بسم الله الرحمن الرحیم

دانشکده علوم ریاضی

رشته ریاضی کاربردی، گرایش گراف و ترکیبیات

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

کران‌هایی برای انرژی مجموع درجات در گراف‌ها

نگارنده: الهه میرزایی

استادان راهنما

دکتر نادر جعفری راد
دکتر عبدالّله آل‌هوز

استاد مشاور

دکتر مهدی‌رضا خورسندی

شهریورماه ۱۳۹۷

تقدیم به پدرم

کوهی استوار و حامی من در طول تمام زندگی

تقدیم به مادرم

سنگ صبوری که الفبای زندگی به من آموخت

تقدیم به همسرم

که در سایه همدلی او به این منظر نائل شدم

تقدیم به فرزندانم

امیدبخشان جانم که آسایش آنها آرامش من است

سپاس‌گزاری...

سپاس خداوندگار حکیم را که با لطف بی کران خود، آدمی رابه زیور عقل آراست.

در آغاز وظیفه خود می دانم که از زحمات بی دریغ اساتید راهنمای خود، آقای دکتر نادر جعفری راد و آقای دکتر عبدالله آل هوز صمیمانه تشکر و قدردانی کنم که بدون راهنمایی‌های ارزنده این بزرگواران این مجموعه به انجام نمی‌رسید.

از جناب آقای دکتر مهدی رضا خورسندی که زحمت مشاوره این رساله را تقبل فرمودند و اینجانب را مورد راهنمایی قرار دادند، کمال امتنان دارم.

الهه میرزایی

شهریورماه ۱۳۹۷

تعهد نامه

اینجانب **الهه میرزایی** دانشجوی کارشناسی ارشد رشته **ریاضی کاربردی** **علوم ریاضی** دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان‌نامه با عنوان **کران‌هایی برای انرژی مجموع درجات در گراف‌ها** ، تحت راهنمایی دکتر **نادر جعفری راد** و دکتر **عبداللّه آل‌هوز** متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان‌نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های دیگر پژوهش‌گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایان‌نامه، تا کنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچجا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه صنعتی شاهرود تعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام ‘‘ دانشگاه صنعتی شاهرود ’’ یا “ Shahrood University of Technology “ به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به‌دست آوردن نتایج اصلی پایان‌نامه تاثیرگذار بوده‌اند، در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت می‌گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آنها) استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده شده است)، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

الهه میرزایی
شهریورماه ۱۳۹۷

مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایان‌نامه بدون ذکر منبع مجاز نمی‌باشد.

چکیده

گراف ساده $G=(V,E)$ را در نظر بگیرید. مقادیر ویژه ماتریس مجاورت این گراف به‌صورت $\lambda_n \geq \cdots \geq \lambda_۲ \geq \lambda_۱$ می‌باشند و انرژی گراف به‌صورت $\varepsilon(G)=\sum_{j=۱}^{n}|\lambda_j|$ تعریف می‌شود. مقالات زیادی در علوم ریاضی و شیمی درباره خواصی از این گراف‌ها و رابطه آن‌ها با انرژی مزدوج ملکولی منتشر شده است. این مفهوم به ماتریس‌های دیگر به غیر از ماتریس مجاورت تعمیم داده شده است و کران‌ها ی مختلف و خواص مرزی برای این انرژی‌های گراف (ماتریس) بیان شده است.

در این پایان‌نامه ، ما دو نوع از ماتریس‌هایی که به گراف‌های همبند نسبت داده می‌شود را مطالعه می‌کنیم، که ماتریس مجموع درجات و ماتریس خروج از مرکز می‌باشند. در ادامه کران‌هایی برای مقادیر ویژه مخصوصاً شعاع طیفی (بزرگترین مقدار ویژه) این ماتریس‌ها پیدا می‌کنیم. همچنین انواع جدیدی از انرژی را با توجه به این ماتریس‌ها تعریف می‌کنیم و به بررسی بعضی کران‌های این انرژی‌ها در رده‌های خاصی از گراف‌ها می‌پردازیم.

کلمات کلیدی: مقدار ویژه، انرژی گراف، ماتریس مجاورت، ماتریس مجموع درجات، انرژی مجموع درجات، ماتریس مجموع خروج از مرکز، انرژی مجموع خروج از مرکز.

مقدمه

پیشرفت‌های اخیر در ریاضیات، به ویژه در کاربردهای آن موجب گسترش چشم‌گیر نظریه گراف شده است به گونه‌ای که هم‌اکنون نظریه گراف ابزار مناسبی برای تحقیق در زمینه‌های گوناگون مانند تحقیق در عملیات، کدگذاری، شیمی، علوم رایانه و سایر زمینه‌ها گردیده است. یکی از مفاهیمی که در سال‌های اخیر ارتباط قوی با شیمی برقرار کرده انرژی گراف و کاربردهای آن است. همچنین بررسی خواص جبری گراف ها مورد توجه بسیاری از ریاضیدانان بوده است.

در سال ۱۹۴۰ کولسن فرمولی انتگرالی برای انرژی گراف ارائه داد. پس از آن گاتمن در سال ۱۹۸۷ مفهوم انرژی را برای گراف‌های ساده تعمیم داد.

یک ملکول با اتم‌های $x_1, x_2, ..., x_n$ را در نظر بگیرید، فرض می‌کنیم این اتم‌ها رئوس یک گراف باشند، اگر بین اتم‌ها پیوند کووالانسی موجود باشد آن دو رأس را مجاور می‌نامیم و گراف حاصل از این طریق را گراف ملکولی می‌نامیم. اگر G گراف ملکولی باشد $E(G)$، برابر انرژی πـ الکترون آن ملکول خواهد بود. تعریفی که گاتمن برای انرژی ملکول‌ها ارائه داد با استفاده از گراف‌ها و ماتریس‌های مجاورت آن‌ها بود، به این صورت که انرژی گراف ساده برابر مجموع قدرمطلق مقادیر ویژه‌ی گراف است.

این پایان‌نامه شامل ۴ فصل است. فصل اول شامل سه بخش است که در آن‌ها تعاریف مقدماتی نظریه گراف و جبرخطی و نظریه ماتریس‌ها و انرژی گراف را بیان کرده‌ایم. مطالب این فصل برگرفته از مراجع [1] و [2] و [20] و [22] و [23] و [24] و [30] و [32] می‌باشد.

در فصل دوم درباره انرژی گراف کامل و گراف‌های فرا انرژی سخن می‌گوییم و کران‌هایی از انرژی گراف را مشخص می‌کنیم.

در فصل سوم به بررسی ماتریس مجموع درجات و انرژی مجموع درجات و مقادیر ویژه مربوطه پرداخته و کران‌هایی را در این زمینه پیدا می‌کنیم.

همچنین فصل چهارم شامل ماتریس مجموع خروج از مرکز و انرژی مجموع خروج از مرکز و کران‌هایی از این انرژی می‌باشد. در پایان این فصل سوالی در زمینه گراف‌های هم‌انرژی مطرح می‌شود.

فهرست مطالب

فهرست تصاویر

فصل ۱

تعاریف و مفاهیم اولیه

۱.۱ مقدمه

در این فصل تعاریف و مفاهیم لازم که در فصل‌های آتی لازم است به اختصار بیان می‌کنیم.
تمام مطالب این فصل برگرفته از مراجع [۱] و [۲] و [۲۰] و [۲۲] و [۲۳] و [۲۴] و [۳۰] و [۳۲] می‌باشند.

۲.۱ تعاریف و مفاهیم نظریه گراف

تعریف ۱.۲.۱. [۱] گراف [۱] G، یک سه تایی مرتب $(V(G), E(G), \psi_G)$ است که تشکیل شده از یک مجموعه ناتهی $V(G)$ از رأس‌ها و یک مجموعه $E(G)$ شامل یال‌ها و یک تابع وقوع ψ_G که به هر یال G، یک زوج نامرتب از رأس‌های G را نسبت می‌دهد. اگر e یک یال و u و v دو رأس باشند، بطوریکه $\psi_G(e) = uv$، در این صورت گفته می‌شود که e، رأس‌های u و v را به یکدیگر وصل کرده است و رأس‌های u و v، دو سر یال e نامیده می‌شوند.

---
[۱] Graph

$V(G)$ را مجموعه رأس‌ها[۲] و $E(G)$ را مجموعه یال‌های[۳] گراف G می‌نامند.

تعریف ۲.۲.۱. [۱] دو رأس u و v را مجاور[۴] گویند اگر یالی بین آن‌ها وجود داشته باشد و همچنین دو یال متمایز از G مجاورند اگر حداقل یک رأس مشترک داشته باشند.

تعریف ۳.۲.۱. [۱] تعداد رئوس گراف G را مرتبه [۵] گراف و تعداد یال‌هایش را اندازه[۶] گراف G می‌نامند.

تعریف ۴.۲.۱. [۱] ماکزیمم درجه رئوس یک گراف را با $\triangle(G)$ یا $\triangle$ و مینیمم درجه رئوس را با $\delta(G)$ یا δ نمایش می‌دهند.

تعریف ۵.۲.۱. [۱] گراف ساده‌ای که در آن هرجفت از رأس‌های متمایز به وسیله یک یال به هم متصل باشند، گراف کامل[۷] نامیده می‌شود و با نماد K_n نمایش داده می‌شود.

تعریف ۶.۲.۱. [۱] گرافی که مجموعه رأس‌های آن را بتوان به دو زیر مجموعه X, Y به‌طوری افراز کرد که هر یال دارای یک انتها در X و یک انتها در Y باشد،گراف دوبخشی [۸] می‌نامند.

تعریف ۷.۲.۱. [۱] گراف دوبخشی کامل[۹]، یک دوبخشی ساده با افراز (X, Y) است که در آن هر رأس X به هر رأس Y متصل است و آن را با $K_{m,n}$ نشان می‌دهند.

تعریف ۸.۲.۱. [۱] گراف G را که درجه همه رئوس آن r باشد، گراف $r-$ منتظم[۱۰] می‌نامند.

لم ۱.۲.۱. در هر گراف با مجموعه رئوس $V(G)$ و یال‌های $E(G)$ و درجه رأسی $d(v)$ داریم:

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

تعریف ۹.۲.۱. [۱] یک گشت[۱۱] از G، دنباله‌ای ناصفر متناهی است به طوری‌که جملات آن یک در میان از رأس‌ها و یال‌ها بوده و به ازای $1 \leq i \leq k$، v_{i-1} v_i دو سر e_i باشند.

تعریف ۱۰.۲.۱. [۱] اگر یال‌های یک گشت متمایز باشند، آن را گذر[۱۲] می‌نامند.

