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

AYNI RANDİĆ ENERJİYE SAHİP GRAFLAR ÜZERİNE

Tezi Hazırlayan
Neriman KARTAL

Tez Danışmanı
Doç. Dr. Sezer SORGUN

Matematik Anabilim Dalı
Doktora Tezi

Eylül 2019
NEVŞEHİR

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

AYNI RANDİĆ ENERJİYE SAHİP GRAFLAR ÜZERİNE

Tezi Hazırlayan
Neriman KARTAL

Tez Danışmanı
Doç. Dr. Sezer SORGUN

Matematik Anabilim Dalı
Doktora Tezi

Eylül 2019
NEVŞEHİR

Doç. Dr. Sezer SORGUN danışmanlığında Neriman KARTAL tarafından hazırlanan **"Aynı Randić Enerjiye Sahip Graflar Üzerine"** başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalında **Doktora Tezi** olarak kabul edilmiştir.

09/09/ 2019

JÜRİ

Başkan	:	Doç. Dr. Halis BİLGİL
Üye	:	Doç. Dr. Sezer SORGUN
Üye	:	Prof. Dr. Aslıhan KARATEPE
Üye	:	Doç. Dr. Ayhan ERCİYES
Üye	:	Dr. Öğr. Üyesi Hatice TOPCU

ONAY:

Bu tezin kabulü Enstitü Yönetim Kurulunun 18.09.2019 tarih ve 58-600 sayılı kararı ile onaylanmıştır.

20/09/ 2019

Prof. 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.

Neriman KARTAL

TEŞEKKÜR

Doktora öğrenimim boyunca desteğini her zaman hissettiğim, bilgi ve tecrübesiyle bana yön veren, enerjisi ile çalışma sürecini keyifli hale getiren danışman hocam Doç. Dr. Sezer SORGUN'a,

Eğitim-öğretim hayatım boyunca maddi ve manevi desteklerini benden esirgemeyen aileme,

Çalışmalarım boyunca moralimi yüksek tutmamı sağlayan, her daim yanımda olan eşim Şenol KARTAL'a teşekkür ederim.

AYNI RANDİĆ ENERJİYE SAHİP GRAFLAR ÜZERİNE

(Doktora Tezi)

Neriman KARTAL

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Eylül 2019

ÖZET

Ağlar, düğümler ve düğümler arasındaki bağlantılardan oluşan yapılardır. Düğümler, ağların oluşmasında rol oynayan, ağları anlamlı hale getiren kişiler, bilgisayarlar, proteinler gibi birimlerdir. Birimleri karşılıklı etkileşim içinde olan, karmaşık yapıları anlamak için bu yapıyı oluşturan ağları anlamak gerekir. Bu ağların graflarla görselleştirilmesi ağ yapısını anlaşılabilir hale getirerek daha iyi analiz edilmesini sağlar. Zengin bir çalışma alanına sahip olmasından dolayı Graf Teori disiplinler arası çalışmalarda elverişli bir alandır.

Bu tez çalışmasında kimyada uygulaması olan grafların Randić enerjisi üzerinde durulmuştur. Çalışma beş bölümden oluşmaktadır: birinci bölümde grafların tarihsel sürecine, uygulama alanlarına, birtakım genel özelliklerine ve akademik olarak yapılan çalışmalara kısaca yer verilmiştir. İkinci bölümde graflarla ilgili bazı temel kavramlar, üçüncü bölümde Randić matrisi ve enerjisinin temel özellikleri verilmiştir. Dördüncü bölümde Randić enerjilerinin aynı kalmasını sağlayan birtakım graf işlemleri tanımlanmıştır. Beşinci bölümde sonuç ve önerilere yer verilmiştir.

Anahtar kelimeler: Graf, Graf Enerji, Randić Matris, Randić Enerji.
Tez Danışman: Doç. Dr. Sezer SORGUN
Sayfa Adeti: 51

ON GRAPHS WITH THE SAME RANDİĆ ENERGY
(Ph. D. Thesis)

Neriman KARTAL

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

September 2019

ABSTRACT

Networks are structures that consist of nodes and connections between them. Nodes are units such as individuals, computers and proteins that play a role in the formation of networks and make networks meaningful. In order to understand complex structures whose units interact with each other, it is necessary to understand the networks that make up this structure. The visualization of these networks with graphs makes the network structure understandable and allows for better analysis and extends to the present day as Graph Theory. Graph Theory is a convenient area for interdisciplinary studies due to its rich working area.

In this thesis, Randić energy of graphs which are applied in chemistry is studied. The study consists of five chapters: In the first part, the historical process of graphs, application areas, some general characteristics and academic studies are briefly mentioned. In the second part, some basic concepts related to graphs, in the third part the basic properties of Randić matrix and its energy are given. In the fourth section, some graphical processes are defined which ensure that Randić energies remain the same. In the fifth chapter, conclusions and recommendations are given.

Keywords: Graph, Graph Energy, Randić Matrix, Randić Energy.
Thesis Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Sezer SORGUN
Page Number: 51

İÇİNDEKİLER

ŞEKİLLER LİSTESİ

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

$\boldsymbol{G(V,E)}$	V nokta kümesi, E kenar kümesi olan bir G grafı
$\boldsymbol{v(G)}$	G grafının mertebesi
$\boldsymbol{e(G)}$	G grafının büyüklüğü
$\boldsymbol{N(v)}$	v nin komşuluk kümesi
$\boldsymbol{d(v)}$	v noktasının derecesi
$\boldsymbol{\Delta(G)}$	G grafının maksimum derecesi
$\boldsymbol{\delta(G)}$	G grafının minimum derecesi
$\boldsymbol{\pi(G)}$	G grafının derece dizisi
$\boldsymbol{N_n}$	n noktalı boş graf
$\boldsymbol{C_n}$	n noktalı döngü graf
$\boldsymbol{K_n}$	n noktalı tam graf
$\boldsymbol{P_n}$	n noktalı yol graf
$\boldsymbol{W_{1,n}}$	n noktalı tekerlek graf
$\boldsymbol{K_{r,s}}$	iki parçalı tam graf
$\boldsymbol{K_{n_1,n_2,\dots,n_k}}$	k-parçalı tam graf
$\boldsymbol{S_n}$	n noktalı yıldız graf
$\boldsymbol{S_{p,q}}$	çift yıldız graf
$\boldsymbol{gr(G)}$	G grafının çevresi
$\boldsymbol{diam(G) = d(G)}$	G grafının çapı
$\boldsymbol{\varepsilon(u)}$	u noktasının dış merkezliliği
$\boldsymbol{r(G)}$	G grafının yarıçapı
$\boldsymbol{\overline{G}}$	G grafının tümleyeni
$\boldsymbol{G[U]}$	G grafının indirgenmiş altgrafı
$\boldsymbol{\omega}$	G nin en büyük kliğindeki noktaların sayısı
$\boldsymbol{c(G)}$	G nin bileşenlerinin sayısı
$\boldsymbol{A(G)}$	G grafının komşuluk matrisi
$\boldsymbol{D}$	Köşegen matris
$\boldsymbol{R_{-1}(G)}$	G grafının Randić indeksi
$\boldsymbol{R(G)}$	G grafının Randić matrisi
$\boldsymbol{RE(G)}$	G grafının Randić enerjisi

$\boldsymbol{\rho_1}$	G grafının Randić spektral yarıçapı
$\boldsymbol{NLE(G)}$	G grafının normalleştirilmiş Laplasyan enerjisi
$\boldsymbol{G+e}$	G grafına kenar ekleme
$\boldsymbol{G-e}$	G grafından kenar çıkarma
$\boldsymbol{S^p}$	$(2p+1)-$ noktalı güneş graf
$\boldsymbol{DS^{p,q}}$	$2(p+q+1)-$ noktalı çift güneş

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Graf teori veya Çizge kuramı, noktalar ve aralarındaki çizgeleri (eğrileri) inceleyen matematiğin bir dalıdır. Bir graf, çizge veya çizit, düğümlerden (noktalar) ve bu düğümleri birbirine bağlayan kenarlardan (yaylardan, bağıntılardan) oluşur. Bu teorinin temeli 1736' da Leonhard Euler tarafından oluşturulmuştur.

Königsberg şehri, Pregel nehrinin iki yakası ve nehirdeki iki ada üzerine kurulmuş olan bir şehirdir. Nehir, şehri dört bölüme ayırmıştır ve bu bölümler toplamda yedi köprü ile birleştirilmiştir. Merak edilen; "Herhangi bir noktadan başlayıp, yedi köprünün hepsinden bir ve yalnız bir kez geçerek şehrin bütün bölümlerini dolaştıktan sonra tekrar başlangıç noktasına varılabilir mi?" sorusudur. Bu sorunun çözümünün olmadığını Leonhard Euler (1707-1783) göstermiştir. Euler, problem üzerinde daha rahat hareket edebilmek için şehirlerin her birini birer nokta ve şehirler arasındaki köprüleri ise eğri parçaları ile göstermiştir [1].

Euler'dan sonra birçok yazar graf teorisini farklı alanlarda kullanmıştır. Kirchhoff 1847' de graf teorisinde Matrix-Tree teoremini oluşturarak bu teoriyi elektrik devrelerine uygulamıştır. Cayley ve Sylvester bazı özel tipteki grafların birkaç özelliğini keşfetmişler ve bunları ağaç olarak adlandırmışlardır. 1850' li yıllarda Cayley ağaç kavramını kullanarak C_nH_{2n+2} molekülünde karbon atomlarının olası durumlarına göre kaç farklı kimyasal diagram oluşabileceğini göstermiştir. 1930' larda Alman bilim adamı Erich Hückel, "Hückel Moleküler Yörünge (HMO) Teorisi" olarak literatüre giren model ile kuantum kimyada birleşik hidrokarbonlardaki π-elektonlarının davranışlarını incelemiştir. Burada elektronların enerji seviyelerini temsil etmek için grafların öz değerlerini kullanmıştır. 1950' ler ve 1960' larda Spektral graf teorisi ile grafların matrislerinin öz değerleri ve öz vektörlerinin karakteristik polinomlarıyla olan ilişkisi matematik literatüründe görülmeye başlanmıştır [2-4].

Graflar geniş bir uygulama alanına sahiptir. Bir problemi analiz edebilmek, üzerinde yorum yapabilmek ve onu çözebilmek için problemin temel özelliklerini de taşıyan bir yapıya, düzene ihtiyaç duyulur. Bundan dolayı bir problemin graf gösterimi model olarak adlandırılır. Durumlar kendi içinde çeşitlilik gösterdiğinden karşılık gelen graflar da iki parçalı, tek parçalı, dallanma ağacı benzeri graflar gibi birçok şekliyle karşımıza çıkmaktadır. Graf teori ve uygulama alanları günümüzde pek çok yerde kullanılmaktadır. Bunlardan bazılarına değinecek olursak: bilgisayar biliminde graflar iletişim ağını belirtmek için kullanılır. Bir web sitesinin bağlantı yapısı; noktaları internet sayfasını, yönlü kenarları ise bir sayfadan diğer sayfaya bağlantıyı gösteren yönlü bir graftır. Graf teorisi dilbilim alanında da yer edinmiştir. Sözdizimi ve kompozisyonel anlam bilimi arasında hiyerarşik bir yapı vardır ve ağaç temelli bir graf yapısından bahsedilebilir. Sözcüksel anlambiliminde, anlamsal ağlar önemlidir. Özellikle bilgisayara uygulandığında aranan kelime ile ilişkili bütün kelimelerle bağlantı kurulması grafın modellenmiş güzel bir sonucudur. Sosyoloji alanında da graf modellerinden bahsetmek mümkündür. Örneğin bir yapının performansı üyelerinin özelliklerine bağlıdır. Eğer bu yapıdaki bir üyenin özellikleri değiştirilirse yapının genel davranışı değişecektir, aynı şekilde üyenin yeri değişirse yapının özellikleri yine farklılık gösterecektir. Yapının bağlanabilirliği (topolojisi), tüm yapının performansını etkiler. Dolayısıyla topolojisinin anlaşılabileceği bir sistemi yani graf modelini belirlemek çok önemlidir. Graflar topolojideki düğüm teorisi ve geometri gibi matematiğin diğer alt dallarında da önemli uygulamalara sahiptir [3, 5-6].

Grafların öz değerleri graflar için çok büyük anlamlar ifade eder. Öz değerler bir grafın yapısını anlamada çok önemli yer teşkil ederler. Graflara karşılık gelen farklı matrislerin (Komşuluk, Laplasyan, Randić, vb.) öz değerleri grafların bazı özellikleri hakkında bilgi verir. Örneğin, bir molekülün kararlılığını tahmin etmede komşuluk matrisinin öz değerlerine bakılabilir. Bir başka açıdan bir grafın komşuluk matrisinin öz değerleri grafın iki parçalı (bipartite) olup olmadığı hakkında bilgi verirken grafın bağlantılı olup olmadığı hakkında bilgi vermez. Grafın Laplasyan öz değerleri grafın bağlantılı olup olmadığı hakkında bilgi verir ama iki parçalı olup olmadığı hakkında bilgi vermez [7].

