{\frac{a+c_2}{4}}$ olmasıdır ve burada öz değerler sadece sıfırdan farklı reel kısımlı öz değerlerdir [30].

4. BÖLÜM

MİNİMAL VE MAKSİMAL ENERJİLİ GRAFLAR VE BAZI AÇIK PROBLEMLER

Bu bölümde minimal veya maksimal enerjili grafların karakterizasyonları yapılacaktır. Ayrıca extremal grafların tanımları sonuçlardan önce ifade edilecektir.

Lemma 4.1. T , n noktalı bir ağaç ve $e = uv$ bir kenar olsun. T' nin k -eşleme sayısı $m(T, k)$ olmak üzere $k = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ için

$$m(T, k) = m(T - uv, k) + m(T - u - v, k - 1) \quad (4.1)$$

dir [29].

Lemma 4.2. T , n noktalı bir asiklik (acyclic) graph ve T' , T ' nin üretilen bir alt grafi olmak üzere

$$\mathcal{E}(T) \geq \mathcal{E}(T') \quad (4.2)$$

dir [29].

Teorem 4.3. \mathcal{T}_n , n noktalı bütün ağaçların kümesi olmak üzere keyfi $T \in \mathcal{T}_n$ için

$$\mathcal{E}(S_n) \leq \mathcal{E}(T) \leq \mathcal{E}(P_n) \quad (4.3)$$

eşitsizliği sağlanır [31].

İspat. S_n yıldız grafının karakteristik polinomu

$$\begin{aligned} \phi(S_n, x) &= \sum_{i=0}^n b_i x^i \\ &= x^n - (n-1)x^{n-2} \end{aligned}$$

biçimindedir. Bütün $T \in \mathcal{T}_n$ ağaçları için ($T \neq S_n$) $b_2 = n - 1$ olup $b_4 > 0$. Böylece

$$\mathcal{E}(S_n) \leq \mathcal{E}(T)$$

eşitsizliği elde edilir.

n ' nin küçük değerleri için $\mathcal{E}(T) \leq \mathcal{E}(P_n)$ olduğunu görmek kolaydır. Yani; $n = 2, 3, 4$ için eşitsizlik görülebilir. Kabul edelim ki $T \in \mathcal{T}_n$ olmak üzere $n = 2, 3, \dots, m - 1$ için $\mathcal{E}(T) < \mathcal{E}(P_n)$ olsun. Bütün $T \in \mathcal{T}_n$ için $\mathcal{E}(T_0) > \mathcal{E}(T)$ olacak biçimde T_0 ağacı olsun. Böylece $T_0 \cong P_m$ olduğunu göstermek yeterlidir. v noktası w noktasına komşu olacak biçimde T_0 ' ın bir pendant noktası olsun. Diğer taraftan $T \in \mathcal{T}_n$ olmak üzere

$$\phi(T, x) = x^n - b_2x^{n-2} + b_4x^{n-4} - \dots + (-1)^k b_{2k}x^{n-2k} \quad (4.4)$$

karakteristik polinomu göz önüne alındığında Lemma 4.1 ve $e = uv$ için

$$b_{2j}(T) = b_{2j}(T - v) + b_{2j-2}(T - v - w) \quad (4.5)$$

elde edilir. v bir pendant nokta olduğundan, (4.5)' den

$$b_{2j}(T_0) = b_{2j}(T_0 - v) + b_{2j-2}(T_0 - v - w)$$

elde edilir. $b_{2j}(T_0 - v)$ ve $b_{2j-2}(T_0 - v - w)$ maksimal ise $b_{2j}(T_0)$ maksimaldir. Böylece Lemma 4.2' den $T_0 - v \cong P_{m-2}$ olduğu görülür. Bu ise $T_0 \cong P_m$ olması ile mümkündür.

Sonuç 4.4. Yukarıdaki teoremden de bütün ağaçlar içerisinde S_n yıldız grafi minimum enerjili ve P_n yol grafi maksimum enerjiye sahiptir.

Teorem 4.5. $T \in \mathcal{T}_n$ ($T \not\cong S_n, S_{n-2,2}, S_{n-3,3}, S_{n,n-3}$) olmak üzere

$$\mathcal{E}(S_n) < \mathcal{E}(S_{n-2,2}) < \mathcal{E}(S_{n-3,3}) < \mathcal{E}(P_{n,n-3}) < \mathcal{E}(T)$$

eşitsizlikleri sağlanır [29].