تعریف ۱۱.۲.۱. [۱] گذری که همه‌ی رأس‌های آن متمایز باشند یک مسیر[۱۳] نامیده می‌شود.

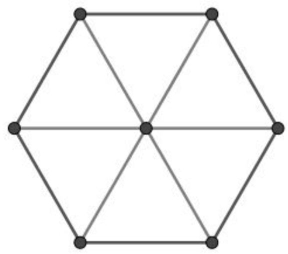
تعریف ۱۲.۲.۱. [۱] دور[۱۴]، مسیر بسته‌ای حداقل به طول یک است که در آن رأس ابتدایی و

[۲] Vertex set
[۳] Edge set
[۴] Adjacent
[۵] Order
[۶] Size
[۷] Complete graph
[۸] Bipartite graph
[۹] Complete bipartite graph
[۱۰] r-regular graph
[۱۱] Walk
[۱۲] Trail
[۱۳] Path
[۱۴] Cycle

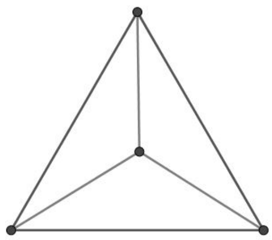
انتهایی بر یکدیگر منطبق هستند و هیچ رأس تکراری ندارد.

تعریف ۱.۲.۱۳. [۱] گرافی که از یک دور، با افزودن یک رأس جدید و یال‌هایی که این رأس را به تمام رأس‌های دور متصل می‌کند تشکیل می‌شود، را گراف چرخ[۱۵] می‌نامند.

مثال ۱.۲.۱. گراف‌های زیر چرخ‌هایی از مرتبه ۴ و ۷ هستند:



شکل ۱.۱: گراف چرخ W_7



شکل ۲.۱: گراف چرخ W_4

در گراف چرخ از مرتبه n $(n \geq 4)$ درجه یکی از رئوس $(n-1)$ است و درجه بقیه رئوس سه است.

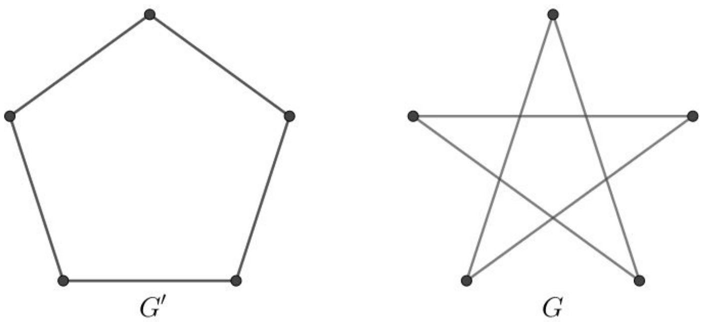
تعریف ۱.۲.۱۴. [۱] گرافی که بین هر دو رأس آن یک مسیر وجود داشته باشد، گراف همبند[۱۶] نامیده می‌شود.

تعریف ۱.۲.۱۵. [۱] دو گراف $G = (V, E)$ و $G' = (V', E')$ را یک‌ریخت[۱۷] گوییم هرگاه تابع یک به یک و پوشای $f : V(G) \longrightarrow V(G')$ موجود باشد که اگر $uv \in E(G)$ باشد آن‌گاه $f(u)f(v) \in E(G')$ باشد. دو گراف یک‌ریخت G و G' را با نماد $G \cong G'$ نشان می‌دهیم. برای مثال گراف‌های شکل (۳.۱) یک‌ریخت هستند.

[۱۵] Wheel graph

[۱۶] Connected graph

[۱۷] Isomorphic



شکل ۳.۱: گراف‌های یک‌ریخت

تعریف ۱۶.۲.۱. [۱] فرض کنید G گرافی از مرتبه n باشد، مکمل[۱۸] (متمم) گراف G را با $\bar{G}$ نشان می‌دهیم و به این‌صورت تعریف می‌کنیم. اولاً $V(G) = V(\bar{G})$ و ثانیاً هر دو رأس مانند u و v در $\bar{G}$ مجاور هستند اگر تنها و اگر در G مجاور نباشند. توجه کنید که مکمل گراف کامل، گراف تهی است و مکمل گراف کامل دوبخشی، اجتماع دو گراف کامل است.

تعریف ۱۷.۲.۱. [۱] به هر گراف G با n رأس به قسمی که یک رأس از درجه $n-۱$ باشد و $n-۱$ رأس دیگر از درجه یک باشند، گراف ستاره[۱۹] می‌گویند.

۳.۱ تعاریف و مفاهیم لازم از جبرخطی و نظریه ماتریس‌ها

تعریف ۱.۳.۱. ماتریس قطری[۲۰] از مرتبه n، یک ماتریس $n \times n$ است که هر مولفه روی قطر اصلی غیرصفر بوده و دیگر مولفه‌های آن صفر باشند و به صورت

$$A = diag(a_{۱۱}, a_{۲۲}, \ldots, a_{nn})$$

نمایش داده می‌شود.

تعریف ۲.۳.۱. اثر[۲۱] یک ماتریس مربعی $n \times n$ برابر است با حاصل جمع درایه‌های قطر اصلی

[۱۸] Complementary
[۱۹] Star graph
[۲۰] Crown graph
[۲۱] Trace

آن، یا به عبارت دیگر :

$$tr(A) = a_{۱۱} + a_{۲۲} + \cdots + a_{nn} = \sum_{i=۱}^{n} a_{ii}$$

و a_{ii} درایه واقع بر سطر و ستون iام ماتریسA می‌باشد.

تعریف ۳.۳.۱. فرض کنید G یک گراف ساده از مرتبه n باشد که مجموعه رئوس آن به‌صورت $V(G) = \{v_۱, v_۲, \ldots, v_n\}$ باشد. ماتریس مجاورت[۲۲] $A(G)$، یک ماتریس $n \times n$ است، اگر رئوس v_i و v_j در گرافG به هم متصل باشند آن‌گاه درایه ijــام ماتریس A یک بوده و در غیر این‌صورت صفر است، به عبارتی داریم:

$$A(G) = \begin{cases} ۱ & v_i \sim v_j \\ ۰ & \text{در غیر این‌صورت} \end{cases},$$

جایی که نماد $\sim$ نشان دهنده مجاورت دو رأس می‌باشد.

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

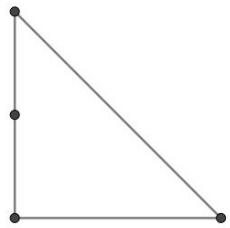
$$A(W_n) = \begin{bmatrix} ۰ & ۱ & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots & ۱ & ۱ \\ ۱ & ۰ & ۱ & ۰ & ۰ & \cdots & ۰ & ۱ \\ ۰ & ۱ & ۰ & ۱ & ۰ & \cdots & ۰ & ۱ \\ ۰ & ۰ & ۱ & ۰ & ۱ & \cdots & ۰ & ۱ \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ ۱ & ۱ & \cdots & \cdots & ۱ & \cdots & ۱ & ۰ \end{bmatrix}.$$

تعریف ۴.۳.۱. [۲۲] فرض کنید A یک ماتریس مربعی از مرتبه n باشد. عدد (نه لزوما حقیقی) λ یک مقدار ویژه از A نامیده می‌شود اگر یک بردار $v \neq ۰$ موجود باشد به طوری‌که $Av = \lambda v$.
این بردار v را یک بردار ویژه از A وابسته به مقدار ویژه‌ی λ می‌نامند.
چند جمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت A به صورت زیر تعریف می‌شود:

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

ریشه‌های چندجمله‌ای مشخصه $\phi(G, \lambda)$ دقیقا مقادیر ویژه‌ی ماتریس A است.

قضیه ۱.۳.۱. اگر A ماتریس متقارن حقیقی از مرتبه n باشد، آنگاه A دارای n مقدار ویژه حقیقی و یک مجموعه متعامد متناظر از بردارهای ویژه است.
قضیه فوق نشان می‌دهد که ماتریس مجاورت مربعی $A(G)$ که از مرتبه n است دارای n مقدار ویژه حقیقی (با احتساب تکرار) است.



شکل ۴.۱: گراف G

مثال ۲.۳.۱. گراف G را به‌صورت زیر درنظر بگیرید:

ماتریس مجاورت آن به‌صورت $A(G) = \begin{bmatrix} ۰ & ۱ & ۰ & ۱ \\ ۱ & ۰ & ۱ & ۰ \\ ۰ & ۱ & ۰ & ۱ \\ ۱ & ۰ & ۱ & ۰ \end{bmatrix}$ است و چندجمله‌ای مشخصه آن عبارت از $\phi(G,\lambda) = \lambda^۴ - ۴\lambda^۲$ می‌باشد.

لم ۱.۳.۱. [۲۳] فرض کنید A یک ماتریس مربعی از مرتبه n با مقادیر ویژه‌ی $\lambda_۱, \lambda_۲, \ldots, \lambda_n$ باشد، آن‌گاه داریم:

$$tr(A) = \sum_{i=۱}^{n} \lambda_i \quad ,$$

$$detA = \prod_{i=۱}^{n} \lambda_i.$$

لم ۲.۳.۱. [۱] یک ماتریس مربعی A از مرتبه n روی اعداد حقیقی، متقارن[۲۳] نامیده می‌شود هرگاه $A^T = A$.

لم ۳.۳.۱. [۲۳] فرض کنید G یک گراف از مرتبه n و اندازه m باشد و $A(G)$ ماتریس مجاورت گراف G باشد در این‌صورت چون $tr(A(G)) = ۰$ است، لذا داریم:

$$\sum_{i=۱}^{n} \gamma_i = ۰ \tag{۱.۱}$$

و

$$\sum_{i=۱}^{n} \gamma_i^۲ = ۲m. \tag{۲.۱}$$

[۲۲] Adjacency matrix

[۲۳] Symmetric

لم ۱.۳.۴. [۳۲] (نامساوی کوشی_شوارتز) فرض کنید $(a_۱, \dots, a_p)$ و $(b_۱, \dots, b_p)$ دو بردار از مرتبه p باشند. در این‌صورت داریم:

$$\left(\sum_{i=۱}^{p} a_i b_i\right)^۲ \leq \left(\sum_{i=۱}^{p} a_i^۲\right)\left(\sum_{i=۱}^{p} b_i^۲\right). \tag{۱.۳}$$

قضیه ۱.۳.۲. [۲۰] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی مثبت باشند که $۱ \leq i \leq n$ است. در این‌صورت داریم:

$$\sum_{i=۱}^{n} a_i^۲ \sum_{i=۱}^{n} b_i^۲ \leq \frac{۱}{۴}\left(\sqrt{\frac{M_۱ M_۲}{m_۱ m_۲}} + \sqrt{\frac{m_۱ m_۲}{M_۱ M_۲}}\right)^۲ \left(\sum_{i=۱}^{n} a_i b_i\right)^۲, \tag{۱.۴}$$

که در آن $M_۱ = max_{۱\leq i\leq n}(a_i)$ ،$M_۲ = max_{۱\leq i\leq n}(b_i)$ ،$m_۱ = min_{۱\leq i\leq n}(a_i)$ و همچنین $m_۲ = min_{۱\leq i\leq n}(b_i)$ است.