Aynı şekilde bilgisayar biliminde sıklıkla kullanılan karmaşık bir ağ yapısı çok büyük mertebeli graflar ile gösterilir. Bu yapıyı karakterize etmek için yapılan uygulama ağ yapısına karşılık gelen komşuluk matrisinin öz değerlerinin dağılımıdır. Bu dağılım bağlantısallık, nokta derecesi, noktalar arasındaki mesafeler gibi birçok özelliği tanımlar. Örneğin komşuluk matrisinin en büyük öz değeri (spektral yarıçap) bilgisayar ağlarında virüs yayılımını modellemede önemli bir rol oynar. Spektral yarıçap ne kadar küçük olursa virüslerin yayılımına karşı bir ağın sağlamlığı o kadar artar. İkinci en büyük öz değer ise grafların bağlantısallığı hakkında bilgi verir [7].

Grafların enerjileri özellikle kimya alanında yer edinmiştir. Spektral graf teorisinin en önemli kimyasal uygulaması birleşik hidrokarbonlarda π-elektronlarının moleküler yörünge enerji seviyelerinin bağlantılılığı ile ilgilidir. Hückel moleküler yörüngesel (orbital) yaklaşımına göre birleşik hidrokarbonların moleküllerindeki π-elektronlarının enerji seviyeleri, ilgili grafın öz değerleriyle alakalıdır. Böyle bir moleküler grafın enerjisi

$$E_i = \alpha + \beta\lambda_i$$

biçiminde gösterilir. Burada α ve β, HMO modelinin parametreleridir. HMO yaklaşımına göre π-elektronlarının toplam enerjisi E_π olarak tanımlanır ve E_i, her bir $1 \leq i \leq n$ için elektron enerjisi; g_i, E_i enerjisine sahip π-elektronların sayısı olmak üzere

$$E_\pi = \sum_{i=1}^{n} g_i E_i$$

biçiminde gösterilir. Birleşik hidrokarbonlarda π-elektronların toplam sayısı ilişkili moleküler grafın noktalarının sayısına eşit olduğundan

$$E_\pi = n\alpha + \beta \sum_{i=1}^{n} g_i \lambda_i$$

biçiminde de yazılabilir. Eğer $\lambda_i > 0$ ise birleşik hidrokarbonların çoğu için $g_i = 2$, eğer $\lambda_i < 0$ ise $g_i = 0$ dır. Böylece

$$E_\pi = n\alpha + 2\beta \sum_{+} \lambda_i$$

dır. Burada toplam sembolü moleküler grafın pozitif öz değerleri üzerindeki toplamını ifade eder. Tüm graf öz değerlerinin toplamı sıfıra eşit olduğundan

$$E_\pi = n\alpha + \beta \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i| \tag{1.1}$$

elde edilir. n, α, β sabit olduğundan yukarıdaki denklemin sağ tarafındaki aşikar olmayan terim moleküler grafın öz değerlerinin mutlak değerlerinin toplamıdır. Bu gerçek 1940 lı yıllarda bilinse de 1970 li yıllarda Gutman

$$E = E(G) := \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i| \tag{1.2}$$

bağıntısına graf spektrumu olarak bakılabileceğini göstermiştir. (1.1) denkleminin aksine (1.2) denkleminin sağ tarafı herhangi bir grafa uygulanabilir.

Graf enerjisi bir grafın komşuluk matrisinin mutlak değerinin toplamı olarak adlandırılır. Burada G grafı basit, döngü ve paralel kenar içermeyen bir graftır. G grafının komşuluk matrisi olan A nın özdeğerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ olsun. Bu durumda graf enerjisi

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

olarak tanımlanır [8].

Literatürde Randić enerji birçok açıdan ele alınmıştır. Örneğin, Randić enerji ile grafların tanımlanan diğer matrislerle (Komşuluk, Laplasyan, Normalleştirilmiş Laplasyan,vb.) olan enerjisi arasındaki ilişki, grafların yapısal özelliklerine göre Randić enerjilerinin nasıl değiştiği ve çoğu zaman Randić enerjinin belirli aralıklarda sınırlı kaldığı çalışmaları yapılmıştır [9-30]. Yapılan bu çalışmalara değinilecek olursa; [9-19] da Randić enerji, Randić Estrada index, Randić spektral yarıçap için bazı alt ve üst sınır çalışmaları yapılırken, [20-22] de iki parçalı grafların Randić enerjilerinin sınır çalışmaları yapılmıştır. [23] de Kinkar Ch. Das. ve Shaowei Sun [14] deki çalışmanın bazı sonuçlarında hata olduğu iddiasında bulunup yeni sonuçlar elde etmişlerdir. [24] de bir grafın alt grafının Randić enerjisi ile onun işaretsiz normalleştirilmiş Laplasyan (Normalized Signless Laplacian) öz değerleri arasındaki ilişkiden bahsedilmiştir. [25-

26] çalışmalarında yol, yıldız, tam, Dutch-Windmill vb. bazı özel grafların ve bu graflardan kenar silme ile oluşan yeni grafların Randić karakteristik polinomunu ve dolayısıyla Randić enerjilerini genellemişlerdir. [27] de iki parçalı bir grafa uygulanan bir graf işlemi ile yeni oluşturulan grafların iki parçalı özelliklerinin korunduğu ve aynı zamanda grafların Randić enerjilerinin değişmediğini ortaya koyan çalışma yapmışlardır. [28] de grafların kenar sayılarına göre enerji ve Randić enerjilerinin değişimini ve enerjiler arasındaki davranışların grafların yapısına göre (moleküler graf) farklılık gösterdiği ile ilgili nümerik bir çalışma yapılmıştır. [29] da maksimum veya minimum Randić enerjiye sahip grafların ne olduğuyla ilgili çalışma yapılmıştır. [30] da grafın bir kenarını silme ile Randić enerjisindeki değişimi (artan, azalan) ve kenar ekleme ile Randić enerjisinin aynı kalmasını sağlayan gerekli koşulların ne olduğuyla ilgili çalışılmıştır.

Yukarıda bahsedilen çalışmalardan yola çıkarak bu tez çalışmasında Randić enerjisi değişmeyen graf aileleri oluşturulmuş ve bununla ilgili çeşitli sonuçlar verilmiştir. Çalışma beş bölümden oluşmaktadır:

İkinci bölümde graflarla ilgili bazı temel kavramlar, üçüncü bölümde ise Randić matrisi ve enerjisinin temel özellikleri geniş bir biçimde ele alınmıştır.

Dördüncü bölümde birtakım graf işlemleri tanımlanarak Randić enerjileri aynı olan bazı graf aileleri elde edilmiştir. Beşinci bölümde tez çalışmasından çıkarılabilecek bazı sonuç ve önerilere yer verilmiştir.

BÖLÜM 2

TEMEL TANIM VE KAVRAMLAR

Bu bölümde grafların temel özelliklerine, ileride kullanacağımız graf işlemlerine ve matrislerin birtakım temel özelliklerinden yararlanarak Randić matrise uygulamalarına yer verilmiştir.

2.1. Graf ile İlgili Temel Kavramlar

Bu bölümde yer alan graflarla ilgili temel tanım ve teoremler [2, 5, 7-8, 31-32, 40] kaynaklarından alıntılanmıştır.

Tanım 2.1.1. $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ noktalar kümesini ve $E = \{e_1, \dots, e_m\}$ kenarlar kümesini oluşturmak üzere bir G grafı, $G = (V, E)$ sıralı ikilisi şeklinde tanımlanır. Burada E kümesindeki bir kenar, V kümesindeki noktaların bir sıralı ikilisidir. $|V| = n$ ve $|E| = m$ ise G'ye n noktalı ve m kenarlı bir graf denir. Nokta sayısına kısaca G'nin mertebesi de denir.

Tanım 2.1.2. Eğer $v_i \neq v_j$ olmak üzere $v_i v_j = e$, G nin bir kenarı ise u noktası G de v nin bir komşusudur. v nin tüm komşularının kümesi v nin açık komşuluğu veya v nin komşuluk kümesidir ve $N(v)$ ile gösterilir.

Tanım 2.1.3. Bir grafta v noktasının derecesi, v noktası ile komşu kenarların sayısıdır ve $deg\ (v)$ ya da d_v ile gösterilir.

Lemma 2.1.1. Herhangi bir grafta tüm nokta derecelerinin toplamı kenarların sayısının iki katına eşittir. Yani

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

dir. Bu Lemma el sıkışma (handshaking) lemması olarak bilinir.

Tanım 2.1.4. Bir G grafının minimum derecesi $\delta(G)$ (veya kısaca δ), maksimum derecesi $\Delta(G)$ (veya kısaca Δ) ile gösterilir.

Tanım 2.1.5. Bir G grafında 0 dereceli nokta G nin izole noktasıdır, 1 dereceli nokta ise G nin uç noktasıdır. Bir uç nokta ile komşu kenara uç kenar denir.

Tanım 2.1.6. $\pi(G) = [d_1, d_2, \dots, d_n]$, G grafının derece dizisidir. Burada d_i, i'nci noktanın derecesi ve $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_n$ dir.

Tanım 2.1.7.

i) Bir grafta aynı nokta çiftine iki veya daha fazla kenar eklenmesine çoklu kenar (multiple edge) veya paralel kenar denir.

ii) Bir grafta noktanın kendi kendine bağlanmasına ilmek (loop) denir.

Tanım 2.1.8. Çoklu kenar ve ilmeği olmayan grafa basit graf denir.

Tanım 2.1.9. Bazı özel graflar aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

i) Bir grafın tüm nokta dereceleri aynı dereceye sahipse bu grafa regüler graf denir. Eğer tüm nokta dereceleri r ise bu durumda grafa r -regüler graf denir.

ii) Kenarı olmayan bir grafa boş (null) graf denir. n noktalı bir boş graf N_n ile gösterilir. N_n graf 0 dereceli regüler graftır.

iii) Bir grafta noktalar ve kenarların tek bir döngüden oluştuğu grafa döngü (cycle) graf denir. n noktalı döngü graf C_n ile gösterilir. C_n graf 2 dereceli regüler graftır.

iv) Her noktanın bir kenar ile diğer tüm noktalara bağlanmasıyla oluşan grafa tam graf (complete graph) denir. n noktalı tam graf K_n ile gösterilir. K_n graf $\frac{n(n-1)}{2}$ kenarı olan $(n-1)-$ regüler graftır.

Tanım 2.1.10.

i) k uzunluğunda bir yürüme (walk) $uv, vw, wx, \dots, yz$ şeklinde sıralanmış k kenarlı bir graftır. Bu yürüme $uvwx \dots yz$ ile gösterilir ve buna u ve z arasında bir yürüme denir.

ii) Tüm kenarları ve tüm noktaları farklı olan yürümeye yol (path) denir.

Tanım 2.1.11. Noktalarının her bir çifti arasında bir yol varsa bu grafa bağlantılı graf denir. Aksi halde grafa bağlantısız graf denir.

Tanım 2.1.12.

i) Bir döngü içermeyen bağlantılı graflara ağaç denir.

ii) Tüm noktaları boyunca tek bir yoldan meydana gelen ağaca yol (path) graf denir. n noktalı bir yol graf P_n ile gösterilir.

Tanım 2.1.13. $(n+1)-$ noktalı bir döngü grafın her bir noktası, bir tek noktayla (bu nokta çevre grafa ait değildir) birer kenar eklenmesiyle elde edilen grafa tekerlek graf denir. n noktalı bir tekerlek graf $W_{1,n}$ ile gösterilir.

Tanım 2.1.14. Bir grafın noktalar kümesi A ve B şeklinde iki alt kümeye ayrılabilir öyle ki grafın her kenarı A ve B noktalarına eklenen graflara iki parçalı graf denir.

Teorem 2.1.1. Bir graf iki parçalıdır ancak ve ancak bu graf tek bir döngü içermez.

Tanım 2.1.15. İki parçalı grafta A nın her noktasının B nin her noktasına yalnızca bir kenar ile birleştirilmesiyle oluşan grafa iki parçalı tam graf (complete bipartite graf) denir. A nın nokta sayısı r, B nin nokta sayısı s olan iki parçalı tam graf $K_{r,s}$ ile gösterilir.

Tanım 2.1.16. Eğer k kümelerinde $n_1, n_2, \dots, n_k$ noktaları varsa ve farklı kümelere ait her iki nokta komşu ise bu grafa tam $k-$ parçalı graf (complete k-partite, complete multipartite) denir ve $K_{n_1,n_2,\dots,n_k}$ ile gösterilir.

Tanım 2.1.17.

i) $K_{1,n-1}$, tam iki parçalı grafı n noktalı bir yıldız (star) graftır ve S_n ile gösterilir.

ii) S_p ve S_q merkezlerine bir kenar eklenerek elde edilen $S_{p,q}$ grafına çift yıldız (double star) graf denir. n noktalı bir çift yıldız $S_{p,q}$ için $p+q=n$ dir. Çift yıldız bir ağaçtır.

Tanım 2.1.18. Bir G grafında en kısa döngünün uzunluğuna çevre (girth) denir ve $gr(G)$ ile gösterilir.