İspat: $S_{n-2,2}, S_{n-3,3}$ ve $P_{n,n-3}$ graflarının karakteristik polinomları sırasıyla

$$\phi(S_{n-2,2}, x) = x^n - (n-1)x^{n-2} + (n-3)x^{n-4}$$

$$\phi(S_{n-3,3}, x) = x^n - (n-1)x^{n-2} + (2n-8)x^{n-4}$$

$$\phi(P_{n-3,3}, x) = x^n - (n-1)x^{n-2} + (2n-7)x^{n-4}$$

dir. Bu karakteristik polinomun köklerinden ve Teorem 4.3' den istenilen elde edilir.

Sonuç 4.6. Yukarıdaki teoremden görüldüğü gibi S_n yıldız graf dışında 2. minimal enerjili graf $S_{n-2,2}$ çift star graf olup 3. ve 4. minimal enerjili graflar sırasıyla $S_{n-3,3}$ ve $P_{n,n-3}$ graflarıdır.

Teorem 4.7. $i = 1, 2, \dots, n$ için

$$\mathcal{E}(P_1 \cup P_{n-1}) < \mathcal{E}(P_i \cup P_{n-i}) < \mathcal{E}(P_2 \cup P_{n-2}) < \mathcal{E}(P_n)$$

eşitsizlikleri sağlanır. [29]

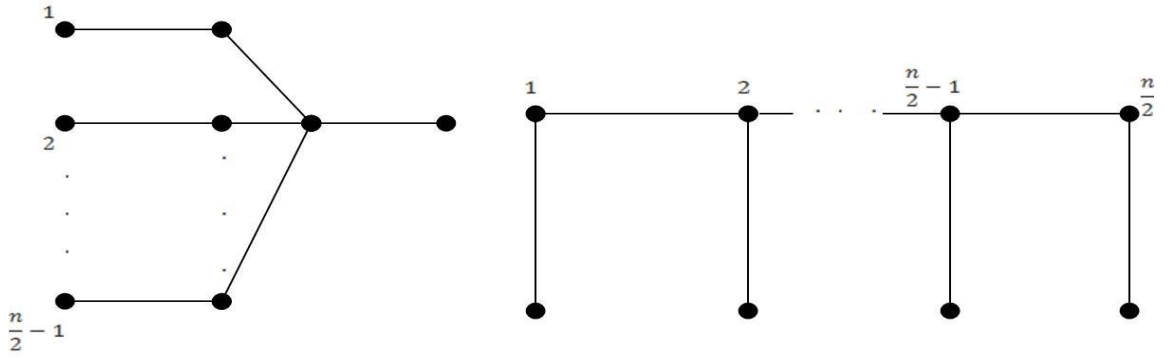
Teorem 4.8. Aşağıdaki parametrelere sahip $\left(n, \frac{n+\sqrt{n}}{2}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}, \frac{n+2\sqrt{n}}{4}\right)$ -güçlü regüler graflar vardır.

- (i) $p \geq 1$ için $n = 4^p$
- (ii) $p, q \geq 1$ için $n = 4^p \cdot q^4$
- (iii) $p \geq 1$ ve $4q - 1$ asal kuvveti ya da $2q - 1$ asalın kuvveti ya da q bir tam kare ya da $q < 167$ olacak biçimde $n = 4^{p+1}q^2$ sayısı vardır [32].

Sonuç 4.9. Teorem 4.8’de belirtilen graflar maksimal enerjiye sahip graflardır. Ayrıca Haemers [33] $n = 4, 16, 36$ için yukarıda belirtilen ekstremal grafların tek olduğunu fakat $n = 64, 100, 144$ için tek olmadığını bulmuştur.

Kimyasal olarak daha ilginç problemlerden biri maksimal veya minimal enerjili döngüsüz konjuge edilmiş hidrokarbonların (hydrocarbons) belirlenmesi problemidir. Graf teoride bu tür graflar mükemmel eşlemeli ağaçlar olarak bilinir.