قضیه ۱.۳.۳. [۲۰] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی نامنفی باشند که $۱ \leq i \leq n$ است. در این صورت داریم:

$$\sum_{i=۱}^{n} a_i^۲ \sum_{i=۱}^{n} b_i^۲ - \left(\sum_{i=۱}^{n} a_i b_i\right)^۲ \leq \frac{n^۲}{۴}(M_۱ M_۲ - m_۱ m_۲)^۲, \tag{۱.۵}$$

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

قضیه ۱.۳.۴. [۲۰] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی مثبت هستند که $۱ \leq i \leq n$ است. در این صورت داریم:

$$\left| n\sum_{i=۱}^{n} a_i b_i - \sum_{i=۱}^{n} a_i \sum_{i=۱}^{n} b_i \right| \leq \alpha(n)(A-a)(B-b), \tag{۱.۶}$$

جایی که a و b و A و B مقادیر ثابتی هستند و به ازای هر i که $۱ \leq i \leq n$ است داریم:

$$b \leq b_i \leq B, a \leq a_i \leq A,$$

به علاوه، $\alpha(n) = n[\frac{n}{۲}]\left(۱ - \frac{۱}{n}[\frac{n}{۲}]\right)$ است.

قضیه ۱.۳.۵. [۲۰] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی نامنفی هستند که $۱ \leq i \leq n$ باشد داریم:

$$\sum_{i=۱}^{n} b_i + rR\sum_{i=۱}^{n} a_i^۲ \leq (r+R)\sum_{i=۱}^{n} a_i b_i, \tag{۱.۷}$$

به‌طوری که r و R اعداد ثابت هستند و برای هر $۱ \leq i \leq n$داریم: $ra_i \leq b_i \leq Ra_i$.

لم ۱.۳.۵. [۲۳] فرض کنید B یک ماتریس متقارن $p \times p$ باشد و B_k یک زیر ماتریس $k \times k$ از آن باشد که با حذف $(p-k)$ سطر و ستون B به‌دست آمده است. لذا داریم:

$$\lambda_{p-i+1}(B) \leq \lambda_{k-i+1}(B_k) \leq \lambda_{k-i+1}(B) \tag{۱.۸}$$

وقتی‌که $i = 1, 2, \ldots, n$ باشد و همچنین $\lambda_i(B)$، i امین مقدار ویژه از B (مقادیر ویژه به‌صورت نزولی مرتب شده باشند) می‌باشد.

لم ۱.۳.۶. [۲۳] فرض کنید $x_1, x_2, \ldots, x_N$ اعداد نامنفی باشند و اگر α و β به‌ترتیب میانگین حسابی و میانگین هندسی این اعداد باشند و به‌صورت زیر تعریف شوند:

$$\alpha = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \quad \text{و} \quad \beta = \left(\prod_{i=1}^{N} x_i\right)^{\frac{1}{N}}$$

آن‌گاه داریم:

$$\frac{1}{N(N-1)}\sum_{i<j}(\sqrt{x_i}-\sqrt{x_j})^2 \leq \alpha - \beta \leq \frac{1}{N}\sum_{i<j}(\sqrt{x_i}-\sqrt{x_j})^2. \tag{۱.۹}$$

و تساوی برقرار است اگر $x_1 = x_2 = \cdots = x_N$ باشد.

لم ۱.۳.۷. [۲۳] فرض کنید $a_1, \ldots, a_n$ و $b_1, \ldots, b_n$ اعداد حقیقی نامنفی باشند. اگر $p > 1$ باشد آن‌گاه داریم:

$$\left(\sum_{i=1}^{n}(a_i+b_i)^p\right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^p\right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{i=1}^{n} b_i^p\right)^{\frac{1}{p}}. \tag{۱.۱۰}$$

قضیه ۱.۳.۶. [۳۳] فرض کنید $a_1, a_2, \ldots, a_n$ اعداد حقیقی نامنفی باشند، در این صورت داریم:

$$\begin{aligned} n\Big[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} a_i - \Big(\prod_{i=1}^{n} a_i\Big)^{\frac{1}{n}}\Big] &\leq n\sum_{i=1}^{n} a_i - \Big(\sum_{i=1}^{n}\sqrt{a_i}\Big)^2 \\ &\leq n(n-1)\Big[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} a_i - \Big(\prod_{i=1}^{n} a_i\Big)^{\frac{1}{n}}\Big]. \end{aligned} \tag{۱.۱۱}$$

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

تعریف ۱.۴.۱. [۲] طیف گراف [۲۴] G مجموعه مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف G با احتساب چندگانگی آن‌ها می‌باشد. هر طیف گراف G با $Spec(G)$ نشان داده می‌شود. بزرگترین مقدار ویژه‌ی گراف، شعاع طیفی [۲۵] گراف نامیده می‌شود.

[۲۴] Spectrum of graph

[۲۵] Spectral radius

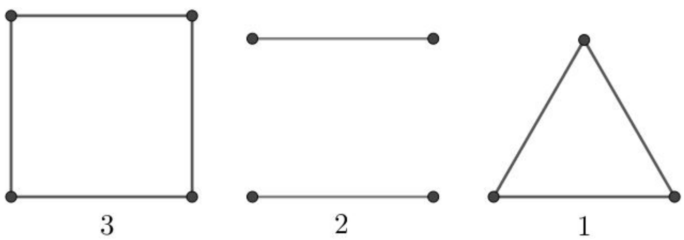
تعریف ۲.۴.۱. [۲۰] فرض کنید G گرافی ساده از مرتبه n باشد. انرژی گراف[۲۶] G که با $\varepsilon(G)$ نشان داده می‌شود به صورت مجموع قدرمطلق مقادیر ویژه‌ی آن تعریف می‌شود، یعنی داریم:

$$\varepsilon(G) = \sum_{i=۱}^{n} |\lambda_i|.$$

قضیه ۱.۴.۱. (پرون–فروبنیوس)
فرض کنید A و B ماتریس هایی $n\times n$ نامنفی تحویل ناپذیر متقارن با درایه های حقیقی باشند، آن‌گاه داریم:
الف) شعاع طیفی $\rho(A)$ یک مقدار ویژه ساده از A می باشد.اگر X یک بردار ویژه برای $\rho(A)$ باشد، در این صورت هیچ مولفه ای ازX صفر نبوده و همه مولفه‌های آن دارای علامت یکسان می‌باشند.
ب) به علاوه اگر ماتریس $A-B$ نامنفی باشد،آن‌گاه $\rho(B) \leq \rho(A)$ و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر $A=B$.

تعریف ۳.۴.۱. [۲] فرض کنید $G_۱$ و $G_۲$ دو گراف از مرتبه n باشند. $G_۱$ و $G_۲$ هم‌انرژی نامیده می‌شوند، هرگاه $\varepsilon(G_۱)=\varepsilon(G_۲)$ باشد.
برای روشن‌تر شدن مفهوم گراف‌های هم انرژی مثال زیر را بیان می‌کنیم.

مثال ۱.۴.۱. فرض کنید سه گراف به شکل (۵.۱) باشند:



شکل ۵.۱: گراف‌های هم انرژی

این گراف‌ها دارای مقادیر ویژه برابر نیستند.
مقادیر ویژه یا طیف این گراف‌ها $\{۲,-۱,-۱\}$ و $\{۱,۱,-۱,-۱\}$ و $\{۲,۰,۰,-۲\}$ هستند، در صورتی‌که انرژی هر سه گراف برابر چهار است. به این ترتیب مشاهده می‌کنیم که سه گراف فوق هم انرژی هستند ولی هم طیف نیستند.

تعریف ۴.۴.۱. [۲۴] گرافی که انرژی آن از انرژی گراف کامل بیشتر باشد، گراف فرا انرژی[۲۷] نامیده می‌شود.

[۲۶] Energy of a graph
[۲۷] Hyperenergetic graphs

فصل ۲

انرژی گراف

۱.۲ انرژی گراف‌های خاص

در این فصل قصد داریم انرژی گراف را با توجه به تعاریف مقدماتی که در فصل یک داشتیم معرفی کنیم و در گراف خاص کامل فرمولی برای آن ارائه کنیم. همچنین برای رده‌های خاصی از گراف‌ها، کران‌هایی از انرژی را مشخص کنیم. نتایج این فصل برگرفته از مراجع [۱۵] و [۲۳] و [۲۴] می‌باشد.

ابتدا به بررسی انرژی گراف کامل می‌پردازیم. فرض کنید K_n یک گراف کامل از مرتبه n باشد .طبق تعریف، مقادیر ویژه گراف K_n ریشه‌های چند جمله‌ای مشخصه آن است که از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\phi(K_n, \lambda) = det(\lambda I - A(K_n)) = (\lambda - n + 1)(\lambda + 1)^{(n-1)},$$

لذا انرژی گراف کامل برابر است با:

$$\varepsilon(K_n) = 2n - 2.$$

با مقایسه انرژی گراف‌ها با این مقدار، رده جدیدی از گراف معرفی می‌شود. گراف‌های از مرتبه n مانند گراف G که $\varepsilon(G) > \varepsilon(K_n) = 2n - 2$ باشد را گراف فرا انرژی می‌نامیم. اگرچه مفهوم انرژی مسیر توسعه را به خوبی پیش رفته است، ولی به نسبت نتایج خیلی کمی برای گراف‌های فرا انرژی موجود است.

در واقع از سال ۱۹۹۰ به بعد کار روی گراف‌های فرا انرژی با یک گروه ریاضیدان هندی وایوان گاتمن شروع شد و نتایجی به دست آمد که به طور خلاصه توضیح می‌دهیم.

نتیجه ۱.۱.۱.۲. [۱۵] برای $n \geq ۵$، گراف خطی از گراف کامل K_n یک گراف فرا انرژی است و برای $n \geq ۴$، گراف خطی از گراف دو بخشی کامل $K_{n,n}$ یک گراف فرا انرژی است.