Tanım 2.1.19. G deki noktaların herhangi çifti arasındaki en büyük uzaklığa G nin çapı (diameter) denir ve $diam(G)$ ile gösterilir ve

$$d(G) = {}_{u,v\in V(G)}^{max} d(u,v)$$

dir.

Tanım 2.1.20. *u* noktasının dış merkezliliği (eccentricity)

$$\varepsilon(u) = {}_{v\in V}^{max} d(u,v)$$

dir. Nokta dış merkezliliğinin maksimumu çapa eşittir.

Tanım 2.1.21. Bir G grafının yarıçapı

$$r(G) = {}_{u\in V}^{min} \varepsilon(u)$$

dir.

Tanım 2.1.22. Bir grafın merkezi (center), grafın yarıçapına eşit dış merkezlilikleri olan noktalar kümesidir. Bir ağacın merkezi bir tek noktadır ve buna merkez noktası denir veya bir kenarın iki ucuna merkezi kenar denir.

Tanım 2.1.23. Bir G grafının tümleyeni $\bar{G}$, G ile aynı nokta kümesine sahiptir öyle ki iki nokta $\bar{G}$ de komşudur ancak ve ancak G de komşu değildir.

Teorem 2.1.2. Eğer bir G basit grafı bağlantılı değilse bu durumda $\bar{G}$ bağlantılıdır.

Tanım 2.1.24. G_1 ve G_2 iki graf olsun. G_1 in herhangi iki noktasını birleştiren kenarların sayısı G_2 nin karşılık gelen noktalarını birleştiren kenarların sayısına eşit olmak üzere G_1 ve G_2 nin noktaları arasında birebir bir eşleme varsa G_1 ve G_2 ye izomorf graflardır denir [33].

Tanım 2.1.25. H, $V(H)$ nokta kümesine ve $E(H)$ kenar kümesine; G, $V(G)$ nokta kümesine ve $E(G)$ kenar kümesine sahip birer graf olmak üzere eğer $V(H) \subseteq V(G)$ ve $E(H) \subseteq E(G)$ ise H grafına G grafının alt grafı (subgraph) denir. Aynı zamanda G ye H ın bir süper grafı (supergraph) denir. G nin bir alt grafına izomorf olan bir graf aynı zamanda G nin bir alt grafıdır. Eğer H, G nin bir alt grafı ise bunu $H \subseteq G$ şeklinde yazarız.

Tanım 2.1.26. $H \subseteq G$ ve $H \neq G$ $(V(H) \neq V(G)$ ya da $E(H) \neq E(G))$ olduğunda H grafına G grafının öz alt grafı (proper subgraph) denir. Eğer $V(H) = V(G)$ (H ve G aynı nokta kümelerine sahip) ise G nin H altgrafına G nin bir üretilen altgrafı (spanning subgraph) denir.

Tanım 2.1.27. G, çoklu kenar veya ilmek içermeyen sonlu, yönsüz bir graf olsun. $V(G)$, G nin noktalar kümesi, $E(G)$, G nin kenarlar kümesi olmak üzere, eğer $U \subset V(G)$ ise bu durumda U nokta kümesine sahip $G[U]$ içinde iki nokta komşudur ancak ve ancak bu noktalar G de komşudur. Bu durumda $G[U]$ ya G nin indirgenmiş alt grafı (induced subgraph) denir.

Tanım 2.1.28. Bir G grafının herhangi indirgenmiş tam alt grafına bir klik (clique) denir. Klik sayısı ω, G nin en büyük kliğindeki noktaların sayısıdır. Benzer olarak tamamen bağlantısız indirgenmiş alt grafına ko-klik (coclique) denir.

Tanım 2.1.29. G nin bileşenleri G nin maksimal bağlantılı alt graflarıdır. G nin bileşenlerinin sayısı $c(G)$ ile gösterilir. u ve v, G de iki nokta olsun. Eğer u ve v, G nin aynı bileşeninde ise $d(u,v)$, G de bir en kısa $u-v$ yolun uzunluğu olarak tanımlanır diğer durumda $d(u,v) = \infty$ dır. Eğer G bağlantılı bir grafsa d bir uzaklık (distance) fonksiyonu veya $V(G)$ üzerinde bir metriktir; yani $d(u,v)$ aşağıdaki şartları sağlar:

i) $d(u,v) \geq 0$ ve $d(u,v) = 0$ ancak ve ancak $u = v$.

ii) $d(u,v) = d(v,u)$.

iii) Her $w \in V(G)$ için $d(u,v) \leq d(u,w) + d(w,v)$

Tanım 2.1.30. G; n noktalı, m kenarlı bağlantılı bir graf olsun. $m = n - 1$ olan grafa ağaç graf denir. Ayrıca eğer $m = n - 1 + k$ $(k \geq 1)$ ise grafın k −döngü (k −cyclic) olduğu söylenir. $k = 1$ için graf tek döngülü (unicyclic), $k = 2$ için için graf çift döngülü (bicyclic) graftır.

Tanım 2.1.31. Bir yönlü graf, yay (arc) ve nokta kümelerinden oluşmaktadır. Her yay belirtilen yönde iki nokta birleştirir.

Tanım 2.1.32. Yönlü bir grafta aynı yönde noktaların aynı çiftine iki veya daha fazla yay eklenmesine çoklu yay denir. Bir noktanın kendi kendine bir yay eklenmesine ilmek denir. Çoklu yay veya ilmeği olmayan bir yönlü grafa basit yönlü graf denir.

2.2. Matrisler ile İlgili Bazı Kavramlar

Burada matrislerle ilgili temel tanımlar kaynak [34] den alınmıştır.

Tanım 2.2.1. $A = (a_{ij})$ bir n-kare matris olsun. A nın köşegeni (veya ana (esas) köşegen) $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ elemanlarından oluşur. A nın izi, izA ile gösterilir ve köşegen elemanlarının toplamıdır, yani

$$izA = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn} \equiv \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$$

dir.

Tanım 2.2.2. I birim matris ve A kare matris olmak üzere $AB = BA = I$ özeliği sağlanacak şekilde kare bir B matrisi varsa A ya terslenebilen (tekil olmayan) dir denir. B matrisini A nın tersi olarak adlandırır ve A^{-1} ile gösteririz.

Tanım 2.2.3. Eğer bir $D = (d_{ij})$ kare matrisinde köşegen olmayan tüm elemanlar sıfır ise matris köşegendir ve $D = diag(d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn})$ ile gösterilir.

Tanım 2.2.4. A bir kare matris olmak üzere eğer $A^T = A$ ise reel A matrisi simetriktir. Eğer $A^T = -A$ ise A matrisi ters simetriktir.

Tanım 2.2.5. Eğer bir reel A matrisi için $AA^T = A^T A = I$ ise A ortogonaldir denir. Bir ortogonal kare matris, terslenebilir ve $A^{-1} = A^T$ olan bir matristir.

Tanım 2.2.6. Bir B matrisi için eğer aşağıdaki gibi tekil olmayan bir P matrisi varsa B matrisi A matrisine benzerdir denir:

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

Eğer $B = P^{-1}AP$ bir köşegensel matris olacak şekilde bir tekil olmayan P matrisi varsa A matrisi köşegenleştirilebilirdir denir.

Tanım 2.2.7. Reel simetrik bir A matrisine, eğer $\mathbb{R}^n$ deki sıfır olmayan her X (kolon) vektörü için

$$X^T AX > 0$$

sağlanıyorsa, pozitif tanımlıdır denir.

Tanım 2.2.8. $A \in \mathbb{R}^{mxn}, B \in \mathbb{R}^{pxq}$ olsun. Bu durumda A ve B nin tensör çarpımı (veya Kronecker çarpım)

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{mpxnq}$$

matrisi olarak tanımlanır.

Tanım 2.2.9. Bir K cismi üzerinde bir n −kare matris A olsun. Eğer

$$Av = \lambda v$$

olacak şekilde sıfırdan farklı bir $v \in K^n$ (kolon) vektörü varsa $\lambda \in K$ skalerine A matrisinin bir öz değeri, v vektörüne ise bu öz değere karşılık gelen A matrisinin öz vektörü denir. Burada $det(\lambda I_n - A) = 0$ karakteristik denkleminin kökleri A matrisinin öz değerlerini verir, bu öz değerlerin mutlak değerce en büyüğüne ise A matrisinin spektral yarıçapı denir.

Teorem 2.2.1. Simetrik bir matrisin tüm öz değerleri reel dir.

Tanım 2.2.10. $G = (V, E)$; $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ nokta kümesi, $E = E(G)$ ($|E(G)| = m$) kenar kümesi olan bağlantılı bir graf olsun. Bu durumda G grafının $A(G) = (a_{ij})$ komşuluk matrisi elemanları

$$a_{ij} = \begin{cases} 1\,, & v_i v_j \in E(G)\ (v_i, v_j \text{ noktaları komşu ise}) \\ 0, & \text{diğer durumlarda} \end{cases}$$

olacak biçimde tanımlanır [17]. $A(G)$ komşuluk matrisi simetrik matris olduğundan Teorem 2.2.1 den kolaylıkla görülür ki $A(G)$ nin öz değerleri reeldir ve $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ biçiminde sıralanır.

G nin öz değerlerinin en büyüğüne G nin spektral yarıçapı denir ve $\rho(G)$ ile gösterilir. Tüm öz değerlerinin kümesine G nin spektrumu denir.

Teorem 2.2.2. G, n noktalı ve öz değerleri

$$\lambda_1(G) \geq \lambda_2(G) \geq \cdots \geq \lambda_n(G)$$

olan bir graf;

H da n' noktalı ve özdeğerleri

$$\lambda_1(H) \geq \lambda_2(H) \geq \cdots \geq \lambda_{n'}(H)$$

olan G nin bir indirgenmiş alt graf olsun. Bu durumda;

$$\lambda_{n-n'+i}(G) \leq \lambda_i(H) \leq \lambda_i(G) \quad (1 \leq i \leq n')$$

dır [7]. Bu teorem iç içe geçme lemması (Interlacing Lemma) olarak bilinir.

Teorem 2.2.3. Bir G grafı iki parçalıdır ancak ve ancak onun spektrumu orjine göre simetriktir, yani

$$\lambda_i = -\lambda_{n+1-i}$$

dir [7].

Sonuç 2.2.1. Reel, simetrik bir A matrisinin öz değerleri $\alpha_1 \geq \cdots \geq \alpha_n$ olsun.

$|\Delta_i| = n_i > 0$ olmak üzere $\{1,2, \dots, n\} = \Delta_1 \dot{\cup} \Delta_2 \dot{\cup} \dots \dot{\cup} \Delta_m$ bir küme parçalanışı olsun. $A_{ij}, n_i \times n_j$ tipinde bir blok olmak üzere $A = (A_{ij})$ blok matrisi yazılsın. A_{ij} bloğundaki tüm bileşenlerin toplamı e_{ij} ve $B = (e_{ij}/n_i)$ ise B nin özdeğerleri A nın öz değerleri ile iç içe geçer (Burada e_{ij}/n_i , A_{ij} bloğundaki ortalama satır toplamıdır.) [40].

Burada aynı blok içerisindeki tüm satır toplamları eşit ise aşağıdaki sonuç elde edilir.

Sonuç 2.2.2. A matrisi Sonuç 2.2.1 deki gibi bloklara ayrılabilen bir matris olsun. A_{ij} bloğundaki sabit satır toplamı b_{ij} ve $B = (b_{ij})$ ise A nın spektrumu B nin spektrumunu kapsar [40].

Tanım 2.2.11. $G = (V, E)$ grafı verilsin ve V kümesinin bir parçalanışı $V = V_1 \dot{\cup} V_2 \dot{\cup} \dots \dot{\cup} V_k$ olsun. $\forall i, j \in \{1, \dots k\}$ için eğer V_i kümesindeki her nokta V_j de aynı sayıda noktaya komşu ise bu parçalanışa G grafının bir eşit parçalanışı (equatible partition) denir [40].

Tanım 2.2.12. $G = (V, E)$ grafı ve $V = V_1 \dot{\cup} V_2 \dot{\cup} \dots \dot{\cup} V_k$ eşit parçalanışı verilsin. Sonuç 2.2.2 deki notasyona uygun biçimde elde edilen $B = (b_{ij})$ matrisine bu parçalanışın bölüm matrisi (quotient matrix) denir [40].

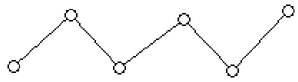
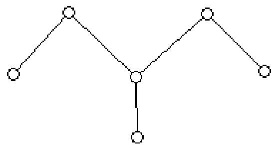
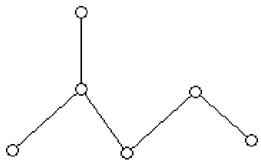
Sonuç 2.2.2 den aşağıdaki teorem elde edilir.

Teorem 2.2.4. Bir grafın herhangi bir eşit parçalanışına ait bölüm matrisinin karakteristik polinomu, bu grafın komşuluk matrisinin karakteristik polinomunu böler [40].