\mathcal{F}_n , $K_{1, \frac{n}{2}-1}$ yıldız grafının her bir noktasına bir kenar eklenerek elde edilen graftır. Ayrıca \mathcal{M}_n grafi (tarak) $P_{n/2}$ yol grafının her bir noktasına bir kenar eklenerek elde edilir. Üstelik bu graflar mükemmel eşlemeli kimyasal graflardır. (Şekil 4.1)



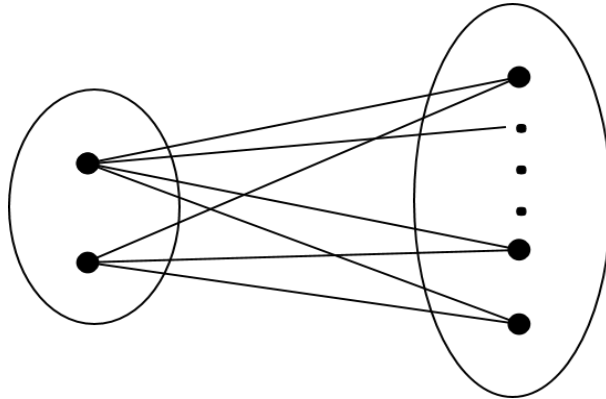
Şekil 4.1. \mathcal{F}_n ve \mathcal{M}_n grafları

Teorem 4.10. Herhangi bir $T \in \Phi_n$ ağacı için $\mathcal{E}(T) \geq \mathcal{E}(\mathcal{F}_n)$ dir. Eşitliğin sağlanması için ancak ve ancak $T \cong \mathcal{F}_n$ olmalıdır. Yani, mükemmel eşlemeli n noktalı ağaçlar arasında \mathcal{F}_n ağacı minimal enerjiye sahiptir [33].

Teorem 4.11. Herhangi bir $T \in \Omega_{n,2}$ ağacı için, $\mathcal{E}(T) \geq \mathcal{E}(\mathcal{M}_n)$ dir. Eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter şart $T \cong \mathcal{M}_n$ dir. Diğer bir deyişle; mükemmel eşlemeli ve her $i \in V$ için $d_i \leq 3$ olacak biçimde bütün ağaçlar arasında \mathcal{M}_n tarak (comb) grafi minimal enerjiye sahiptir [33].

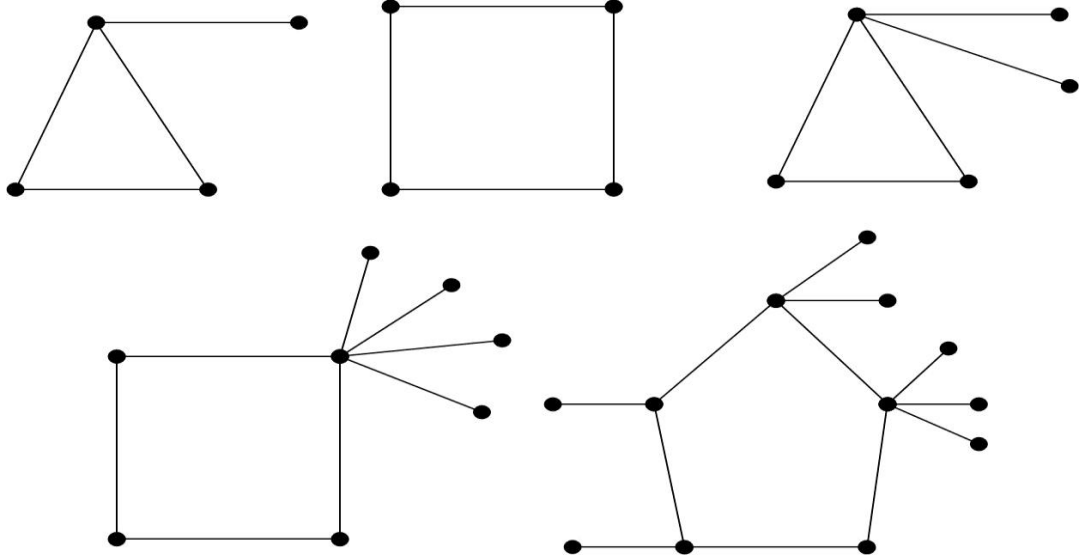
Konjektür 4.12 $n \geq 6$ noktalı ve $n - 1 \leq m \leq 2(n - 2)$ kenarlı bütün bağlantılı graflar arasında minimal enerjili graflar;

- i) $m \leq n + [(n - 7)/2]$ ise S_n yıldız graf,
- ii) Diğer durumda, bir tarafı iki noktalı ve bu iki nokta diğer tarafındaki bütün noktalara bağlı olacak biçimde iki parçalı graftır (Bknz Şekil 4.2) [34].