نتیجه ۲.۱.۱.۲. [۱۵] همه گراف‌هایی که حداقل $۲n - ۱$ یال دارند فرا انرژی هستند.

در گراف کامل K_n با حذف یک، دو یا سه یال، انرژی مربوطه کوچک‌تر از $\varepsilon(K_n)$ می‌شود ولی اگر چهار یال، که یک چهارگوش تشکیل می‌دهند، حذف شوند انرژی گراف بیشتر از $\varepsilon(K_n)$ خواهد بود.
نوع دیگری از گراف‌ها که براساس انرژی آن‌ها مشخص می‌شوند گراف‌های فرو انرژی هستند، که به صورت زیر تعریف می‌شوند.

تعریف ۱.۱.۱.۲. [۱۵] فرض کنید G گرافی از مرتبه n باشد. اگر $\varepsilon(G) < n$ باشد، گراف G را فرو انرژی می‌نامند و اگر $\varepsilon(G) \geq n$ باشد گراف G فرو انرژی نیست.

۲.۲ کران‌هایی از انرژی گراف

ابتدا نتایجی را که در این بخش نیاز داریم یادآوری می‌کنیم سپس کران‌هایی از انرژی گراف را بررسی می‌کنیم.

لم ۱.۲.۲. [۲۳] فرض کنید G یک گراف همبند از مرتبه n و اندازه m باشد و λ_iها مقادیر ویژه گراف G باشند آن‌گاه داریم:

$$\lambda_۱ \geq \frac{۲m}{n},$$

و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر G یک گراف منتظم باشد.

لم ۲.۲.۲. [۲۳] فرض کنید G یک گراف از مرتبه n و اندازه m باشد. در این صورت داریم:

$$-\sqrt{\frac{۲m(r-۱)}{n(n-r+۱)}} \leq \lambda_r \leq \sqrt{\frac{۲m(n-r)}{nr}} \quad , \quad ۱ \leq r \leq n.$$

حال به بررسی کران‌های انرژی گراف با پارامترهای مختلف می‌پردازیم.

قضیه ۱.۲.۲. اگر G گرافی از اندازه m باشد آن‌گاه

$$\varepsilon(G) \geq ۲\sqrt{m}. \qquad (۱.۲)$$

برهان. در فصل قبل نشان دادیم که $\sum \lambda_i^{۲} = ۲m$، لذا با توجه به تعریف انرژی گراف خواهیم داشت:

$$[\varepsilon(G)]^{۲} = ۲m + ۲\sum_{i<j}|\lambda_i||\lambda_j| \geq ۲m + ۲|\sum_{i<j}\lambda_i\lambda_j| = ۲m + ۲|-m| = ۴m,$$

در نتیجه داریم:

$$\varepsilon(G) \geq ۲\sqrt{m}.$$

که در این جا تساوی برقرار است اگر و تنها اگر G یک گراف دو بخشی کامل $K_{a,b}$ باشد به طوری‌که $a,b = m$ باشد و بعضی از رأس‌ها جدا از هم (مجزا) هستند. □

قضیه ۲.۲.۲. فرض کنید G یک گراف ساده از مرتبه $n > ۲$ و اندازه m باشد، آن‌گاه داریم:

$$\varepsilon(G) \geq \sqrt{۲m + n(n-۱)|detA|^{\frac{۲}{n}} + \frac{۴}{(n+۱)(n-۲)}[\sqrt{\frac{۲m}{n}} - (\frac{۲m}{n})^{\frac{۱}{۴}}]^{۲}}, \qquad (۲.۲)$$

تساوی برقرار است اگر و تنها اگر $G \cong \frac{n}{۲}K_۲$ (n زوج باشد) یا $G \cong \bar{K_n}$.

برهان. اگر $G \cong \bar{K_n}$ باشد، پس $m = ۰$ و $detA = ۰$ و $\varepsilon(G) = ۰$. در این صورت تساوی برقرار است. اگر $G \cong \frac{n}{۲}K_۲$ (n زوج باشد) آن گاه $n = ۲m$ و $detA = (-۱)^{\frac{n}{۲}}$ و $\varepsilon(G) = ۰$. پس تساوی در این مورد هم برقرار است.

وقتی $([\frac{n}{۲} > p \geq ۱])$ $G \cong pK_۲ \cup (n-۲p)K_۱$ باشد داریم $۲m = ۲p < n$ و $detA = ۰$ و $\varepsilon(G) = ۲p$. در این صورت نا مساوی (۲.۲) به شدت بر قرار است. در هر صورت G دارای حداقل یک بخش همبند با $m_۱ \geq ۲$ ($m_۱$ تعداد یال‌های بخش همبند است) می‌باشد. از لم ۶.۳.۱ داریم:

$$\sum_{i=۱}^{N} x_i \geq N\Big(\prod_{i=۱}^{N} x_i\Big)^{\frac{۱}{N}} + \frac{۱}{(N-۱)}\sum_{i<j}(\sqrt{x_i} - \sqrt{x_j})^{۲}, \qquad (۳.۲)$$

با جایگذاری $N = \frac{n(n-۱)}{۲}$ و

$$(x_۱, ..., x_N) = (|\lambda_۱||\lambda_۲|, |\lambda_۱||\lambda_۳|, ..., |\lambda_۱||\lambda_n||\lambda_۲||\lambda_۳|, ..., |\lambda_۲||\lambda_n|, ..., |\lambda_{n-۱}||\lambda_n|),$$

در نامساوی (۳.۲) داریم:

$$\sum_{۱\leq i<j\leq n}|\lambda_i||\lambda_j| \geq \frac{n(n-۱)}{۲}\Big(\prod_{i=۱}^{n}|\lambda_i|\Big)^{\frac{۲}{n}} + \frac{۲}{n^{۲}-n-۲}\sum_{i<j\leq k<l}\Big(\sqrt{|\lambda_i||\lambda_j|} - \sqrt{|\lambda_k||\lambda_l|}\Big)^{۲},$$

به این ترتیب داریم:

$$۲\sum_{۱\leq i<j\leq n}|\lambda_i||\lambda_j| \geq n(n-۱)|detA|^{\frac{۲}{n}} + \frac{۴}{(n+۱)(n-۲)}\sum_{i<j\leq k<l}\Big(\sqrt{|\lambda_i||\lambda_j|} - \sqrt{|\lambda_k||\lambda_l|}\Big)^{۲}. \qquad (۴.۲)$$

با استفاده از لم ۲.۲.۲ می‌دانیم که:

$$\lambda_{\frac{n}{2}} \leq \sqrt{\frac{2m}{n}} \quad , \quad \lambda_{\frac{(n+1)}{2}} \leq \sqrt{\frac{2m(n-1)}{n(n+1)}} < \sqrt{\frac{2m}{n}},$$

از لم ۱.۲.۲ و نتایج بالا، برای هر $n \geq 3$ داریم:

$$\lambda_1 \geq \frac{2m}{n} \quad , \quad \lambda_{[\frac{n}{2}]} \leq \sqrt{\frac{2m}{n}}, \tag{5.2}$$

از آنجا که $m \geq 1$ با استفاده از لم ۵.۳.۱ داریم:

$$\lambda_n \leq \lambda_2(A_2) = -1,$$

با توجه به نتایج بالا $|\lambda_n| \geq 1$ می‌باشد. چون $n \geq 3$ و $m_1 \geq 2$ است، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\sum_{i<j,k<l} \left(\sqrt{|\lambda_i||\lambda_j|} - \sqrt{|\lambda_k||\lambda_l|}\right)^2 &\geq \left(\sqrt{|\lambda_1||\lambda_n|} - \sqrt{|\lambda_{[\frac{n}{2}]}||\lambda_n|}\right)^2 \\ &+ \sum_{\substack{i<j,k<l \\ (i,j)\neq(1,n) \\ (k,n)\neq([\frac{n}{2}],n)}} \left(\sqrt{|\lambda_i||\lambda_j|} - \sqrt{|\lambda_k||\lambda_l|}\right)^2 \\ &> |\lambda_n|\left(\sqrt{|\lambda_1|} - \sqrt{|\lambda_{[\frac{n}{2}]}|}\right)^2 \geq \left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - (\frac{2m}{n})^{\frac{1}{4}}\right]^2,\end{aligned}$$

همچنین طبق رابطه (۴.۲) و روابط بالا داریم:

$$2\sum_{1\leq i<j\leq n} |\lambda_i||\lambda_j| > n(n-1)|detA|^{\frac{2}{n}} + \frac{4}{(n+1)(n-2)}\left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - (\frac{2m}{n})^{\frac{1}{4}}\right]^2.$$

با اضافه کردن $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 (= 2m)$ به طرفین خواهیم داشت:

$$\varepsilon(G)^2 > 2m + n(n-1)|detA|^{\frac{2}{n}} + \frac{4}{(n+1)(n-2)}\left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - (\frac{2m}{n})^{\frac{1}{4}}\right]^2.$$

که به طور مستقیم رابطه (۲.۲) بدست می‌آید. $\square$

تعریف ۱.۲.۲. گراف G، تکین نامیده می‌شود هرگاه حداقل یکی از مقادیر ویژه آن صفر باشد. در گراف‌های تکین، $detA = 0$ می‌باشد. گراف G ناتکین است اگر هیچ یک از مقادیر ویژه آن صفر نباشد، لذا داریم $detA \neq 0$.

به دنبال این تعریف از گراف تکین، کران‌هایی از انرژی آن را محاسبه خواهیم کرد. برای این کار قضایای زیر را اثبات می‌کنیم. قضیه زیر توسط داس و همکارانش بدست آمده که برای گراف‌های ناتکین معتبر است.

قضیه ۳.۲.۲. فرض کنید G یک گراف همبند ناتکین از مرتبه n و اندازه m باشد. در این صورت داریم:

$$\varepsilon(G) \leq 2m - \frac{2m}{n}(\frac{2m}{n} - 1) - ln(\frac{n|detA|}{2m}), \tag{۶.۲}$$

که $detA(\neq 0)$ دترمینان ماتریس مجاورت است.
تساوی در اینجا برقرار است اگر و تنها اگر $G \cong K_n$.