2.3. Randić Matrisi

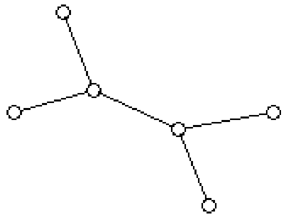
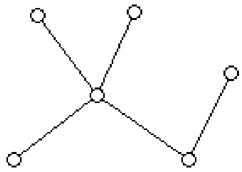
Teorik kimya ve biyolojide moleküler yapı tanımlayıcıları moleküller hakkındaki bilgiyi ölçmek için kullanılmıştır. Bu da moleküler indeksler kullanılarak kimyasal bileşiklerin fiziko-kimyasal, toksikolojik, farmakolojik, biyolojik ve diğer özelliklerini karakterize etmekle ilgilidir. Yani bir topolojik indeks, karşılık gelen moleküler graftan türetilen bir moleküler yapının sayısal bir tanımlayıcısıdır ve kullanım şekline göre dereceye dayalı indeksler (Randić indeks, atom-bağ bağlantısallığı indeksi vb.), uzaklığa dayalı indeksler (Wiener indeksi,vb.), öz değere dayalı indeksler gibi farklı türleri mevcuttur.

1975' te Milan Randić organik moleküllerin fiziksel ve kimyasal özellikleri ile çok yakından ilişkili olan $\chi(G) = \sum_{i\sim j} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}$ bağlanabilme (connectivity) indeksi veya dallanma (branching) indeksi adı altında bir topolojik indeks tanımlamıştır. Günümüzde bu indeks sıklıkla Randić index olarak kullanılmaktadır. Burada G, moleküle karşılık gelen n noktalı çoklu kenarı olmayan, döngüsüz bir graftır. G, noktaları moleküllerin karbon atomları ve kenarları ise atomların arasındaki elektronik bağları temsil eden bir doymuş hidrokarbonun moleküler grafı olarak gösterilmiştir. Milan Randić, bu indeksi doymuş hidrokarbonların karbon-atom iskeletinin dallanma derecesini ölçmek için tasarlamıştır. Randić indeksi ile alkanların kaynama noktaları, yüzey alanları, enerji seviyeleri vb. gibi çeşitli fiziko-kimyasal özellikleri arasında iyi bir ilişki olduğu görülmüştür. [36-37, 41].

K.N: 68,7 63,3 60,3

RI: 2,91421 2,80806 2,77006

K.N: 58 49,7

RI: 2,64273 2,56066

Şekil 2.1. n −Hekzanın beş izomeri, kaynama noktaları (K.N) ve Randić indeksleri (RI)

Daha sonra buradan yola çıkarak bu indeksin elemanlarını matrisin elemanları olarak tanımlayıp Randić matris oluşturulmuştur**.**

Randić indeksi sadece kimya uygulamalarında değil aynı zamanda bilgi teorisi, protein sıralaması**,** ağ benzerliği, ağın heterojenliği ve ağın sağlamlığını incelemek için kullanılan bir metottur.

G grafının genel Randić indeksi $\alpha \neq 0$ sabit bir reel sayı olmak üzere

$$R_\alpha = R_\alpha(G) = \sum_{v_i \sim v_j} \left(d_i d_j\right)^\alpha$$

olarak tanımlanır. $\alpha = -1$ olduğunda genel Randić indeksi

$$R_{-1} = R_{-1}(G) = \sum_{v_i \sim v_j} \frac{1}{d_i d_j}$$

biçimine dönüşür.

Tanım 2.3.1.

G nin $R = R(G) = (r_{ij})$ Randić matrisi elemanları

$$r_{ij} = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{d_i d_j}}, & \text{eğer } v_i \sim v_j \text{ ise} \\ 0 & \text{, diğer durumlarda} \end{cases}$$

olan $n \times n$ matris olarak tanımlanır.

Randić matrisi, reel simetrik bir matristir ve onun tüm öz değerleri $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_n$ reel sayılardır. Buradaki en büyük ρ_1 özdeğerine G grafının Randić spektral yarıçapı denilir.

G grafının Randić enerjisi

$$RE = RE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|$$

olarak tanımlanır [14].

BÖLÜM 3

RANDIĆ MATRİSİ VE ENERJİSİNİN BAZI TEMEL ÖZELLİKLERİ

Bu bölümde özel grafların Randić öz değerlerine, Randić enerjinin sınırları ve Randić indeksle olan ilişkisine ve aynı zamanda özel grafların (yol graf, döngü graf, yıldız graf, tam graf, vb.) Randić karakteristik polinomlarına yer verilmiştir.

Lemma 3.1.1. G, basit bağlantılı bir graf iki farklı Randić öz değerine sahiptir ancak ve ancak $G \cong K_n$ [10].

Lemma 3.1.2. G, n noktalı $(n \geq 1)$ bir graf olsun. K_n, n noktalı bir tam graf ve $\overline{K_n}$ onun tümleyeni olsun. Bu durumda $RE(G) = 0$ dır ancak ve ancak $G \cong \overline{K_n}$ dir [29].

Teorem 3.1.1. G, n noktalı $(n \geq 1)$ bir graf ve ρ_1 Randić matrisinin en büyük özdeğeri olsun. Bu durumda $\rho_1 = 0$ dır ancak ve ancak $G \cong \overline{K_n}$ dır. Eğer G en az bir kenara sahipse bu durumda $\rho_1 = 1$ dir [29].

Teorem 3.1.2. G, n noktalı bir graf olsun. G nin tek pozitif Randić özdeğeri $\rho_1 = 1$ dir ancak ve ancak G nin bir bileşeni çok parçalı tam graf ve tüm diğer bileşenleri (varsa) izole noktalardır [29].

Lemma 3.1.3. Herhangi bir grafın Randić spektral yarıçapı $\rho_1 = 1$ dir [14].

Lemma 3.1.4. G, n noktalı bağlantılı graf olsun ve onun Randić öz değerleri $1 = \rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_n$ olsun. Bu durumda;

i) $G \cong K_n$ olduğunda $\rho_1 = 1$ ve $\rho_2 = \cdots = \rho_n = -\frac{1}{n-1}$ dir.

ii) $G \neq K_n$ olduğunda $\rho_2 \geq 0$ dır. Eşitlik ancak ve ancak G, çok parçalı tam graf olduğunda sağlanır.

iii) G, iki parçalı bir graftır bu durumda $\rho_i = -\rho_{n-i+1}$, $i = 1,2, \dots, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$ dir [16].

Tanım 3.1.1. G, Randić matrisi R olan n noktalı bir graf olsun. Bu durumda;

$tr(R) = 0,$

$$tr(R^2) = 2\sum_{i\sim j}\frac{1}{d_i d_j} \quad ,$$

$$tr(R^3) = 2\sum_{i\sim j}\frac{1}{d_i d_j}\left(\sum_{k\sim i, k\sim j}\frac{1}{d_k}\right),$$

$$tr(R^4) = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{i\sim j}\frac{1}{d_i d_j}\right)^2 + \sum_{i\neq j}\frac{1}{d_i d_j}\left(\sum_{k\sim i, k\sim j}\frac{1}{d_k}\right)^2$$

eşitlikleri sağlanır [9].

Lemma 3.1.5. G, n noktalı bağlantılı bir graf olsun. Bu durumda;

$$\frac{n}{2\Delta} \leq R_{-1} \leq \frac{n}{2\delta}$$

dır. Sınırlar eşittir ancak ve ancak G regüler graftır [14].

Teorem 3.1.3. Eğer G, $n \geq 3$ noktalı bağlantılı bir graf ise bu durumda;

$$R_{-1}(G) \leq \frac{15(n+1)}{56}$$

dır [42].

Eğer T, bir ağaç ise bu durumda;

$$R_{-1}(T) \leq \frac{5n+8}{18}$$

dır [43].

Eğer T, $n \geq 103$ noktalı bir ağaç ise bu durumda;

$$R_{-1}(T) \leq \frac{15n-1}{56}$$

dır [44-45].

Teorem 3.1.4. G, n noktalı bağlantılı bir graf ve P, R Randić matrisinin determinantının mutlak değeri olsun. Bu durumda;

$$1+\sqrt{(n-1)(n-2)P^{2/(n-1)}+2R_{-1}-1} \leq RE(G) \leq 1+\sqrt{(n-1)(2R_{-1}-1)}$$

dır. Her iki sınırdaki eşitlik ancak ve ancak $G \cong K_n$ olduğunda sağlanır [14].

Teorem 3.1.5. G, n noktalı iki parçalı bağlantılı bir graf ve P, R Randić matrisinin determinantının mutlak değeri olsun. Bu durumda;

$$2+\sqrt{(n-2)(n-3)P^{2/(n-2)}+2R_{-1}-2} \leq RE(G) \leq 2+\sqrt{(n-2)(2R_{-1}-2)}$$

dır. Her iki sınırdaki eşitlik ancak ve ancak G bir iki parçalı tam graf olduğunda sağlanır [14].

Lemma 3.1.6. G, izole nokta içermeyen n noktalı bir graf olsun. Bu durumda;

$$2R_{-1} \leq RE(G) \leq \sqrt{2nR_{-1}}$$

dir [16].

Teorem 3.1.6. G, Randić öz değerleri $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_n$ olan n noktalı bağlantılı bir graf olsun. Bu durumda;

$$\sqrt{2R_{-1}-1+2|1-R_{-1}|}+1 \leq RE(G) \leq \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-1)}+1$$

dir. Alt sınırdaki eşitlik ancak ve ancak G, çok parçalı tam graf olduğunda ve üst sınırdaki eşitlik ancak ve ancak $|\rho_2| = \cdots = |\rho_n|$ olduğunda sağlanır [16].

Lemma 3.1.7. G, n noktalı bağlantılı bir graf olsun. Bu durumda;

$$RE(G) \leq \rho_1+\sqrt{(n-1)(2R_{-1}-\rho_1{}^2)}$$

dir [22].

Lemma 3.1.8. G, n noktalı bağlantılı bir graf olsun. Bu durumda;

$$RE(G) \leq 1 + \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-1)}$$

dir. Eşitlik ancak ve ancak G tam graf veya

$$\left(1, \sqrt{\frac{2R_{-1}-1}{n-1}}, -\sqrt{\frac{2R_{-1}-1}{n-1}}\right)$$

üç farklı Randić öz değerlerine sahip iki parçalı olmayan bağlantılı bir graf olduğunda sağlanır [22].

Teorem 3.1.7. $G,\ n\ (n \geq 3)$ noktalı, m kenarlı ve Randić öz değerleri $1 = \rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_{n-1} \geq \rho_n = -1$ olan iki parçalı bağlantılı bir graf olsun. $\rho = \max_{2 \leq i \leq n-1}\{|\rho_i|\}$ alalım. Bu durumda her k reel sayısı için

$$\rho \geq k \geq \sqrt{\frac{2(\mathrm{R}_{-1}-1)}{n-2}}$$

dir ve

$$RE(G) \leq 2 + k + \sqrt{(n-3)(2R_{-1}-2-k^2)}$$

eşitsizliği sağlanır. Eşitlik G , iki parçalı tam graf olduğunda sağlanır bu durumda $k = 0$ dır [22]

Sonuç 3.1.1. $G,\ n\ (n \geq 3)$ noktalı, m kenarlı ve Randić öz değerleri $1 = \rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_{n-1} \geq \rho_n = -1$ olan iki parçalı bağlantılı bir graf olsun. $\rho = \max_{2 \leq i \leq n-1}\{|\rho_i|\}$ alalım. Bu durumda;

$$RE(G) \leq 2 + \rho + \sqrt{(n-3)(2R_{-1}-2-\rho^2)}$$

dir. Eşitlik eğer G iki parçalı tam bir graf ise sağlanır [22].

Sonuç 3.1.2. G, n $(n \geq 3)$ noktalı m kenarlı bağlantılı iki parçalı bir graf olsun. Bu durumda;

$$RE(G) \leq 2 + \sqrt{2(n-2)(R_{-1}-1)}$$

dir. Eşitlik ancak ve ancak G iki parçalı tam bir graf olduğunda sağlanır [22].

Tanım 3.1.2. D; d_i, i.köşegen elemanı olan n noktalı köşegen matris olsun. Bu durumda G nin ‘‘Laplasyan matrisi’’ $L = D - A$ olarak tanımlanır. G nin Laplasyan öz değerleri

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \cdots \geq \mu_{n-1} \geq \mu_n = 0$$

biçiminde sıralanır.

G, izole nokta içermeyen bir graf ve D köşegen matris olsun. Bu durumda R Randić matrisi

$$D^{-1/2}AD^{-1/2} = R$$

biçiminde de gösterilebilir.

Ayrıca L Laplasyan matris olmak üzere, $\tilde{L}$ normalleştirilmiş Laplasyan matrisi de

$$\tilde{L} = D^{-1/2}LD^{-1/2} = I - D^{-1/2}AD^{-1/2}$$

olarak tanımlanır. Burada I, n mertebeli birim matristir. Normalleştirilmiş Laplasyan öz değerleri $\widetilde{\mu_1}, \widetilde{\mu_2}, \ldots, \widetilde{\mu_n}$ dır [9].