Şekil 4.2.

n noktalı ve C_ℓ döngü içeren bütün tek döngülü grafların ailesi $\mathcal{G}(n, \ell)$ ile gösterilsin. $\mathcal{A}_n^\ell \in \mathcal{G}(n, \ell)$ olmak üzere \mathcal{A}_n^ℓ grafi da C_ℓ döngüsünün bir noktasına $n - \ell$ kenar eklenerek elde edilsin.



Şekil 4.3. Tek döngülü graf örnekleri

Lemma 4.13. $G \in \mathcal{G}(n, \ell)$ ve $G \neq \mathcal{A}_n^\ell$ olmak üzere

$$\mathcal{E}(G) > \mathcal{E}(\mathcal{A}_n^\ell)$$

eşitsizliği sağlanır [35].

Teorem 4.14. $n \geq l \geq 5$ olmak üzere

$$\mathcal{E}(\mathcal{A}_n^\ell) > \mathcal{E}(\mathcal{A}_n^4)$$

dir [26].

Teorem 4.15. $n \geq 6$ noktalı bütün tek döngülü (unicyclic) graflar içinde minimal enerjili graf \mathcal{A}_n^3 grafidir [35].

İspat. Lemma 4.13 ve Teorem 4.14' den $n \geq 6$ için $\mathcal{E}(\mathcal{A}_n^4) > \mathcal{E}(\mathcal{A}_n^3)$ olduğunu göstermek yeterlidir. \mathcal{A}_n^3 grafının karakteristik polinomu

$$\varphi(\mathcal{A}_n^3) = x^{n-4}(x^4 - nx^2 - 2x + (n - 3)) \quad (4.6)$$

olarak hesaplanır. Diğer taraftan G_1, G_2 iki graf olmak üzere

$$\mathcal{E}(G_1) - \mathcal{E}(G_2) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \ln \frac{\varphi(G_1, ix)}{\varphi(G_2, ix)} dx$$

formülünde (Coulson–Jacobs formülü) \mathcal{A}_n^3 ve \mathcal{A}_n^4 graflarının karakteristik polinomları yerine yazılarak

$$\mathcal{E}(\mathcal{A}_n^4) - \mathcal{E}(\mathcal{A}_n^3) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2} \ln \frac{[1 + nx^2 + 2(n-4)x^4]^2}{[1 + nx^2 + (n-3)x^4]^2 + (2x^3)^2} dx$$

elde edilir. Şimdi

$$f(x) = [1 + nx^2 + 2(n-4)x^4]^2 - [1 + nx^2 + (n-3)x^4]^2 - 4x^6$$

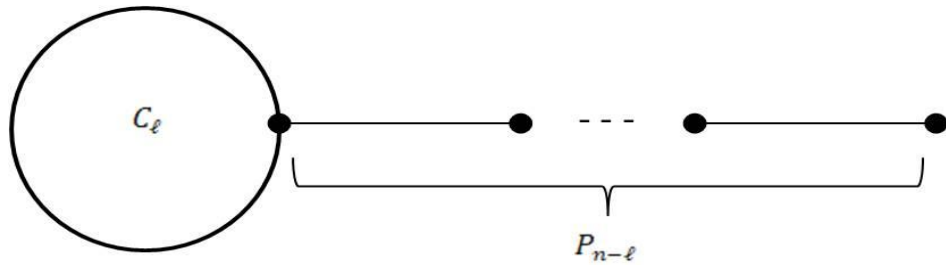
fonksiyonu düşünülerek düzenlenirse

$$f(x) = 2(n-5)x^4 + 2[n(n-5) - 2]x^6 + (n-5)^2x^8 + 2(n-5)(n-3)x^8 > 0$$

Eşitlikten de görüldüğü gibi $n \geq 6$ için $\mathcal{E}(\mathcal{A}_n^4) > \mathcal{E}(\mathcal{A}_n^3)$ dir.