برهان. چون G ناتکین است پس $|\lambda_i| > 0$ برای $i = 1, 2, ..., n$. بنابراین داریم:

$$|detA| = \prod_{i=1}^{n} |\lambda_i| > 0$$

چون G رئوس مجزا ندارد داریم:

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

$$\frac{2m}{n} \geq 1$$

حال تابع $f(x) = x^2 - x - \ln x (x > 0)$ را در نظر بگیرید که مشتق آن برابر است با $f'(x) = 2x - 1 - \frac{1}{x}$. تابع $f(x)$ برای $x \geq 1$ یک تابع افزایشی است و وقتی $0 < x \leq 1$ باشد تابعی کاهشی است. بنابراین $f(x) \geq f(1) = 0$ لذا $x \leq x^2 - \ln x$ برای $x > 0$ است. در این قسمت تساوی برقرار است اگر و تنها اگر $x = 1$ باشد.
از نتایج قبل استفاده می‌کنیم، پس داریم:

$$\varepsilon(G) = \lambda_1 + \sum_{i=2}^{n} |\lambda_i|$$

$$\leq \lambda_1 + \sum_{i=2}^{n} (\lambda_i^2 - \ln |\lambda_i|) \tag{۷.۲}$$

$$= \lambda_1 + 2m - \lambda_1^2 - \ln \prod_{i=1}^{n} |\lambda_i| + \ln \lambda_1$$

$$2m + \lambda_1 - \lambda_1^2 - \ln |detA| + \ln \lambda_1. \tag{۸.۲}$$

با استفاده از لم ۱.۲.۲ داریم: $\lambda_1 \geq \frac{2m}{n}$
تابع $g(x) = 2m + x - x^2 - \ln |detA| + \ln x$ یک تابع افزایشی است وقتی $0 < x \leq 1$ باشد و همچنین تابع $g(x)$ کاهشی است وقتی که $x \geq 1$ باشد. وقتی که $x \geq \frac{2m}{n} \geq 1$ باشد، داریم:

$$g(x) \leq g(\frac{2m}{n}) = 2m + \frac{2m}{n} - (\frac{2m}{n})^2 - \ln |detA| + \ln(\frac{2m}{n}).$$

از ترکیب کردن این نامساوی با رابطه (۸.۲) قضیه اثبات می‌شود و رابطه (۶.۲) بدست می‌آید. حال فرض کنید در رابطه (۶.۲) تساوی برقرار است. پس همه نامساوی‌های بالا باید مساوی باشند. در (۷.۲) تساوی در صورتی برقرار است که داشته باشیم:

$$|\lambda_2| = |\lambda_3| = ... = |\lambda_n| = 1. \qquad (۹.۲)$$

وقتی G همبند است شرط ۹.۲ پذیرفته می‌شود اگر و فقط اگر $G \cong K_n$ باشد. □

اخیرا داس و همکارانش [۱۲] کران پایینی از انرژی گراف را به صورت زیر معرفی کرده‌اند:

$$\varepsilon(G) \geq \frac{2m}{n} + n - 1 + \ ln(\frac{n|detA|}{2m}). \qquad (۱۰.۲)$$

همچنین کلند [۲۳] براساس پارامترهای m و n و دترمینان ماتریس مجاورت، کران پایینی برای انرژی گراف به صورت زیر بدست آورد.

$$\varepsilon(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)|detA|^{\frac{2}{n}}}. \qquad (۱۱.۲)$$

نتایجی از انرژی گراف را در این قسمت بیان می‌کنیم که به نتایج نورد هوس_گادام معروف است. این نتایج را در قالب دو قضیه مطرح می‌کنیم. لازم به یادآوری است که $\bar{G}$ گراف مکمل G است.

قضیه ۴.۲.۲. فرض کنید G و $\bar{G}$ گراف‌های همبند ناتکین باشند. اگر G از مرتبه n و اندازه m باشد، آن‌گاه داریم:

$$3(n-1) + \ln\Big(\frac{n^2|det(A\bar{A})|}{2m(n(n-1)-2m)}\Big) \leq \varepsilon(G) + \varepsilon(\bar{G}) \leq 2(n-1)$$

$$+ \frac{4m(n(n-1)+2m)}{n^2} - \ln\Big(\frac{n^2|det(A\bar{A})|}{2m(n(n-1)-2m)}\Big). \qquad (۱۲.۲)$$

جایی که $detA(\neq 0)$ و $det\bar{A}(\neq 0)$، به ترتیب دترمینان ماتریس‌های مجاورت G و $\bar{G}$ هستند.

برهان. با استفاده از (۱۰.۲) داریم:

$$\varepsilon(G) + \varepsilon(\bar{G}) \geq \frac{2m + 2\bar{m}}{n} + 2(n-1) + \ln\big(\frac{n|detA|}{2m}\big) + \ln\big(\frac{n|det\bar{A}|}{2\bar{m}}\big).$$

که $\bar{m}$ و $\bar{A}$ به ترتیب اندازه و ماتریس مجاورت گراف $\bar{G}$ هستند. چون $2m + 2\bar{m} = n(n-1)$ و $detA\bar{A} = detAdet\bar{A}$ می‌باشد، کران پایین رابطه (۱۲.۲) طبق (۶.۲) چنین بدست می‌آید:

$$\varepsilon(G) + \varepsilon(\bar{G}) \leq 2m + 2\bar{m} + \frac{2m + 2\bar{m}}{n} - \frac{-4m^2 + 4\bar{m}^2}{n^2} - \ln\big(\frac{n|detA|}{2m}\big) - \ln\big(\frac{n|det\bar{A}|}{2\bar{m}}\big).$$

به طور مستقیم کران بالای (۱۲.۲) به دست می‌آید. □

قضیه ۵.۲.۲. فرض کنید G گرافی از مرتبه n و اندازه m باشد. در این صورت داریم:

$$\begin{aligned}\varepsilon(G)+\varepsilon(\bar{G}) &\leq n+\Delta-\delta-1\\ &\quad+\Big[(n-1)\Big(n-1+\frac{4m(n(n-1)-2m)}{n^2}\\ &\quad+\frac{2}{n^2}\sqrt{2m(2m+n)(n^2-2m)(n^2-2m-n)}\Big)\Big]^{1/2}.\end{aligned} \tag{۱۳.۲}$$

جایی که Δ و δ به ترتیب بزرگ‌ترین و کوچک‌ترین درجه‌های گراف G هستند.

برهان. با استفاده از لم ۷.۳.۱ داریم:

$$\Big(\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i|+|\bar{\lambda_i}|)^2\Big)^{\frac{1}{2}} \leq \Big(\sum_{i=2}^{n}\lambda_i^2\Big)^{\frac{1}{2}}+\Big(\sum_{i=2}^{n}\bar{\lambda_i}^2\Big)^{\frac{1}{2}}.$$

که λ_i و $\bar{\lambda_i}$ مقادیر ویژه گراف‌های G و $\bar{G}$ هستند.
چون $\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^2=2m$ و $\sum_{i=1}^{n}\bar{\lambda_i}^2=2\bar{m}$، پس داریم:

$$\begin{aligned}\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i|+|\bar{\lambda_i}|)^2 &\leq \sum_{i=2}^{n}\lambda_i^2+\sum_{i=2}^{n}\bar{\lambda_i}^2+2\sqrt{\sum_{i=2}^{n}\lambda_i^2\sum_{i=2}^{n}\bar{\lambda_i}^2}\\ &=2m-\lambda_1^2+2\bar{m}-\bar{\lambda_1}^2+2\sqrt{(2m-\lambda_1^2)(2\bar{m}-\bar{\lambda_1}^2)}\\ &\leq n(n-1)-\frac{4m^2+4\bar{m}^2}{n^2}+2\sqrt{\frac{4m\bar{m}}{n^4}(n^2-2m)(2m+n)}\\ &=n-1+\frac{4m(n(n-1)-2m)}{n^2}\\ &\qquad+\frac{2}{n^2}\sqrt{2m(n^2-2m-n)(n^2-2m)(2m+n)}.\end{aligned} \tag{۱۴.۲}$$

چون $\lambda_1<\Delta$، با استفاده از نامساوی کوشی شوارتز داریم:

$$\begin{aligned}\varepsilon(G)+\varepsilon(\bar{G}) &= |\lambda_1|+|\bar{\lambda_1}|+\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i|+|\bar{\lambda_i}|)\\ &\leq \Delta+n-\delta-1+\sqrt{(n-1)\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i|+|\bar{\lambda_i}|)^2}.\end{aligned}$$

لذا با استفاده از (۱۴.۲)، نامساوی (۱۳.۲) به دست می‌آید. $\square$

فصل ۳

انرژی مجموع درجات گراف

۱.۳ مقدمه

در این فصل قصد داریم ابتدا نتایجی درباره مقادیر ویژه حاصل از ماتریس مجموع درجات مخصوصاً بزرگترین مقدار ویژه که به شعاع طیفی معروف است، پیدا کنیم. در این راستا رده‌های خاصی از گراف‌ها مانند گراف‌های منتظم و گراف‌های دوبخشی را در نظر می‌گیریم. در ادامه انرژی مجموع درجات در گراف‌های خاصی مانند گراف چرخ، مسیر، r–منتظم و ... را به‌دست آورده و کران‌هایی از انرژی مجموع درجات را مشخص می‌کنیم.نتایج این فصل برگرفته از مراجع [۲۰] و [۲۲] و [۳۰] می‌باشد.

۲.۳ مقادیر ویژه ماتریس مجموع درجات

تعریف ۱.۲.۳. فرض کنید G یک گراف ساده از مرتبه n با مجموعه رأسی به‌صورت $V(G) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ باشد. ماتریس مجموع درجات[۱] $DS(G)$، یک ماتریس $n \times n$ است، جایی‌که v_i و v_j دو رأس متمایز باشند درایه ij ام ماتریس $DS(G)$ برابر مجموع درجات دو رأس v_i و v_j

[۱] Degree sum matrix

است و در غیر این‌صورت صفر است، یعنی داریم:

$$DS(G) = \begin{cases} d_i + d_j & ; i \neq j \\ 0 & ; i = j \end{cases}.$$

چندجمله‌ای مشخصه ماتریس $DS(G)$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\phi(G, \gamma) = det(\gamma I - DS(G)) = \gamma^n + c_1 \gamma^{n-1} + \cdots + c_n.$$

به ریشه‌های معادله مشخصه ماتریس $DS(G)$، مقادیر ویژه $DS(G)$ گفته می‌شود. از آنجا که $DS(G)$ ماتریس حقیقی و متقارن است، مقادیر ویژه آن اعداد حقیقی هستند و به صورت $\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \cdots \geq \gamma_n$ مرتب شده‌اند، جایی که γ_1 بزرگترین مقدار ویژه و γ_n کوچکترین مقدار ویژه ماتریس مجموع درجات است.