Teorem 3.1.8. G, izole noktası olmayan bir graf olsun. Bu durumda;

$$\tilde{L} = I - R$$

dir. Normalleştirilmiş Laplasyan enerjisi

$$NLE = NLE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\tilde{\mu_i} - 1|$$

dir [9].

Teorem 3.1.9. G, n noktalı izole noktası olmayan bir graf olsun. Bu durumda

$$NLE(G) = RE(G)$$

dir [9].

İspat:

$i = 1,2,\ldots,n$ için $\tilde{L} = I - R$ eşitliğinden $\mu_{\tilde{i}} = 1 - \rho_i$ dır. Enerji tanımından

$$\begin{aligned} NLE(G) &= \sum_{i=1}^{n} |(1-\rho_i) - 1| \\ &= \sum_{i=1}^{n} |-\rho_i| \\ &= \sum_{i=1}^{n} |\rho_i| \\ &= RE(G) \end{aligned}$$

dir.

Teorem 3.1.10. Eğer G, r dereceli $(r > 0)$ regüler bir graf ise bu durumda ;

$$RE(G) = \frac{1}{r} E(G)$$

dir. Eğer $r = 0$ ise bu durumda $RE(G) = 0$ dır [9].

Lemma 3.1.9. G, izole nokta içermeyen n noktalı bir graf olsun. Bu durumda;

$$RE(G) \geq 2$$

dir. Eşitlik ancak ve ancak G, çok parçalı tam graf olduğunda sağlanır [21].

Önerme 3.1.1. P_n, n noktalı yol graf olsun. Bu durumda

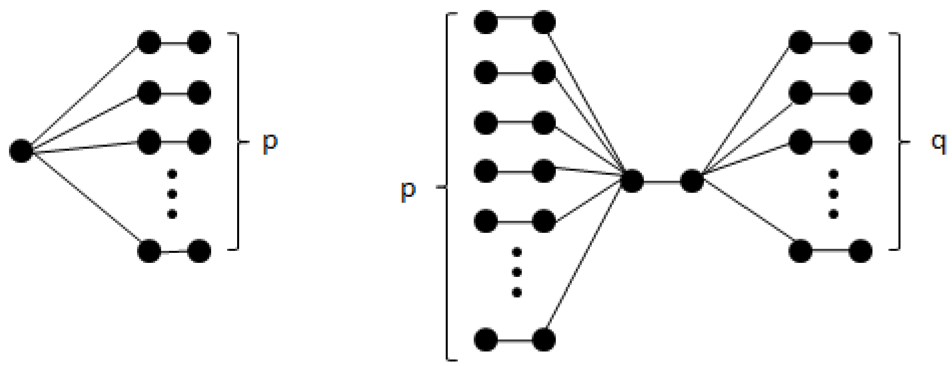
$$RE(P_n) = 2 + \frac{1}{2}\, E(P_{n-2})$$

dir [29].

Tanım 3.1.3. Her $p \geq 0$ için p-güneş (p-sun) $n = 2p + 1$ noktalı bir ağaçtır ve S^p ile gösterilir. Her $p, q \geq 0$ için (p,q)-çift güneş ((p,q)-double sun) S^p ve S^q nun merkezlerine bir kenar eklenerek elde edilen $n = 2(p + q + 1)$ noktalı bir ağaçtır ve $DS^{p,q}$ ile gösterilir. Genellikle burada $p \geq q$ dur ancak $p - q \leq 1$ olduğunda çift güneşe dengelidir denir (balanced double sun) [19].

Varsayım 3.1.1. Maksimal Randić enerjiye sahip n noktalı bağlantılı bir graf bir ağaçtır [29].

Varsayım 3.1.2. Eğer $n \geq 1$ tek ise bu durumda en büyük Randić enerjiye sahip n noktalı bağlantılı graf güneş graftır. Eğer $n \geq 2$ çift ise bu durumda en büyük Randić enerjiye sahip n noktalı bağlantılı graf dengeli çift güneş graftır. Eğer n tek ise, extramal Randić enerjiye sahip ağaç $\left(\frac{n-1}{2}\right)-$sun, n çift ise $\left(\left\lceil\frac{n-2}{4}\right\rceil, \left\lfloor\frac{n-2}{4}\right\rfloor\right)-$ double sun dır [29].



Şekil 3.1. S^p ve $DS^{p,q}$ Grafları

Güneş ve dengeli çift güneş grafların Randić enerjileri aşağıdaki gibi genelleştirilmiştir.

Varsayım 3.1.3. G, n noktalı bağlantılı bir graf olsun. Bu durumda;

$$RE(G) \leq \begin{cases} RE(S^p) \quad , & \text{eğer } n \text{ tek ise} \\ RE(DS^{p,p-1}) \, , & \text{eğer } n \text{ çift ise} \end{cases}$$

dır [19].

Varsayım 3.1.4. G, n noktalı bağlantılı bir graf olsun. Bu durumda $k \geq 3$ tek sayıları için

$$RE(G) \leq \begin{cases} RE(S^p) \ = E_{\mathcal{L}}(S^p), & \text{eğer } n = k \text{ ise} \\ RE(DS^{p,p}) = E_{\mathcal{L}}(D^{p,p-1}), & \text{eğer } n = 2k \text{ ise} \\ RE(DS^{p,p-1}) = E_{\mathcal{L}}(D^{p,p-1}), & \text{eğer } n = 2k+2 \text{ ise} \end{cases}$$

dır [19]. Burada $E_{\mathcal{L}}$, verilen grafın normalleştirilmiş Laplasyan enerjisidir.

Sonuç 3.1.3.

i) T, çift noktalı bir ağaç olsun $n \geq 2$ için bu durumda;

$$RE(T) \leq \sqrt{(n-2)\frac{5n-10}{9}} + 2$$

ii) T, tek noktalı bir ağaç olsun $n \geq 2$ için bu durumda;

$$RE(T) \leq \sqrt{(n-3)\frac{5n-10}{9}} + 2$$

iii) T, çift noktalı bir ağaç olsun $n \geq 103$ için bu durumda;

$$RE(T) \leq \sqrt{(n-2)\frac{15n-57}{28}} + 2$$

iv) T, tek noktalı bir ağaç olsun $n \geq 103$ için bu durumda;

$$RE(T) \leq \sqrt{(n-3)\frac{15n-57}{28}} + 2$$

dir [19].

Lemma 3.1.10. T, n noktalı bir ağaç olsun. Bu durumda

$$\sum_{v_i v_j \in E(T)} \frac{1}{d_i d_j} \leq \frac{5n+8}{18}$$

dır [12].

Teorem 3.1.11. T, n noktalı bir ağaç olsun. Bu durumda;

$$RE(T) \leq 2\sqrt{\left\lfloor\frac{n}{2}\right\rfloor \frac{5n+8}{18}}$$

dir [12].

İspat.

$$\sum_{i=1}^{n} {\rho_i}^2 = 2\sum_{v_i v_j \in E(G)} \frac{1}{d_i d_j}$$

ve Lemma 3.1.4 (iii) den

$$\sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} {\rho_i}^2 = \sum_{v_i v_j \in E(G)} \frac{1}{d_i d_j}$$

elde edilir. Lemma 3.1.10 dan

$$\sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} {\rho_i}^2 \leq \frac{5n+8}{18}$$

elde edilir. Tekrar Lemma 3.1.4 iii kullanılırsa

$$RE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i| = 2 \sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} |\rho_i|$$

yazılabilir. Cauchy-Schwarz eşitsizliğinden

$$RE(G) = 2\sqrt{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} {\rho_i}^2}$$

$$\leq 2\sqrt{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \frac{5n+8}{18}}$$

elde edilir.

Teorem 3.1.12. G, minimal nokta derecesi δ olan n noktalı basit bir graf olsun. Bu durumda;

$$RE(G) \leq 1 + \sqrt{\frac{(n-1)(n-\delta)}{\delta}}$$

dır [12].

İspat.

$$\sum_{i=1}^{n} {\rho_i}^2 = 2 \sum_{v_i v_j \in E(G)} \frac{1}{d_i d_j}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{d_i} \sum_{v_i v_j \in E(G)} \frac{1}{d_j}$$

$$\leq \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\delta} \sum_{v_i v_j \in E(G)} \frac{1}{d_j}$$

$$= \frac{n}{\delta}$$

dır. Lemma 3.1.4 (iii) den

$$RE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|$$

$$= 1 + \sum_{i=2}^{n} |\rho_i|$$

yazılabilir. Cauchy-Schwarz eşitsizliğinden

$$RE(G) \leq 1 + \sqrt{(n-1)\left(\sum_{i=1}^{n} {\rho_i}^2 - 1\right)}$$

$$\leq 1 + \sqrt{\frac{(n-1)(n-\delta)}{\delta}}$$

elde edilir.

Teorem 3.1.13. $n \geq 5$ için P_n nin Randić karakteristik polinomu;

$$RP(P_n, \lambda) = (\lambda^2 - 1)\left(\lambda \Lambda_{n-3} - \frac{1}{4}\Lambda_{n-4}\right)$$

dir. Burada her $k \geq 3$ için $\Lambda_k = \lambda\Lambda_{k-1} - \frac{1}{4}\Lambda_{k-2}$ ve $\Lambda_1 = \lambda$, $\Lambda_2 = \lambda^2 - \frac{1}{4}$ tür [26].

Teorem 3.1.14. $n \geq 3$ için C_n nin Randić karakteristik polinomu;

$$RP(C_n, \lambda) = \lambda\Lambda_{n-1} - \frac{1}{2}\Lambda_{n-2} - \left(\frac{1}{2}\right)^{n-1}$$

burada her $k \geq 3$ için $\Lambda_k = \lambda\Lambda_{k-1} - \frac{1}{4}\Lambda_{k-2}$ ve $\Lambda_1 = \lambda$, $\Lambda_2 = \lambda^2 - \frac{1}{4}$ tür [26].

Teorem 3.1.15. $n \geq 2$ için;

i) $S_n = K_{1,n-1}$ yıldız grafının Randić karakteristik polinomu;

$RP(S_n,\lambda) = \lambda^{n-2}(\lambda^2 - 1)$

İspat. Kolayca görülebilir ki $K_{1,n-1}$ Randić matrisi

$$R(K_{1,n-1}) = \frac{1}{\sqrt{n-1}}\begin{bmatrix} 0_{1x1} & J_{1x(n-1)} \\ J_{(n-1)x1} & 0_{(n-1)x(n-1)} \end{bmatrix}$$

dır.

$$\det(\lambda I - R(S_n)) = det\begin{bmatrix} \lambda & \frac{-1}{\sqrt{n-1}}J_{1x(n-1)} \\ \frac{-1}{\sqrt{n-1}}J_{(n-1)x1} & \lambda I_{n-1} \end{bmatrix}$$

$$= \lambda\, det\left(\lambda I_{n-1} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}J_{(n-1)x1}\frac{1}{\lambda}\frac{1}{\sqrt{n-1}}J_{1x(n-1)}\right).$$

$J_{(n-1)x1}J_{1x(n-1)} = J_{n-1}$ olduğundan

$$\det(\lambda I - R(S_n)) = \lambda\, det\left(\lambda I_{n-1} - \frac{1}{\lambda(n-1)}J_{n-1}\right) = \lambda^{2-n}\det\left(\lambda^2 I_{n-1} - \frac{1}{(n-1)}J_{n-1}\right)$$

dır. J_{n-1} nın öz değerleri $n-1$ (1 tane) ve 0 ($n-2$ tane) olduğundan $\frac{1}{n-1}J_n$ in öz değerleri 1 (1 tane) ve 0 ($n-2$ tane) dir. Dolayısıyla

$RP(S_n,\lambda) = \lambda^{n-2}(\lambda^2 - 1)$

elde edilir.

ve böylece S_n nin Randić enerjisi;

ii) $RE(S_n) = 2$

dir [26].

Teorem 3.1.16. $n \geq 2$ için:

i) K_n tam grafının Randić karakteristik polinomu;

$$RP(K_n, \lambda) = (\lambda - 1)\left(\lambda + \frac{1}{n-1}\right)^{n-1}$$

ve böylece K_n nin Randić enerjisi;

ii) $RE(K_n) = 2$

dir [26].

Teorem 3.1.17. $m, n \neq 1$ doğal sayıları için:

i) $K_{m,n}$ iki parçalı tam grafın Randić karakteristik polinomu;

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

ve böylece $K_{m,n}$ nin Randić enerjisi;

ii) $RE(K_{m,n}) = 2$

dir [26].