Yukarıdaki teoremden de görüldüğü gibi Konjektür 4.12 $n = m$ için $n \geq 6$ noktalı bütün tek dögü (unicyclic) graflar için doğrulanmıştır.

P_n^ℓ grafi; $P_{n-\ell}$ yol grafinin bir pendant noktasına C_ℓ dögü grafinin bir noktasına eklenmesiyle elde edilen graftır (Bknz. Şekil 4.4).



Şekil 4.4. P_n^ℓ graf örneği

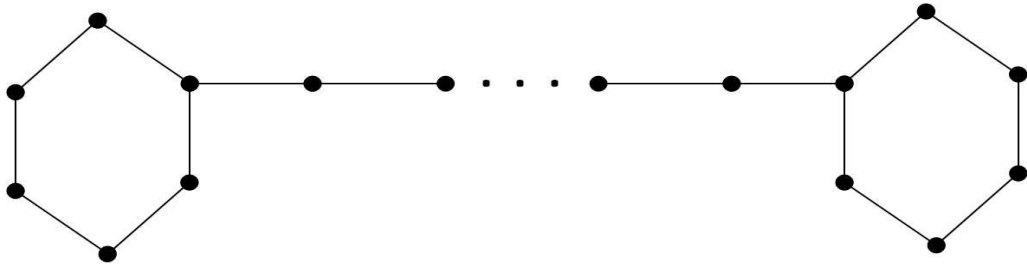
Konjektür 4.16. n noktalı bütün tek dögü (unicyclic) graflar arasında $n \leq 7$ ve $n = 9, 10, 11, 13, 15$ olmak üzere C_n dögü graflar maksimal enerjili graflardır. $n = 8, 12, 14$ ve $n \geq 16$ için maksimal enerjili tek dögü graf P_n^6 grafidır [34].

[36] numaralı kaynakta yukarıda verilen tahminden daha zayıf bir sonuç elde edilmiştir.

Teorem 4.17. $n \geq 16$ noktalı bütün tek dögü graflar arasında P_n^6 maksimal enerjiye sahip graftır [36].

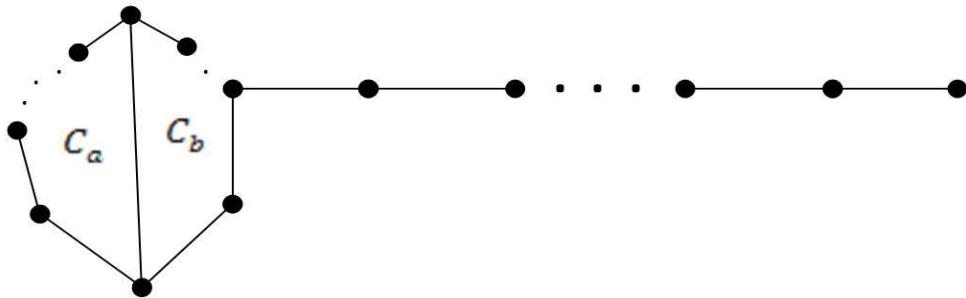
Konjektür 4.18. $n = 14$ ve $n \geq 16$ için maksimal enerjili moleküler çift dögü (bicyclic) graf $P_n^{6,6}$ grafidır [37].

Tahmin 4.17 de belirtilen $P_n^{6,6}$ grafi; $n - 10$ noktalı bir yol ile C_6 dögü grafinin iki kopyasıyla birleştirilmesi ile elde edilen graftır. (Şekil 4.5)



Şekil 4.5. $P_n^{6,6}$ grafi

\mathfrak{B}_n , $a, b \geq 10$ ve $a \equiv b \equiv 2 \pmod{4}$ olmak üzere C_a ve C_b dögülerine bir kenar eklenmesiyle elde edilmeyecek şekilde iki parçalı çift dögü bütün bağlantı grafların ailesini gösterebilirsin (Şekil 4.6.).



Şekil 4.6.

Teorem 4.19. $n \geq 16$ için $G \in \mathfrak{B}_n$ olmak üzere

$$\mathcal{E}(G) \leq \mathcal{E}(P_n^{6,6})$$

dir. Üstelik eşitliğin sağlanması için gerek ve yeter koşul $G \cong P_n^{6,6}$ [38].

Teorem 4.20. G keyfi iki parçalı çift döngülü graflar için

$$\mathcal{E}(G) \leq \mathcal{E}(P_n^{6,6})$$

sağlanır [39].