لم ۱.۲.۳. فرض کنید G یک گراف از مرتبه n و اندازه m باشد و $DS(G)$ ماتریس مجموع درجات گراف G باشد در این‌صورت چون $tr(DS(G)) = 0$ است، لذا داریم:

$$\sum_{i=1}^{n} \gamma_i = 0 \tag{۱.۳}$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} \gamma_i^2 &= tr(DS(G))^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} d_{ij} d_{ji} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} (d_i j)^2 \\ &= 2 \sum_{i<j} (d_i + d_j)^2 \quad . \end{aligned}$$

و با فرض اینکه $M = \sum_{1 \leq i < j \leq n} (d_i + d_j)^2$ خواهیم داشت:

$$\sum_{i=1}^{n} \gamma_i^2 = 2M. \tag{۲.۳}$$

در این قسمت قصد داریم برای گراف‌های rـ منتظم از مرتبه n ، مقادیر ویژه را مشخص می نماییم.

قضیه ۱.۲.۳. اگر G یک گراف rـ منتظم از مرتبه n باشد، آن‌گاه G فقط یک مقدار ویژه مثبت برابر $2(n-1)r$ دارد.

برهان. فرض کنید G یک گراف ساده rـ منتظم همبند با n رأس $v_1, v_2, \dots, v_n$ باشد که برای هر $1 \leq i \leq n$ درجه هر رأس v_i بصورت $d_i = r$ باشد.
همچنین داریم:

$$d_{ij} = \begin{cases} d_i + d_j = 2r, & i \neq j \\ 0, & i = j. \end{cases} \tag{3.3}$$

بنابر تعریف چندجمله‌ای ماتریس مجموع درجات گراف G،داریم:

$$\begin{aligned} \phi(G,\gamma) &= det\big(\gamma I - DS(G)\big) \\ &= det\Big(\gamma I - 2r\big(A(K_n)\big)\Big) \\ &= (2r)^n\Big|\frac{\gamma}{2r}I - A(K_n)\Big| \\ &= (2r)^n\Big(\frac{\gamma}{2r} - n + 1\Big)\Big(\frac{\gamma}{2r} + 1\Big)^{n-1} \\ &= \Big[\gamma - 2(n-1)r\Big](\gamma + 2r)^{n-1}. \end{aligned}$$

در این صورت با حل معادله $\Big[\gamma - 2(n-1)r\Big](\gamma + 2r)^{n-1} = 0$ داریم:

$$\gamma = \begin{cases} 2(n-1)r \\ -2r & ,\text{مرتبه}(n-1). \end{cases} \tag{4.3}$$

□

در ادامه می‌خواهیم مقادیر ویژه ماتریس مجموع درجات در گراف‌های کامل دوبخشی را مشخص کنیم.

قضیه ۲.۲.۳. اگر $G = K_{m,n}$ یک گراف دوبخشی کامل باشد، آن‌گاه داریم:

$$\gamma = \begin{cases} -2m, & \text{بار}(n-1) \\ -2n, & \text{بار}(m-1) \\ 2mn - m - n \pm \sqrt{(m-n)^2 + mn(m+n^2)}. \end{cases} \tag{5.3}$$

برهان. فرض کنید $G = K_{m,n}$ باشد. معادله مشخصه ماتریس مجموع درجات به صورت زیر است:

$$\phi(K_{m,n},\gamma) = det\Big(\gamma I - DS(K_{m,n})\Big) = 0$$

$$\Rightarrow \left|\begin{array}{cccc|cccc}
\gamma & -۲n & \dots & -۲n & -(m+n) & -(m+n) & \dots & -(m+n) \\
-۲n & \gamma & \dots & -۲n & -(m+n) & -(m+n) & \dots & -(m+n) \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
-۲n & -۲n & \dots & \gamma & -(m+n) & -(m+n) & \dots & -(m+n) \\
\hline
-(m+n) & -(m+n) & \dots & -(m+n) & \gamma & -۲m & \dots & -۲m \\
-(m+n) & -(m+n) & \dots & -(m+n) & -۲m & \gamma & \dots & -۲m \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
-(m+n) & -(m+n) & \dots & -(m+n) & -۲m & -۲m & \dots & \gamma
\end{array}\right| = ۰$$

در ماتریس‌های بلوکی داریم:

$$\begin{vmatrix} M & N \\ P & Q \end{vmatrix} = |M||Q - PM^{-۱}N|.$$

با استفاده از فرمول فوق داریم:

$$(\gamma+۲m)^{n-۱}(\gamma+۲n)^{m-۱}\left[\gamma^۲ - ۲(۲mn-m-n)\gamma + mn[۴(m-۱)(n-۱)-(m+n)^۲]\right] = ۰$$

بنابراین با حل این معادله خواهیم داشت:

$$\gamma = \begin{cases} -۲m & ,\ \text{مرتبه } (n-۱) \\ -۲n & ,\ \text{مرتبه } (m-۱) \\ ۲mn-m-n \pm \sqrt{(m-n)^۲ + mn(m+n)^۲}. \end{cases}$$

□

۳.۳ کران بالایی برای بزرگترین مقدار ویژه (شعاع طیفی)

در ادامه می‌خواهیم کران بالا برای بزرگترین مقدار ویژه گراف G مشخص کنیم.

قضیه ۱.۳.۳. اگر G گرافی از مرتبه n باشد، آن‌گاه همواره داریم:

$$\gamma_۱ \leq \sqrt{\frac{۲M(n-۱)}{n}}. \tag{۶.۳}$$

برهان. برای هر $i = ۲, \dots, n$ فرض کنید $a_i = ۱$ و $b_i = \gamma_i$ باشد. در این‌صورت با استفاده از نامساوی (۳.۱) داریم:

$$\Big(\sum_{i=۲}^{n}\gamma_i\Big)^۲ \leq (n-۱)\Big(\sum_{i=۲}^{n}(\gamma_i)^۲\Big) \tag{۷.۳}$$

با توجه به روابط (۱.۳) و (۲.۳) داریم:

$$\sum_{i=2}^{n}\gamma_i = -\gamma_1$$

و

$$\sum_{i=2}^{n}\gamma_i^2 = 2M - \gamma_1^2.$$

و با توجه به نامساوی (۷.۳) داریم:

$$(-\gamma_1)^2 \leq (n-1)(2M-\gamma_1^2)$$
$$\gamma_1 \leq \sqrt{\frac{2M(n-1)}{n}}.$$

□

۴.۳ انرژی مجموع درجات

تعریف ۱.۴.۳. گراف ساده G را با مجموعه رئوس $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ درنظر بگیرید. اگر $DS(G) = [d_{i,j}]$، ماتریس مجموع درجات گراف G باشد، به طوری‌که داشته باشیم:

$$d_{i,j} = \begin{cases} d_i + d_j & ; i \neq j \\ 0 & ; i = j \end{cases}.$$

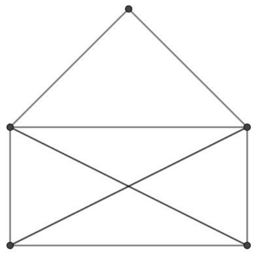
چندجمله‌ای مشخصه ماتریس $DS(G)$ به‌صورت $\phi(G,\gamma) = \det(\gamma I - DS(G))$ تعریف می‌شود. چون $DS(G)$ یک ماتریس حقیقی و متقارن است مقادیر ویژه آن اعداد حقیقی هستند و به‌صورت $\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \dots \geq \gamma_n$ مرتب می‌شوند.

انرژی مجموع درجات گراف G برابر مجموع قدرمطلق این مقادیر ویژه است، یعنی داریم:

$$E_{DS}(G) = \sum_{i=1}^{n}|\gamma_i|.$$

در این قسمت ابتدا یک مثال از انرژی مجموع درجات گراف بیان می‌کنیم، سپس به بیان قضایای مربوطه می‌پردازیم.

مثال ۱.۴.۳. گراف G را به صورت زیر در نظر بگیرید:



شکل ۱.۳: گراف G

ماتریس مجموع درجات گراف G عبارت است از:

$$DS(G) = \begin{bmatrix} ۰ & ۶ & ۵ & ۵ & ۶ \\ ۶ & ۰ & ۷ & ۷ & ۸ \\ ۵ & ۷ & ۰ & ۶ & ۷ \\ ۵ & ۷ & ۶ & ۰ & ۷ \\ ۶ & ۸ & ۷ & ۷ & ۰ \end{bmatrix}.$$

لذا معادله‌ی مشخصه‌ی ماتریس $DS(G)$ به‌صورت

$$\gamma^۵ - ۴۱۸\gamma^۳ - ۵۳۰۰\gamma^۲ - ۲۴۸۳۲\gamma - ۴۰۷۰۴ = ۰$$

به‌دست می‌آید که با حل معادله مذکور، ریشه‌های آن که مقادیر ویژه ماتریس مجموع درجات است به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\gamma_۱ = ۲۵/۷۵۹۵ \qquad , \gamma_۲ = -۴/۵۹۴۶ \qquad , \gamma_۳ = -۶ \qquad \gamma_۴ = -۷/۱۶۵۰ \qquad \gamma_۵ = -۸$$

باتوجه به این‌که $E_{DS}(G) = \sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|$ ، پس داریم:

$$E_{DS}(G) = |\gamma_۱| + |\gamma_۲| + |\gamma_۳| + |\gamma_۴| + |\gamma_۵| = ۵۱/۵۱۹.$$

با توجه به نتایج به‌دست آمده در فصل قبل دیدیم که برای گراف‌های rـ منتظم مقادیر ویژه دو حالت دارند، یک مقدار که همواره مثبت است و بقیه مقادیر که منفی هستند نیز با هم برابرند. در این‌جا می‌خواهیم انرژی مجموع درجات را برای گراف‌های rـ منتظم به‌دست آوریم. برای این کار به اثبات قضیه زیر می‌پردازیم.

قضیه ۱.۴.۳. اگر G یک گراف rـ منتظم از مرتبه n باشد، انرژی مجموع درجات آن برابر است با $۴(n-۱)r$.

برهان. فرض کنید گراف G، rـ منتظم از مرتبه n است. طبق قضیه (۱.۲.۳) گراف G فقط یک مقدار ویژه مثبت برابر $۲(n-۱)r$ دارد و بقیه مقادیر ویژه آن برابر $-۲r$ هستند. پس انرژی

مجموع درجات آن عبارت است از:

$$E_{DS}(G)=\sum_{i=1}^{n}|\gamma_i|=|2(n-1)r|+\sum_{i=2}^{n}|-2r|=2(n-1)r+2(n-1)r=4(n-1)r.$$

به این معنی که انرژی مجموع درجات برای گراف‌های rـ منتظم از درجه n فقط به مقادیر n و r بستگی دارد.

□

حال انرژی مجموع درجات را در چرخ‌ها بررسی می‌کنیم.