Teorem 3.1.18. $n \geq 2$ için:

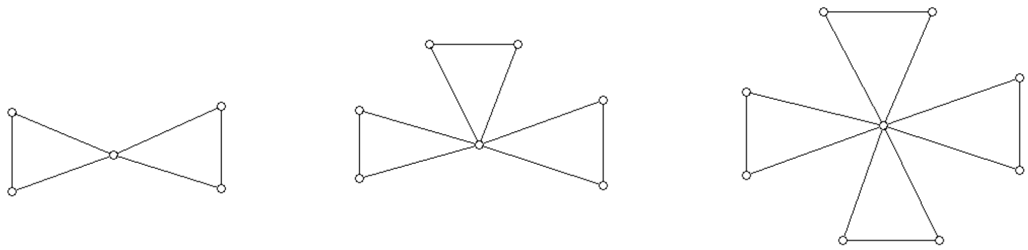
i) F_n dostluk (friendship) grafının Randić karakteristik polinomu;

$$RP(F_n, \lambda) = \left(\lambda^2 - \frac{1}{4}\right)^{n-1} (\lambda - 1)\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)^2$$

ve böylece F_n nin Randić enerjisi;

ii) $RE(F_n) = n + 1$

dir [26].



Şekil 3.2. F_2, F_3, F_4 Friendship Grafları

Teorem 3.1.19. $n \geq 2$ için:

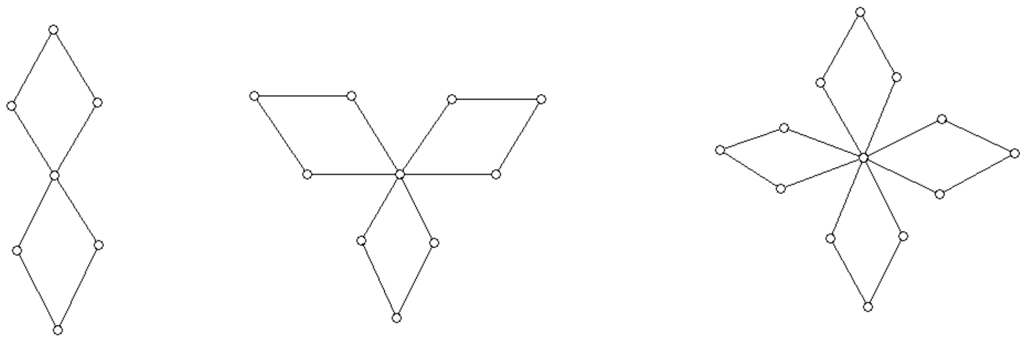
i) D_4^n Dutch Windmill grafının Randić karakteristik polinomu;

$$RP(\,D_4^n, \lambda) = \lambda^{n+1}\left(\lambda^2 - \frac{1}{2}\right)^{n-1}(\lambda^2 - 1)$$

ve böylece D_4^n nin Randić enerjisi;

ii) $RE(D_4^n) = 2 + (n-1)\sqrt{2}$

dir [26].



Şekil. 3.3. ${D_4}^2, {D_4}^3, {D_4}^4$ Dutch Windmill Grafları

Lemma 3.1.11. $G = G_1 \cup G_2 \cup \dots \cup G_m$ olsun. Bu durumda;

$$RE(G) = RE(G_1) + RE(G_2) + \cdots + RE(G_m)$$

dir [26].

Lemma 3.1.12.

i) Eğer $e \in E(P_n)$ ise bu durumda,

$RE(P_n - e) = RE(P_r) + RE(P_s)$

dir. Burada $r + s = n$ dir.

ii) Eğer $e \in E(C_n), (n \geq 3)$ ise bu durumda

$RE(C_n - e) = RE(P_n)$

dir.

iii) S_n, $e \in E(S_n)$ ve n noktalı bir yıldız graf olsun. Bu durumda $n \geq 3$ için,

$RE(S_n - e) = RE(S_{n-1}) = 2$

dir [26].

Teorem 3.1.20. $n \geq 2$ için:

i) e, K_n tam grafın bir kenarı olsun. $K_n - e$ nin Randić karakteristik polinomu;

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

ve böylece $K_n - e$ nin Randić enerjisi;

ii) $RE(K_n - e) = 2$

dir [26].

Teorem 3.1.21. $m, n \neq 1$ için:

i) $K_{m,n} - e$ iki parçalı tam grafının Randić karakteristik polinomu;

$$RP(K_{m,n} - e, \lambda) = \lambda^{m+n-4}(\lambda^2 - 1)\left(\lambda^2 - \frac{1}{mn}\right)$$

ve böylece $K_{m,n} - e$ nin Randić enerjisi;

ii) $RE(K_{m,n} - e) = 2 + \frac{2}{\sqrt{mn}}$

dir [26].

BÖLÜM 4

AYNI RANDIĆ ENERJİYE SAHİP GRAFLAR

Bu bölümde Oscar Rojo ve Luis Medina nın [27] de yaptıkları graf işleminden farklı bir graf işlemi tanımlayarak oluşturduğumuz yeni grafların Randić enerjilerinin değişip değişmediğini araştıracağız. Buradan da hareketle yol grafın karma genişlemesi işlemi adı altında oluşturulan yeni grafların Randić enerjilerinin değişimini inceleyeceğiz.

Tanım 4.1.1. $G_1^r, V_1 = \{1,2,\dots,n_1\}$ noktaları ile tanımlanan G nin r -kopyasından elde edilen bir graf ve $G_2^r, V_2 = \{1,2,\dots,n_2\}$ noktaları ile tanımlanan G nin r- kopyasından elde edilen bir graf olsun [27].

Teorem 4.1.1. G iki parçalı bir graf olsun. Bu durumda;

$$RE(G_1^r) = RE(G_2^r) = RE(G) \tag{3.1}$$

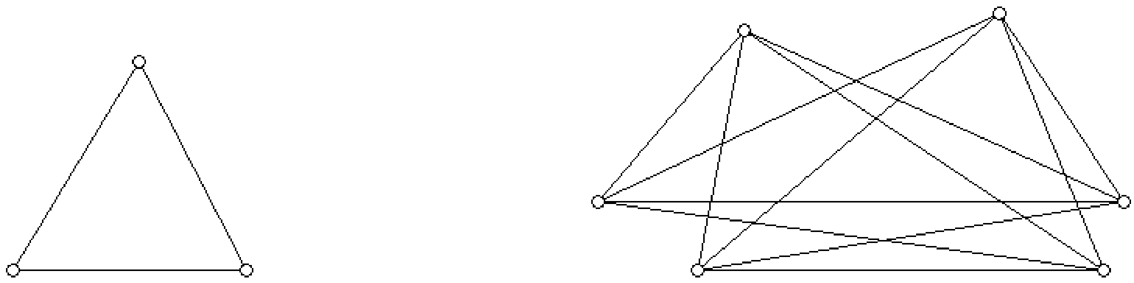
dir [27].

Aşağıda verilen sonuçlar [46] da yayınlanmıştır.

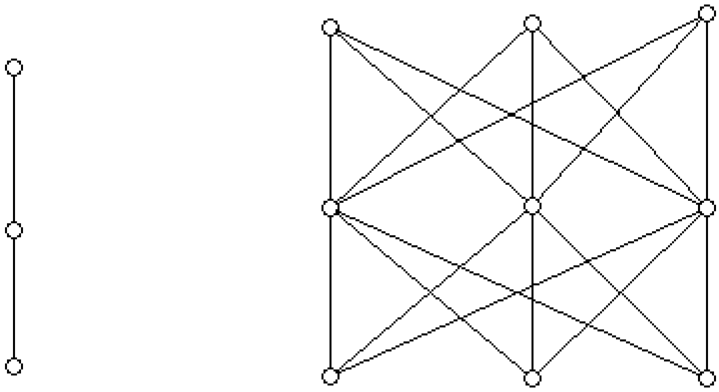
Şimdi yeni bir graf işlemi tanımlayalım.

Tanım 4.1.2. G herhangi bir graf olsun. $G_{\sim}^{rc}$ grafı G nin r- kopyasından elde edilmiştir öyle ki G deki her bir noktanın komşuluğu $G_{\sim}^{rc}$ de aynı komşuluk olmak zorundadır.

Not 4.1.1. Açıktır ki G ve $G_{\sim}^{rc}$, graflardaki ortak komşuluk nedeniyle aynı yapısal özelliklere sahiptir. Örneğin G iki parçalı ise bu durumda $G_{\sim}^{rc}$ de iki parçalıdır.



Şekil 4.1. K_3 ve 2-kopyası



Şekil 4.2. P_3 ve 3-kopyası

Teorem 4.1.2. n noktalı G grafının r -kopyası $\underset{\sim}{G}^{rc}$ olsun. Bu durumda,

$$RE(G) = RE(\, \underset{\sim}{G}^{rc}) \tag{3.2}$$

dır.

İspat.

$$R(\underset{\sim}{G}^{rc}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{r}R(G) & \cdots & \frac{1}{r}R(G) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{r}R(G) & \cdots & \frac{1}{r}R(G) \end{pmatrix}_{\mathrm{rnxrn}}$$

$$= \frac{1}{r}\begin{pmatrix} R(G) & \cdots & R(G) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ R(G) & \cdots & R(G) \end{pmatrix}_{rnxrn}$$

$$= \frac{1}{r}(R(G)_{nxn} \otimes J_{rxr})$$

$Spektrum\ (J) = \{r^{(1)}, 0^{(r-1)}\}$ olduğundan ve matrislerdeki Kronecker çarpım özelliğinden

$$Spektrum\{G_{\sim}^{rc}\} = Spektrum\{R(G)\} \cup \{0^{(r-1)}\}$$

elde edilir. Böylece

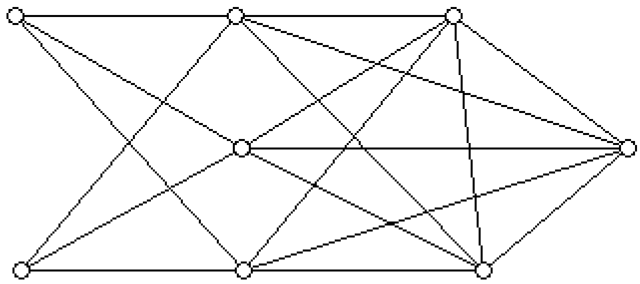
$$RE(G_{\sim}^{rc}) = RE(G)$$

dir.

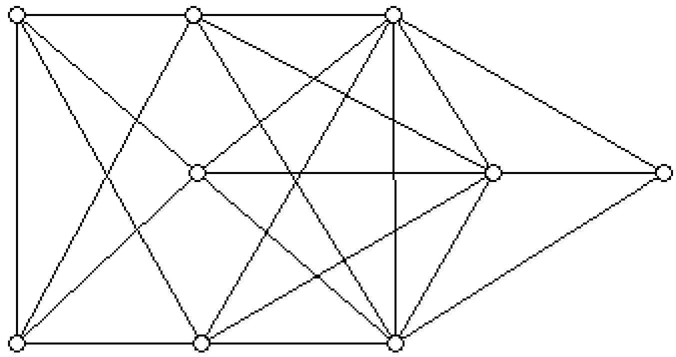
Not 4.1.2. Teorem 4.1.1 deki sonuç iki parçalı graflar için doğrudur, buna karşılık Teorem 4.1.2 herhangi bir graf için geçerlidir.

Tanım 4.1.3. Bir G grafının bir karma genişlemesi (mixed extension) G deki her bir nokta yerine klik veya ko-klik alınarak G den elde edilen bir H grafıdır öyle ki H da iki nokta, G nin farklı x ve y noktalarına karşılık gelirken x ve y, G de komşu olduğunda komşudur [38].

P_n, $\{1,2,\dots,n\}$ nokta kümesine sahip bir yol graf olsun. Her bir $i \in \{1,2,\dots,n\}$ için V_i ko-klik veya klik düşüneceğiz öyle ki $|V_i| = k_i$ dir. Eğer V_i, her i için ko-klik ise bu durumda P_n nin karma genişlemesi $(k_1, k_2, .., k_n)$ tipinde gösterilecek. Eğer V_i en azından bir klik ise (örneğin V_k bir klik olsun) P_n nin karma genişlemesi $(k_1, .., k_{k-1}, K_k, k_{k+1}, \dots, k_n)$ tipinde gösterilir.



Şekil 4.3. P_3 ün $(2,3,K_3)$ tipinde karma genişlemesi



Şekil 4.4. P_4 ün $(K_2,3,K_3,1)$ tipinde karma genişlemesi

Şekil 4.3 de $(2,3,K_3)$ tipinde P_3 ün her noktasının yerine sırasıyla 2 ve 3 ko-klik, 3 klik alınacağı anlaşılır. Benzer olarak Şekil 4.4 de belirtilen tip için P_4 ün her noktasının yerine sırasıyla 2 klik, 3 ko-klik, 3 klik ve 1 ko-klik alınacaktır.

Teorem 4.1.3. G bir graf ve $\mu_1^{\sim} \geq \cdots \geq \mu_n^{\sim}$ $\mathcal{L}(G)$' nin özdeğerleri olsun. G iki parçalıdır ancak ve ancak her $\mu_i^{\sim}$ için, $2 - \mu_i^{\sim} = \mu_j^{\sim}$ öyle ki en az bir j için [39].

Lemma 4.1.1. G, n noktalı iki parçalı bir graf olsun. Bu durumda,

$p_i = -p_{n-i+1},\ i = 1,2,\dots,\left\lceil\frac{n}{2}\right\rceil$ dir.