Not 4.21. Yukarıda verilen teoremler iki parçalı çift döngülü graflar için Konjektür 4.17' yi ispatlar. İki parçalı olmayan graflar için hala açık bir problemdir.

Bu bölümde belirtilen açık problemlere ek olarak aşağıda belirtilen problem literatürde büyük açık problem olarak bilinir.

Problem 4.22. $k = 1, 2, \dots$ olmak üzere $n \neq (2k)^2$ için n mertebeli bütün maksimum enerjili grafları karakterize ediniz.

5. BÖLÜM

SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tezde giriş ve özetinde de belirtildiği gibi graf enerjisi ile ilgili geniş ve kapsamlı bir inceleme yapılmıştır. Özellikle dördüncü bölümde konu ile ilgili dikkate değer birçok açık problemlere de değinilmektedir.

Genel olarak graf enerji konusu Uzakdoğu ülkelerinde çalışılan bir konu olup ülkemizde pek bilinmeyen bir konudur. Bu sebeple bu tez ülkemizde de Türkçe kaynak olarak kullanılması açısından da önem arz etmektedir. Bu tezde açık olan problemlerin çözümlenebilmesi için bazı anahtar rol oynayan teoremler ve sonuçlar verilmiştir. Genelde konu ile ilgili pek çok açık problemlerin ispatlanabilmesi zor olmasına karşın olanaksız değildir.

KAYNAKLAR

- [1] Gutman, I., “The energy of a graph”, *Ber. Math.–Statist. Sect. Forschungsz. Graz*, 103, 1–22, 1978.
- [2] Gutman, I., “Acyclic conjugated molecules, tree and their energies”, *J. Math. Chem.*, 1, 123–143, 1987.
- [3] Gutman, I., “The Energy of a Graph: Old and New Results”, ed. by A. Betten, A. Kohnert, R. Laue, A. Wassermann. *Algebraic Combinatorics and Applications*, Springer, Berlin, sf. 196–211, 2001.
- [4] Cvetković, D., Doob, M., Gutman, I., A. Torgásev, “Recent Results in the Theory of Graph Spectra”, North–Holland, Amsterdam, 1988.
- [5] Gutman, I., Polansky, O.E., “Mathematical Concepts in Organic Chemistry”, Springer, Berlin, 1986.
- [6] Pena, I, Rada, J., “Energy of digraphs”, *Linear and Multilinear Algebra*, 56, 565–579, 2008.
- [7] Das, K. C., “Sharp bounds for the sum of the squares of the degrees of a graph”, *Kragujevac J. Math.*, 25, 31–49, 2003.
- [8] Tascı, D., *Lineer Cebir*, Ankara, 2011
- [9] Horn, R., Johnson, C., “Matrix Analysis”, Cambridge University Press, London, 1989.
- [10] Cvetkovic, D., Doob, M., Sachs, H., “Spectra of Graphs”, Theory and Application Academic, New York, 1980.

- [11] Steele, J. M., “The Cauchy Schwartz Master Class”, Cambridge University Press, London, 2004.
- [12] Wayne B., “Handbook of Linear Algebra”, chapter 8. Chapman and Hall/CRC, 2007.
- [13] So, W., Robbiano, M., Abreu, N.M.M., Gutman, I., “Applications of a theorem by Ky Fan in the theory of graph energy”, *Lin. Algebra Appl.*, 432, 2163–2169, 2010.
- [14] C. Vasudev, Graph Theory With Applications, *sf.* 27-28, ISBN : 978-81-224-2413-3.
- [15] Lovász, L., Pelikán, J., “On the eigenvalues of trees”, *Period. Math. Hungar.*, 3, 175–182, 1973.
- [16] Koolen, J. H., Moulton, V., Gutman, I., Vidovic, D., “More hyperenergetic molecular graphs”, *Journal of the Serbian Chemical Society*, 65 (8), 571–575, 2000.
- [17] Stinson, D.R., “Combinatorial designs: Constructions and Analysis”, Springer-Verlag, New York, 2004.
- [18] McClelland, B., “Properties of latent roots of a matrix: The estimation of p-electron energies”, *Journal of Chemical Physics*, 54, 640–643, 1971.
- [19] Gutman, I., “Bounds for total π -electron energy”, *Chem. Phys. Lett.*, 24, 283–285, 1974.
- [20] Koolen, J.H., Moulton, V., Maximal energy graphs, *Adv. Appl. Math.*, 26, 47–52 2001.