قضیه ۲.۴.۳. اگر W_n گراف چرخ از مرتبه n باشد آن‌گاه:

$$E_{DS}(W_n)=6(n-2)+2\sqrt{n^3+12n^2-36n+32}.$$

برهان. فرض کنید W_n یک گراف چرخ از مرتبه n باشد در این صورت ماتریس مجموع درجات مربوط به این گراف به‌صورت زیر است:

$$DS(W_n)=\begin{bmatrix} 0 & n+2 & n+2 & \cdots & n+2\\ n+2 & 0 & 6 & \cdots & 6\\ n+2 & 6 & 0 & \cdots & 6\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ n+2 & 6 & 6 & \cdots & 0\end{bmatrix}.$$

لذا چند جمله‌ای مشخصه آن به این ترتیب محاسبه می‌شود:

$$\phi(W_n,\gamma)=\det(\gamma I-DS(W_n))=\begin{vmatrix} \gamma & -(n+2) & -(n+2) & \cdots & -(n+2)\\ -(n+2) & \gamma & -6 & \cdots & -6\\ -(n+2) & -6 & \gamma & \cdots & -6\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ -(n+2) & -6 & -6 & \cdots & \gamma\end{vmatrix}.$$

حال $\frac{n+2}{\gamma}$ برابر سطر اول را به همه‌ی سطرها (از سطر دوم به بعد) اضافه می‌کنیم. در این‌صورت داریم:

$$\phi(W_n,\gamma)=\begin{vmatrix} \gamma & -(n+2) & -(n+2) & \cdots & -(n+2)\\ 0 & \gamma-\frac{(n+2)^2}{\gamma} & -6-\frac{(n+2)^2}{\gamma} & \cdots & -6-\frac{(n+2)^2}{\gamma}\\ 0 & -6-\frac{(n+2)^2}{\gamma} & \gamma-\frac{(n+2)^2}{\gamma} & \cdots & -6-\frac{(n+2)^2}{\gamma}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & -6-\frac{(n+2)^2}{\gamma} & -6-\frac{(n+2)^2}{\gamma} & \cdots & \gamma-\frac{(n+2)^2}{\gamma}\end{vmatrix}.$$

با توجه این‌که داریم:

$$\begin{vmatrix} a & b & \cdots & b \\ b & a & \cdots & b \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b & b & \cdots & a \end{vmatrix} = (a-b)^{n-1}[a+(n-1)b]$$

اگر در فرمول فوق $a = \gamma - \frac{(n+2)^2}{\gamma}$ و $b = -6 - \frac{(n+2)^2}{\gamma}$ قرار دهیم، خواهیم داشت:

$$\phi(W_n,\gamma) = \gamma(\gamma+6)^{(n-2)}\left[\gamma - \frac{(n+2)^2}{\gamma} - (n-2)6 - (n-2)\frac{(n+2)^2}{\gamma}\right].$$

با مساوی صفر قرار دادن معادله فوق، جواب‌های آن‌که مقادیر ویژه این گراف هستند به‌دست می‌آیند و با جمع قدرمطلق‌های این مقادیر ویژه انرژی گراف به‌دست می‌آید. بدین ترتیب قضیه فوق ثابت می‌شود. $\square$

در ادامه انرژی مجموع درجات را برای مسیرها مشخص می‌کنیم.

قضیه ۳.۴.۳. اگر P_n یک مسیر باشد آن‌گاه داریم:

$$E_{DS}(P_n) = 4n - 10 + 2\sqrt{4n^2 - 10n + 13}.$$

برهان. با توجه به این‌که P_n یک مسیر است پس ماتریس مجموع درجات آن عبارت است از:

$$DS(P_n) = \begin{bmatrix} 0 & 3 & 3 & \cdots & 3 & 2 \\ 3 & 0 & 4 & \cdots & 4 & 3 \\ 3 & 4 & 0 & \cdots & 4 & 3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 3 & 4 & 4 & \cdots & 0 & 3 \\ 2 & 3 & \cdots & \cdots & 3 & 0 \end{bmatrix}.$$

بنابراین چند جمله‌ای مشخصه آن به‌صورت زیر به‌دست می‌آید.

$$\phi(P_n,\gamma) = \det(\gamma I - DS(P_n)) = \begin{vmatrix} \gamma & -3 & -3 & \cdots & -3 & -2 \\ -3 & \gamma & -4 & \cdots & -4 & -3 \\ -3 & -4 & \gamma & \cdots & \cdots & -3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -3 & -4 & -4 & \cdots & \gamma & -3 \\ -2 & -3 & -3 & \cdots & -3 & \gamma \end{vmatrix}.$$

قرینه سطر اول را به سطر آخر اضافه می‌کنیم، همچنین از سطر سوم به‌بعد قرینه سطر دوم به هر سطر اضافه می‌شود. به این ترتیب داریم:

$$=\begin{vmatrix} \gamma & -3 & -3 & \cdots & -3 & -2 \\ -3 & \gamma & -4 & \cdots & -4 & -3 \\ 0 & -(4+\gamma) & (\gamma+4) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -(4+\gamma) & 0 & (\gamma+4) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -(\gamma+4) & 0 & \cdots & (\gamma+4) & 0 \\ -(\gamma+2) & -(4+\gamma) & \cdots & \cdots & \cdots & (\gamma+2) \end{vmatrix}.$$

حال ستون آخر را به ستون اول اضافه می‌کنیم. پس داریم:

$$=\begin{vmatrix} \gamma-2 & -3 & -3 & \cdots & -3 & -2 \\ -6 & \gamma & -4 & \cdots & -4 & -3 \\ 0 & -(4+\gamma) & (\gamma+4) & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & -(4+\gamma) & 0 & \cdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & -(4+\gamma) & 0 & \cdots & \cdots & (\gamma+2) \end{vmatrix},$$

و همچنین مجموع ستون‌های سوم تا ستون ماقبل آخر را به ستون دوم اضافه می‌کنیم. در این‌صورت داریم:

$$=\begin{vmatrix} \gamma-2 & -3(n-2) & \cdots & \cdots & \cdots & -2 \\ -6 & \gamma-4(n-3) & \cdots & \cdots & \cdots & -3 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma+4 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & (\gamma+2) \end{vmatrix}.$$

لذا داریم:

$$\phi(P_n,\gamma)=(\gamma+4)^{(n-3)}(\gamma+2)\left[\gamma^2-2(2n-5)\gamma-2(5n-6)\right].$$

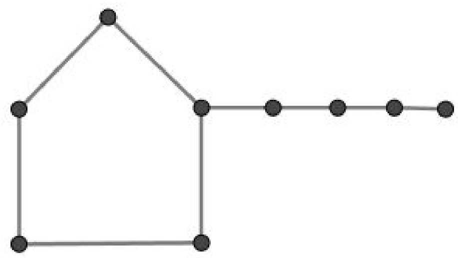
مقادیر ویژه از حل معادله فوق به‌دست می‌آید و مجموع قدرمطلق‌های آن‌ها برابر انرژی موردنظر است. به این ترتیب قضیه اثبات می‌شود. □

تعریف ۲.۴.۳. یک خانواده از گراف، را در نظر می‌گیریم به نام گراف‌های تادپل[۲] که گرافی از

[۲] Tadpole

مرتبه $n+k$ است که از ترکیب یک دور C_n با یک مسیر P_{k+1} به دست می‌آید و $T_{n,k}$ نامیده می‌شود.

مثال ۲.۴.۳. شکل (۲.۳) یک گراف $T_{5,4}$ را نشان می‌دهد.



شکل ۲.۳: گراف تادپل $T_{5,4}$

قضیه ۴.۴.۳. انرژی مجموع درجات گراف تادپل $T_{n,k}$ عبارت است از:

$$E_{DS}(T_{n,k}) = 4(n+k-3) + |p| + |q| + |s|,$$

جایی که p و q و s ریشه‌های معادله زیر هستند:

$$\gamma^3 - 4(n+k-3)\gamma^2 - [34n + 34k - 52]\gamma + [48 - 56n - 56k] = 0.$$

برهان. ماتریس مجموع درجات گراف $T_{n,k}$ به‌صورت زیر است:

$$DS(T_{n,k}) = \begin{bmatrix} 0 & 5 & 5 & \cdots & 5 & 4 \\ 5 & 0 & 4 & \cdots & 4 & 3 \\ 5 & 4 & 0 & \cdots & 4 & 3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 5 & 4 & 4 & \cdots & 0 & 3 \\ 4 & 3 & \cdots & \cdots & 3 & 0 \end{bmatrix}.$$

بنابراین چندجمله ای مشخصه این ماتریس به صورت زیر می باشد.

$$\phi(T_{n,k},\gamma) = det\Big(\gamma I - DS(T_{n,k})\Big) = \begin{vmatrix} \gamma & -5 & -5 & \cdots & -5 & -4 \\ -5 & \gamma & -4 & \cdots & -4 & -3 \\ -5 & -4 & \gamma & \cdots & -4 & -3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -5 & -4 & -4 & \cdots & \gamma & -3 \\ -4 & -3 & -3 & \cdots & -3 & \gamma \end{vmatrix}.$$

حال قرینه سطر دوم را به بقیه سطرها اضافه می‌کنیم. لذا داریم:

$$\begin{vmatrix} \gamma+5 & -(\gamma+5) & -1 & \cdots & -1 & -1 \\ -5 & \gamma & -4 & \cdots & -4 & -3 \\ 0 & -(\gamma+4) & \gamma+4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & -(\gamma+4) & 0 & \cdots & \gamma+4 & 0 \\ 1 & -(\gamma+3) & 1 & \cdots & 1 & \gamma+3 \end{vmatrix}.$$

سطر اول را به سطر آخر اضافه می‌کنیم.در این صورت داریم:

$$\begin{vmatrix} \gamma+5 & -(\gamma+5) & -1 & \cdots & -1 & -1 \\ -5 & \gamma & -4 & \cdots & -4 & -3 \\ 0 & -(\gamma+4) & \gamma+4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & -(\gamma+4) & 0 & \cdots & \gamma+4 & 0 \\ \gamma+6 & -2(\gamma+4) & 0 & \cdots & 0 & \gamma+2 \end{vmatrix}.$$

مجموع ستون سوم تا ستون آخر را به ستون دوم اضافه می‌کنیم. لذا داریم:

$$\begin{vmatrix} \gamma+5 & -\gamma-5-(n+k-2) & -1 & \cdots & -1 & -1 \\ -5 & \gamma-4(n+k-3)-3 & -4 & \cdots & -4 & -3 \\ 0 & 0 & \gamma+4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma+4 & 0 \\ \gamma+6 & -(\gamma+6) & 0 & \cdots & 0 & \gamma+2 \end{vmatrix}.$$

لذا داریم:

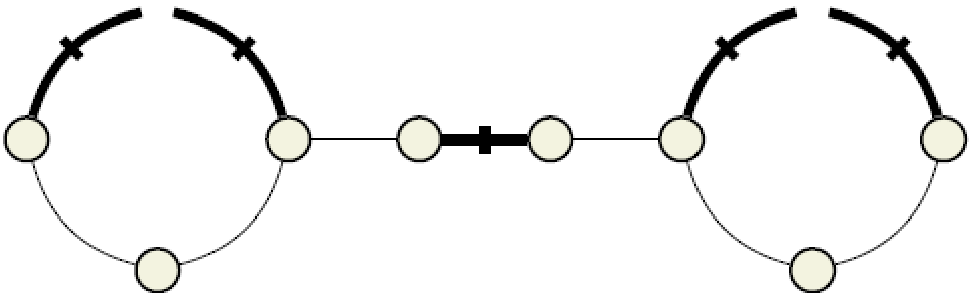
$$(\gamma+4)^{n+k-3}(\gamma+2)\left[\gamma^2+\gamma(4n+4k-15)-25(n+k-4)+10\right]=0$$

که جواب‌های این معادله مقادیر ویژه هستند و قضیه اثبات می‌شود.