Not 4.1.3. Teorem 4.1.3 ve $\mu_i^{\sim} = 1 - p_i$ denkleminden Lemma 4.1.1 deki önermenin tersinin de doğru olduğu kolaylıkla görülür.

Teorem 4.1.4. Herhangi bir tipe ait P_n nin karma genişlemesi H olsun. H ve P_n graflarının sıfırdan farklı Randić öz değerleri aynıdır ancak ve ancak her k, ℓ için genişleme $(k, k, \dots, k)$ ve $(k, \ell, k, \ell, \dots, k, \ell)$ tipinde olmalıdır.

İspat. Her tipe ait P_n nin karma genişlemesi H olsun. H ve P_n graflarının sıfırdan farklı öz değerlerinin aynı olduğunu düşünelim. Öyleyse Not 4.1.3 den H'nin iki parçalı graf olmak zorunda olduğunu söyleyebiliriz. Böylece genişleme hiçbir klik içermeyebilir ve böylece $(k_1, k_2, \dots, k_n)$ tipinde olmalıdır. $R(H)$ Randić blok matrisinin elemanları

$$r_{ij}' = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{(k_i+k_{j-1})(k_j+k_{i+1})}} J & , \text{ eğer } i-j=1 \text{ ise} \\ \frac{1}{\sqrt{(k_j+k_{i-1})(k_i+k_{j+1})}} J & , \text{ eğer } i-j=-1 \text{ ise} \\ 0 & , \text{ diğer durumlarda} \end{cases} \tag{3.3}$$

biçimindedir. Burada J bütün elemanları 1 olan matristir ve $k_0 = k_{n+1} = 0$ dır. Kolaylıkla görülebilir ki bu matris üst üçgensel blok matristir ve $k_1, \dots, k_n$ özdeş satırlarına sahiptir. H'nin spektrumu $\sum_{i=1}^{n} k_i$ cebirsel katlı 0 öz değeri içerir. $R(H)$ ın verilen parçalaması $Q = (q_{ij})$ bölüm matrisi ile eşittir ve

$$q_{ij} = \begin{cases} \frac{k_j}{\sqrt{(k_j+k_{i-1})(k_i+k_{j+1})}} , & \text{eğer } i-j=-1 \text{ ise} \\ \frac{k_j}{\sqrt{(k_i+k_{j-1})(k_j+k_{i+1})}} , & \text{eğer } i-j=1 \text{ ise} \\ 0 , & \text{diğer durumlarda} \end{cases} \tag{3.4}$$

biçimindedir.

Bu durumda Q nun karakteristik matrisinin determinantı

$\phi_n(Q, x) = det(xI_n - Q) =$

$$\begin{vmatrix} x & \frac{k_2}{\sqrt{(k_1+k_3)k_1}} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{-k_1}{\sqrt{(k_1+k_3)k_1}} & x & \frac{-k_3}{\sqrt{(k_1+k_3)(k_2+k_4)}} & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-k_2}{\sqrt{(k_1+k_3)(k_2+k_4)}} & x & \ddots & \ddots & \frac{k_{n-1}}{\sqrt{(k_{n-1}+k_{n-3})(k_n+k_{n-2})}} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & x & \frac{-k_n}{\sqrt{k_{n-1}(k_n+k_{n-2})}} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \frac{-k_{n+1}}{\sqrt{k_{n-1}(k_n+k_{n-2})}} & x \end{vmatrix}$$

dır.

Bu determinant ilk satıra göre açılırsa

$$\phi_1 = x \; ve \;\; \phi_2 = x^2 - \frac{k_3}{k_3 + k_1}$$

olmak üzere aşağıdaki eşitlik elde edilir.

$$\phi_n = x\phi_{n-1} - \frac{k_n}{k_n+k_{n-2}}\phi_{n-2} \tag{3.5}$$

(3.5) fark denkleminin A Jakobiyen matrisi,

$$A = \begin{pmatrix} x & \frac{-k_n}{k_n+k_{n-2}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

şeklindedir.

$det\,(A - rI) = 0$ dan karakteristik denklem;

$$\begin{vmatrix} x - r & \frac{-k_n}{k_n + k_{n-2}} \\ 1 & -r \end{vmatrix} = 0$$

ve böylece $(x - r)(-r) + \frac{k_n}{k_n+k_{n-2}} = 0$ olduğundan

$$r^2 - xr + \frac{k_n}{k_n + k_{n-2}} = 0 \tag{3.6}$$

elde edilir.

(3.6) denkleminin kökleri

$$r_{1,2} = \frac{x \pm \sqrt{x^2 - \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}}}{2}$$

dır.

Böylece (3.5) fark denkleminin genel çözümü;

$$\phi_n = c_1 {r_1}^n + c_2 {r_2}^n \tag{3.7}$$

dir.

$$\phi_1 = x \; ve \;\; \phi_2 = x^2 - \frac{k_3}{k_3 + k_1}$$

başlangıç koşullarından;

$$c_1 \left(\frac{x + \sqrt{x^2 - \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}}}{2} \right) + c_2 \left(\frac{x - \sqrt{x^2 - \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}}}{2} \right) = x$$

$$c_1 \left(\frac{x + \sqrt{x^2 - \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}}}{2} \right)^2 + c_2 \left(\frac{x - \sqrt{x^2 - \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}}}{2} \right)^2 = x^2 - \frac{k_3}{k_3 + k_1}$$

olur ki buradan da

$$s_n = \frac{k_3(k_n + k_{n-2})}{2k_n(k_1 + k_3)}, \qquad z_n = \frac{2k_1k_n + k_3k_n - k_3k_{n-2}}{2k_n(k_1 + k_3)} \;\; ve \;\; v_n = \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}$$

olmak üzere

$$c_1 = s_n + \frac{z_n x}{\sqrt{x^2 - v_n}}$$

ve

$$c_2 = s_n - \frac{z_n x}{\sqrt{x^2 - v_n}}$$

elde edilir.

$x = \sqrt{v_n} cos\theta$ ve denklem (3.7) den genel çözüm;

$$\phi_n = \left(S_n + \frac{Z_n x}{\sqrt{x^2 - v_n}}\right)\left(\frac{x + \sqrt{x^2 - \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}}}{2}\right)^n$$

$$+\left(S_n - \frac{Z_n x}{\sqrt{x^2 - v_n}}\right)\left(\frac{x - \sqrt{x^2 - \frac{4k_n}{k_n + k_{n-2}}}}{2}\right)^n$$

$$= \left(S_n + \frac{Z_n x}{\sqrt{x^2 - v_n}}\right)\left(\frac{x + \sqrt{x^2 - v_n}}{2}\right)^n + \left(S_n - \frac{Z_n x}{\sqrt{x^2 - v_n}}\right)\left(\frac{x - \sqrt{x^2 - v_n}}{2}\right)^n$$

$$= \left(S_n + \frac{Z_n\sqrt{v_n}\cos\theta}{\sqrt{v_n\cos^2\theta - v_n}}\right)\left(\frac{\sqrt{v_n}\cos\theta + \sqrt{v_n\cos^2\theta - v_n}}{2}\right)^n$$

$$+\left(S_n - \frac{Z_n\sqrt{v_n}\cos\theta}{\sqrt{v_n\cos^2\theta - v_n}}\right)\left(\frac{\sqrt{v_n}\cos\theta - \sqrt{v_n\cos^2\theta - v_n}}{2}\right)^n$$

$$= \left(S_n + \frac{Z_n\sqrt{v_n}\cos\theta}{i\sqrt{v_n}\sin\theta}\right)\left(\frac{\sqrt{v_n}\cos\theta + i\sqrt{v_n}\sin\theta}{2}\right)^n$$

$$+\left(S_n - \frac{Z_n\sqrt{v_n}\cos\theta}{i\sqrt{v_n}\sin\theta}\right)\left(\frac{\sqrt{v_n}\cos\theta - i\sqrt{v_n}\sin\theta}{2}\right)^n$$

$$= \left(S_n + Z_n\frac{\cos\theta}{i\sin\theta}\right)\left(\frac{\sqrt{v_n}(\cos\theta + i\sin\theta)}{2}\right)^n$$

$$+\left(S_n - Z_n \frac{\cos\theta}{i\sin\theta}\right)\left(\frac{\sqrt{v_n}(\cos\theta - i\sin\theta)}{2}\right)^n$$

ve böylece

$$\phi_n = \left(\sqrt{v_n}e^{i\theta}\right)^n\left(S_n + Z_n\frac{e^{i\theta}+e^{-i\theta}}{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}\right) + \left(\sqrt{v_n}e^{-i\theta}\right)^n\left(S_n - Z_n\frac{e^{i\theta}+e^{-i\theta}}{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}\right)$$

olarak elde edilir.

$e^{i\theta} = u^{\frac{1}{2}}$ dönüşümü kullanılarak (3.7) den

$$\phi_n\left(\sqrt{v_n}\left(u^{\frac{1}{2}} + u^{\frac{-1}{2}}\right)\right)$$

$$= \frac{\sqrt{v_n}\left(u^{\frac{1}{2}} - u^{\frac{-1}{2}}\right)u^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}\sqrt{v_n}\right)^{n-1}[u^{\frac{n}{2}} - u^{\frac{-n}{2}} + y_{n-1}(u^{\frac{n-2}{2}} - u^{\frac{2-n}{2}})]}{u-1}$$

$$-\frac{\sqrt{v_n(\frac{1}{2}\sqrt{v_n})^{n-2}}u^{\frac{1}{2}}[u^{\frac{n-1}{2}} - u^{\frac{1-n}{2}} + y_{n-2}(u^{\frac{n-3}{2}} - u^{\frac{3-n}{2}})]}{u-1} \quad (3.8)$$

elde edilir.

(3.4) deki bölüm matrisi P_n Randić matrisinin genelleştirmesi olduğundan P_n nin karakteristik polinomu

$$\phi_n\left(\sqrt{2}\left(u^{\frac{1}{2}} + u^{\frac{-1}{2}}\right)\right)$$

$$= \frac{\sqrt{2}\left(u^{\frac{1}{2}} + u^{\frac{-1}{2}}\right)u^{1/2}\left(\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)^{n-1}[u^{\frac{n}{2}} - u^{\frac{-n}{2}}]}{u-1}$$

$$-\frac{\sqrt{2}\left(\frac{1}{2}\sqrt{2}\right)^{n-2}u^{\frac{1}{2}}[u^{\frac{n-1}{2}} - u^{\frac{1-n}{2}}]}{u-1} \quad (3.9)$$

olur öyle ki her i için $k_i = 1$ dir.

Karakteristik polinomlarının aynı sıfırdan farklı bölümlere sahip oldukları için (3.8) ve (3.9) da polinomların katsayıları aynı olmak zorundadır.

Yukarıdaki eşitliklerden bütün n ler için

$$k_n = k_{n-2} \tag{3.10}$$

ve

$$\frac{k_3}{k_1} = \frac{k_{n-1}}{k_{n-3}} \tag{3.11}$$

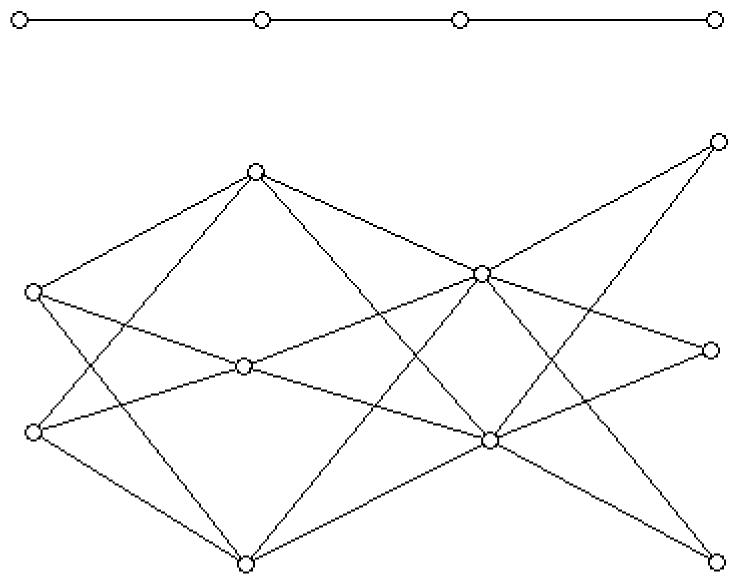
dir. Böylece (3.10) ve (3.11) eşitliklerini sağlayan karma genişleme türleri her k, ℓ için $(k, k, \dots, k)$ ve $(k, \ell, k, \ell, \dots, k, \ell)$ olmalıdır.

Tersine olarak açıkça görülür ki $(k, k, \dots, k)$ ve $(k, \ell, \dots, k, \ell)$ tiplerine ait P_n ve H ın karakteristik matrislerinden dolayı sıfırdan farklı öz değerleri aynıdır.