- [21] Hofmeister, M., "Spectral radius and degree sequence", *Math. Nachr.*, 139, 37–44, 1988.
- [22] Zhou, B., "Energy of graphs", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 51, 111–118, 2004.
- [23] Yu, A., Lu, M., Tian F., "New upper bounds for the energy of graphs", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 53, 441–448, 2005.
- [24] Koolen, J.H., Moulton, V., "Maximal energy bipartite graphs", *Graphs Combin.*, 19, 131–135, 2003.
- [25] Li, X., Shi, Y., Gutman, I., "Graph energy", Springer-Verlag, New York, 2012.
- [26] Koolen, J.H., Moulton, V., "Maximal energy graphs", *Advances in Applied Mathematics*, 26, 47–52, 2001.
- [27] Rada, J., "The McClelland inequality for the energy of digraphs", *Linear Algebra and its Applications*, 430, 800–804, 2009.
- [28] Rada, J., "Lower bounds for the energy of digraphs", *Linear Algebra and its Applications*, 432, 2174–2180, 2010.
- [29] Pirzada, S., Bhat, M.A., Gutman, I., Rada, J., "On the energy of digraphs", *Bull. Int. Math. Virt. Institue*, 3, 69–76, 2013.
- [30] Rada, J., "Bounds for the energy of normal digraphs", *Linear Mult. Alg.*, 60 (3), 323–332, 2012.
- [31] Gutman, I., "Acyclic systems with extremal Huckel π -electron energy", *Theor. Chim. Acta.*, 45, 79–87, 1977.

- [32] Haemers, W. H., “Strongly regular graphs with maximal energy”, *Discussion paper series*, Tilburg University, 37, 2007.
- [33] Zhang, F., Li, H., “On acyclic conjugated molecules with minimal energies”, *Discr. Appl. Math.*, 92, 71–84, 1999.
- [34] Caporossi, G., Cvetkovi´c, D., Gutman, I., Hansen, P., “Variable neighborhood search for extremal graphs 2. finding graphs with extremal energy”, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 39, 984–996, 1999.
- [35] Hou, Y., “Unicyclic graphs with minimal energy”, *J. Math. Chem.*, 29, 163–168, 2001.
- [36] Hou, Y., Gutman, I., Woo, C.W., “Unicyclic graphs with maximal energy”, *Lin. Algebra Appl.*, 356, 27–36, 2002.
- [37] Gutman, I., Vidović, D., “Quest for molecular graphs with maximal energy: A computer experiment”, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 41, 1002–1005, 2001.
- [38] Li, X., Zhang, J., “On bicyclic graphs with maximal energy”, *Linear Algebra and its Applications*, 427, 87–98, 2007.
- [39] Huo, B., Ji, S., Li, X., Shi, Y., “Solution to a conjecture on the maximal energy of bipartite bicyclic graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, 435, 804–810, 2011.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı, Soyadı : Kahraman BİRGİN
Uyruğu : Türkiye (TC)
Doğum Tarihi ve Yeri : 18 Temmuz 1974, Alfeltleine
Medeni Durumu : Evli
E-mail : kahramanbirgin@hotmail.com

EĞİTİM

| Derece | Kurum | Mezuniyet Tarihi |
|--------|----------------------------------|------------------|
| Lisans | Uludağ Ü. Fen Edebiyat Fakültesi | 1998 |
| Lise | Ortaköy Lisesi, Ortaköy/ Aksaray | 1992 |

İŞ DENEYİMLERİ

| Yıl | Kurum | Görev |
|------------|-------|----------|
| 1998-Halen | MEB | Öğretmen |

YABANCI DİL

İngilizce

YAYINLAR

1. Graph energy and some open problems, Kahraman BİRGİN, Sezer SORGUN, Karatekin Mathematics Days, 11-13 June, 2014.
2. About some conjecture bounds for the largest laplacian eigenvalue of graphs Sezer SORGUN, Kahraman BİRGİN, Hakan KÜÇÜK, Hatice TOPÇU, 4th International Conference on Matrix Analysis and Applications, 2-5 July 2013.