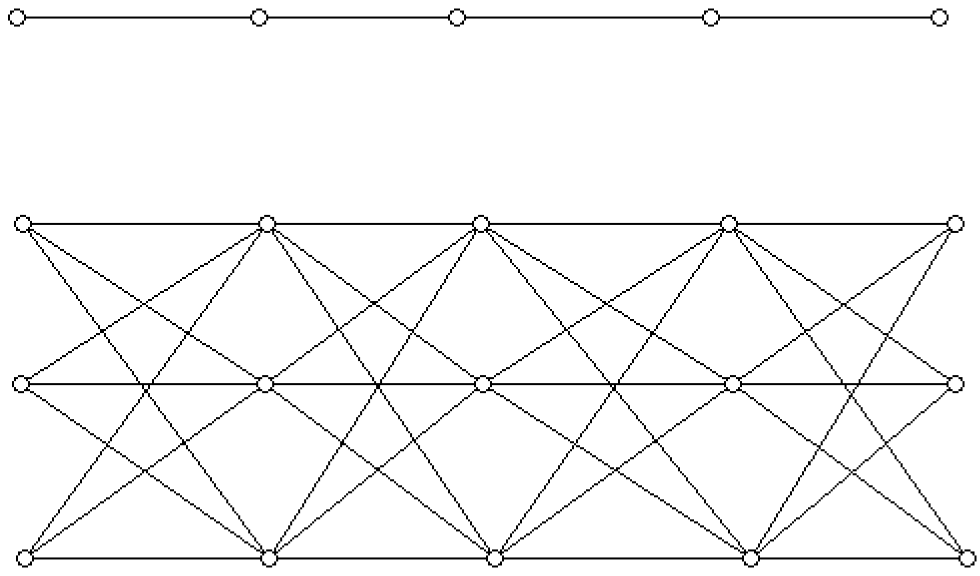
Sonuç 4.1.1. Her k, ℓ için $(k, k, \dots, k)$ ve $(k, \ell, k, \ell, \dots, k, \ell)$ tiplerine ait P_n nin karma genişlemesi H olsun. Bu durumda;

$$RE(H) = RE(P_n)$$

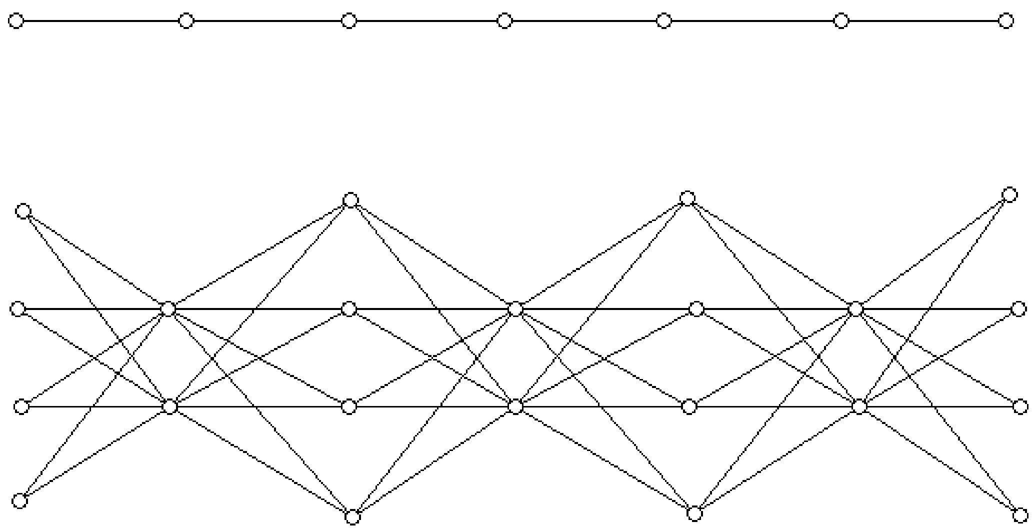
dir.



Şekil 4.5. P_4 ve $(2,3,2,3)$ tipinde karma genişlemesi



Şekil 4.6. P_5 ve $(3,3,3,3,3)$ tipinde karma genişlemesi



Şekil 4.7. P_7 ve $(4,2,4,2,4,2,4)$ tipinde karma genişlemesi

BÖLÜM 5

SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında matematik, fizik, kimya, mühendislik gibi pek çok alanda kullanılan grafların Randić enerjisi kısmı ile ilgili çalışma yapılmıştır. Moleküler yapı tanımlayıcısı olarak belirtilen Randić indeksinden yola çıkılarak oluşturulan Randić matrisinin enerjisinin; yani genel olarak grafların Randić enerjisi konu edinmiştir.

Graf denilen bir modelin üzerinde yapılan graftan kenar silme, grafa kenar ekleme gibi bir takım graf işlemleri sonucunda grafların Randić enerjilerinin arttığını veya azaldığını gözlemlemek için yola çıkılan bu çalışmada bir grafın kopyası ile elde edilen yeni graf ile grafın kendisi arasında bir ilişki olduğu gözlemlenmiştir. Bu ilişki, oluşturulan yeni grafla grafın kendisinin Randić enerjilerinin aynı olmasının yanı sıra grafların yapısal özelliklerinin de korunduğu görülmüştür. Buradan hareketle, yol grafın karma genişlemesi adı verilen graf işlemi ile bahsedilen özelliklerin korunduğu gösterilmiştir.

Bu fikrin pek çok graf işleminde modellenmesi ve sadece Randić enerjilerinin aynı kalması hususunda değil grafların birçok özelliğini de taşıyan yeni sistemler elde edilmesi öngörülmektedir.

KAYNAKLAR

1. Doğanaksoy, A., "Matematik Dünyası'', Graf Teorisi I, 10-16, 1993-I. http://www.matematikdunyasi.org/arsiv/PDF_eskisayilar/1993_1_10_16_GRAF.pdf.
2. Ocansey, E. D., "The Matrix Tree Theorem" https://www.researchgate.net/publ./275637597_The_Matrix_Tree_Theorem.
3. Kaveh, A., "Optimal Analysis of Structures by Concepts of Symmetry and Regularity'', Springer-Verlag Wien, 2013.
4. Cavers, M. S., "The Normalized Laplacian Matrix and Gneral Randić Index of Graphs'', *University of Regina, Ph.d Thesis*, 2010.
5. Aldous, J. M., Wilson, R. J., "Graphs and Applications'', Springer, 2004.
6. Samanta, P., "Introduction to Graph Theory'', https://www.researchgate.net/publication/317895972_Introduction_to_Graph_Theory.
7. Stanić, Z., "Inequalities for Graph Eigenvalues'', Cambridge, 2015.
8. Li, X., Shi,Y., Gutman, I., "Graph Energy'', Springer, 2012.
9. Bozkurt, Ş. B., Güngör, A. D., Gutman, I., Çevik, A. S., "Randić Matrix and Randić Energy'', MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 64 ,239-250, 2010.
10. Bozkurt, Ş. B., Güngör, A. D., Gutman, I., "Randić Spectral Radius and Randić Energy'', MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 64, 321-334, 2010.
11. Bozkurt, Ş. B., Bozkurt, D., "Randić Energy and Randić Estrada Index of a Graph'', Eur. J. Appl. Math., 1, 88-96, 2012.
12. Das, K. C., Sorgun, S., "On Randić Energy of Graphs'', MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 72, 227-238, 2014.
13. Gu, R., Huang, F., Li, X., "General Randić Matrix and General Randić Energy'', Transactions on Combinatorics, 3, 21-33, 2014.
14. Maden, A. D., "New Bounds on the Incidence Energy, Randić Energy and Randić Estrada Index'', MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 74, 367-387, 2015.
15. Gutman, I., Robbiano, M., Martin, B. S., "Upper bound on Randić energy of some graphs'', Linear Algebra Appl., 478, 241-255, 2015.

16. Li, J., Guo, J-M., Shiu, W. C., “A Note on Randić Energy’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 74, 389-398, 2015.
17. Das, K. C., Sorgun, S., Gutman, I., “On Randić Energy’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 73, 81-92, 2015.
18. Das, K. C., Sorgun, S., Xu, K., “On Randić Energy of Graphs’’, Kragujevac J. Math., 111-122, 2016.
19. Allem, L. E., Molina, G., Pastine, A., “Short note on Randić energy’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 82, 515-528, 2019.
20. Maden, A. D., “New Bounds on the Normalized Laplacian (Randić) Energy’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 79, 321-330, 2018.
21. Bozkurt, Ş. B. , Bozkurt, D., “Sharp Upper Bounds for Energy and Randić Energy’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 70, 669-680, 2013.
22. Glogić, E., Zogić, E., Glišović, N., “Remarks on the upper bound for the Randić energy of bipartite graphs’’, Discrete Appl. Math., 221, 67-70, 2017.
23. Das, K. C., Sun, S., “Extremal Graphs for Randić Energy’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 77, 77-84, 2017.
24. Li, X., Wang, J., “Randić Energy and Randić Eigenvalues’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 73, 73-80, 2015.
25. Alikhani, S., Ghanbari, N., “More on Energy and Randić Energy of Specific Graphs’’, J. Math. Ext., 3, 73-85, 2015..
26. Alikhani, S., Ghanbari, N., “Randić energy of specific graphs’’, App. Math. Comput. 269, 722-730, 2015.
27. Rojo, O., Medina, L., “Construction of Bipartite Graphs Having the Same Randić Energy’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 68, 805-814, 2012.
28. Furtula, B., Gutman, I., “Comparing Energy and Randić Energy’’, Maced. J. Chem. Chem. Eng, 32, 117-123, 2013.
29. Gutman, I., Furtula, B., Bozkurt, Ş. B, “On Randić energy’’, Linear Algebra Appl., 442, 50-57, 2014.
30. Das, K. C., Sun, S., Gutman, I., “Normalized Laplacian Eigenvalues and Randić Energy of Graphs’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 77, 45-59, 2017.
31. Balakrishnan, R., Ranganathan, K., “A Textbook of Graph Theory’’, Springer, 2012.
32. Clark, J., Holton, D. A., “Graph Theory’’, Allied Publishers Ltd. 1991.

33. Ersoy, F., “Grafların Komşuluk Matrisleri’’, *Uludağ Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi*, Bursa, 2013.

34. Lipschutz, S., “Lineer Algebra’’, Çeviri Editörü *Prof. Dr. Hacı Hilmi Hacısalihoğlu*, Nobel Yayın Dağıtım, 1991.

35. Das, K. C., Gutman, I., Furtula, B., “On spectral radius and energy of extended adjacency matrix of graphs’’, App. Math. Comput., 296, 116-123, 2017.

36. Araujo, O., Peňa, J. A. de la, “The connectivity index of a weighted graph’’, Linear Algebra Appl., 283, 171-177, 1998.

37. Randić, M., “On History of the Randić Index and Emerging Hostility toward Chemical Graph Theory’’, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 59, 5-124, 2008.

38. Haemers, W. H., “Spectral characterization of mixed extensions of small graphs’’, Discr. Math., 342, 2760-2764, 2019.

39. Cvetkovic, D., Rowlinson, P., Simic, S., “An Introduction to the Theory of Graph Spectra’’, Cambridge Univ. Press., Cambridge, 2009.

40. Topcu, H., “ Grafların İzomorfizmi ve Ko-Spektral Graflar’’, *Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi*, Nevşehir, 2016.

41. Ma, Y., Cao, S., Shi, Y., Gutman, I., Dehmer, M., Furtula, B., “ From the Connectivity Index to Various Randić -Type Descriptors’’ MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 80, 85-106, 2018.

42. Cavers, M., Fallat, S. Kirkland, S., “ On the normalized Laplacian energy and general Randić i ndex R_{-1} of graphs’’, Linear Algebra Appl., 433, 172-190, 2010.

43. Clarck, L., H., Moon, J. W., “ On the general Randić index for certain families of trees’’, Ars Combin., 54, 223-235, 2000.

44. Hu, Y., Li, X., Yuan, Y., “ Solutions to two unsolved questions on the best upper bound for the Randić index R_{-1} of trees’’ MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 54, 441-454, 2005.

45. Pavlovic, Lj., Stojanvoic, M., Li, X., “ More on Solutions to two unsolved questions on the best upper bound for the Randić index R_{-1} of trees’’ MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 58, 117-192, 2007.

46. Sorgun, S., Küçük, H., Kartal, N., " Some Results on Constructing of Graphs Which Have the Same Randić Energy'' MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 81, 443-452, 2019.

ÖZGEÇMİŞ

Neriman KARTAL 1983 yılında Adana'da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Adana'da tamamladı. 2003'de kazandığı Erciyes Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümünden 2007 yılında mezun oldu. Aynı yıl Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Ana Bilim Dalında Yüksek Lisansa başladı. 2009 yılında yüksek lisansını tamamlayıp 2013 yılında Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünde doktora yapmaya hak kazandı. 2010 yılında Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Ürgüp Sebahat ve Erol Toksöz Meslek Yüksekokulunda öğretim görevlisi olarak göreve başladı. Halen Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Eğitim Fakültesi Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi bölümünde öğretim görevlisi olarak görevine devam etmektedir. Evli olup 1 çocuk annesidir.

Adres : Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Eğitim Fakültesi
38039 - Nevşehir
Telefon : 0 384 228 10 00 - 21096
Belgegeçer : 0 384 228 10 40
e-posta : nerimangok@nevsehir.edu.tr