□

تعریف ۳.۴.۳. گراف دامبل که با $D_{a,b,c}$ نمایش داده می‌شود تشکیل شده از دو گراف دور C_a و C_b با رئوس مجزا و یک مسیر $P_{c+3}(c \geq -1)$ با این شرط که رئوس انتهایی از دورها باشند. این گراف شامل $a+b+c+1$ رأس و $a+b+c+2$ یال است.

شکل (۳.۳) یک دامبل گراف است.



شکل ۳.۳: گراف دامبل $D_{a,b,c}$

دو گراف مجزای H_1 و H_2 را درنظر بگیرید. فرض کنید $U=\{u_1,u_2,\ldots,u_t\}$ قسمتی از H_1و $W=\{w_1,w_2,\ldots,w_t\}$ قسمتی از H_2 باشند. گراف G با یکی کردن w_i,u_i $(1\leq i\leq t)$ ازH_1و H_2به‌دست می‌آید، پس G یک هم‌پوشانی از H_1 وH_2 در K_t است. معمولاً هم‌پوشانی عمومی را با $H_1\circ H_2$ نشان می‌دهیم. در این‌جا اگر $t=1$ باشد هم‌پوشانی را رأسی نامیده و با $H_1 o_v H_2$ نشان داده و اگر $t=2$ باشد هم‌پوشانی یالی می‌نامیم و با $H_1 o_e H_2$ نشان می‌دهیم.

حال به محاسبه انرژی این گراف‌ها می‌پردازیم. ابتدا انرژی گراف دامبل و سپس هم‌پوشانی‌ها را به‌دست می‌آوریم.

قضیه ۵.۴.۳. انرژی مجموع درجات گراف دامبل $D_{a,b,c}$ به‌صورت زیر می‌باشد:

$$E_{DS}(D_{a,b,c})=\left[4(a+b+c)-2+2\sqrt{4(a+b+c)^2+22(a+b+c)-1}\right].$$

برهان. ماتریس مجموع درجات $D_{a,b,c}$ به‌صورت زیر می‌باشد.

$$DS(D_{a,b,c})=\begin{bmatrix} 0 & 6 & 5 & \cdots & 5 & 5\\ 6 & 0 & 5 & \cdots & 5 & 5\\ 5 & 5 & 0 & \cdots & 4 & 4\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 5 & 5 & 4 & \cdots & 0 & 4\\ 5 & 5 & 4 & \cdots & 4 & 0 \end{bmatrix}.$$

چندجمله‌ای مشخصه آن به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\phi(D_{a,b,c},\gamma)=det\big(\gamma I-DS(D_{a,b,c})\big)=\begin{vmatrix}\gamma & -6 & -5 & \cdots & -5 & -5\\ -6 & \gamma & -5 & \cdots & -5 & -5\\ -5 & -5 & \gamma & \cdots & -4 & -4\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ -5 & -5 & -4 & \cdots & \gamma & -4\\ -5 & -5 & -4 & \cdots & -4 & \gamma\end{vmatrix}.$$

قرینه سطر اول را به سطر دوم و قرینه سطر سوم را بقیه سطرها اضافه می‌کنیم. در این صورت داریم:

$$\begin{vmatrix}\gamma & -6 & -5 & \cdots & -5 & -5\\ -(\gamma+6) & \gamma+6 & 0 & \cdots & 0 & \\ -5 & -5 & \gamma & \cdots & -4 & -4\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & -(\gamma+4) & \cdots & \gamma+4 & 0\\ 0 & 0 & -(\gamma+4) & \cdots & 0 & \gamma+4\end{vmatrix}.$$

حال مجموع ستون‌های چهارم به بعد را به ستون سوم اضافه می‌کنیم وستون دوم را به ستون اول اضافه می‌کنیم. لذا داریم:

$$\begin{vmatrix}\gamma-6 & -6 & -5(a+b+c-2) & \cdots & -5 & -5\\ 0 & \gamma+6 & 0 & \cdots & 0 & \\ 0 & -5 & \gamma-4(a+b+c-3) & \cdots & -4 & -4\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma+4 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \gamma+4\end{vmatrix}.$$

به این ترتیب مقادیر ویژه از معادله زیر به‌دست می‌آید و قضیه اثبات می‌شود.

$$(\gamma+4)^{(a+b+c-3)}\Big[(\gamma-6)\big(\gamma^2-4\gamma(a+b+c-3)+6\gamma-24(a+b+c-3)\big)\Big]=0$$

□

در این قسمت به محاسبه انرژی مجموع درجات هم‌پوشانی گراف‌های کامل و دورها می‌پردازیم.

قضیه ۶.۴.۳. انرژی مجموع درجات هم‌پوشانی رأسی دو گراف rـ منظم G_1 و G_2 از مرتبه n_1 و n_2 عبارت است از:

$$E_{DS}(G_1\circ_v G_2)=2r\left[n_1+n_2-3+\sqrt{n_1^2+n_2^2+3n_2+2n_1n_2-6n_1-9}\right].$$

برهان. ماتریس مجموع درجات هم‌پوشانی $G_1 \circ_v G_2$ به‌صورت زیر می‌باشد:

$$DS(G_1 \circ_v G_2) = \left[\begin{array}{cccc|cccc} 0 & 3r & \cdots & 3r & 3r & \cdots & \cdots & 3r \\ 3r & 0 & \cdots & 2r & 2r & \cdots & \cdots & 2r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 3r & 2r & \cdots & 0 & 2r & \cdots & \cdots & 2r \\ \hline 3r & 2r & \cdots & 2r & 0 & 2r & \cdots & 2r \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & 2r & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ 3r & 2r & \cdots & 2r & 2r & \cdots & \cdots & 0 \end{array}\right]$$

و چندجمله‌ای مشخصه آن چنین به‌دست می‌آید:

$$\phi(G_1 \circ_v G_2, \gamma) = \left|\begin{array}{cccc|cccc} \gamma & -3r & \cdots & -3r & -3r & \cdots & \cdots & -3r \\ -3r & \gamma & \cdots & -2r & -2r & \cdots & \cdots & -2r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -3r & -2r & \cdots & \gamma & -2r & \cdots & \cdots & -2r \\ \hline -3r & -2r & \cdots & -2r & -2r & \cdots & -2r & \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & -2r & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ -3r & \cdots & \cdots & -2r & -2r & \cdots & \cdots & \gamma \end{array}\right|$$

از سطر سوم تا سطرآخر یعنی سطر $(n_1 + n_2 - 1)$ام، قرینه سطر دوم را به این سطرها اضافه می‌کنیم. لذا داریم:

$$\phi(G_1 \circ_v G_2, \gamma) = \left|\begin{array}{ccccc|cccc} \gamma & -3r & -3r & \cdots & -3r & -3r & -3r & \cdots & -3r \\ -3r & \gamma & -2r & \cdots & -2r & -2r & \cdots & \cdots & -2r \\ \vdots & -(\gamma+2r) & \gamma+2r & 0 & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \gamma+2r & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -3r & -(\gamma+2r) & \cdots & \cdots & \gamma+2r & -2r & \cdots & \cdots & -2r \\ \hline 0 & -(\gamma+2r) & 0 & \cdots & 0 & \gamma+2r & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & -(\gamma+2r) & 0 & \cdots & 0 & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & -(\gamma+2r) & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \gamma+2r \end{array}\right|$$

با افزودن مجموع ستون‌های سوم به بعد به ستون دوم دترمینان زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{vmatrix} \gamma & -3r(n_1+n_2-2) & -3r & -3r & \cdots & -3r \\ -3r & \gamma-2r(n_1+n_2-2) & -2r & -2r & \cdots & -2r \\ 0 & 0 & \gamma+2r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma+2r & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma+2r \end{vmatrix} \times \left|(\gamma+2r)I_{n_2-1}\right|$$

چون بلوک پایینی صفر است، به‌طور مستقیم بسط داده می‌شود. لذا داریم:

$$\begin{aligned} &=(\gamma+2r)^{n_2-1}(\gamma+2r)^{n_1-2}\left[\gamma^2-2r(n_1+n_2-3)\gamma-9r^2(n_1+n_2-2)\right] \\ &=(\gamma+2r)^{n_1+n_2-3}\left[\gamma^2-2r(n_1+n_2-3)\gamma-9r^2(n_1+n_2-2)\right] \end{aligned}$$

و با محاسبه مقادیر ویژه، انرژی موردنظر به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$E_{DS}(G_1 \circ_v G_2)=2r\left[(n_1+n_2-3)+\sqrt{n_1^2+n_2^2+3n_2+2n_1n_2-6n_1-9}\right].$$

□

مثال ۳.۴.۳. فرض کنید گراف های G_1 و G_2گراف هایی $r-$منتظم از مرتبه های به ترتیب $n_1=3$ و $n_2=4$ باشند در این‌صورت انرژی مجموع درجات هم‌پوشانی $G_1 \circ_v G_2$ عبارت است از:

$$E_{DS}(G_1 \circ_v G_2)=47/1241$$

قضیه ۷.۴.۳. اگر G_1 و G_2دو گراف rـ منظم از مرتبه n_1 و n_2 باشند، انرژی مجموع درجات هم‌پوشانی یالی آن‌ها یعنی $G_1 \circ_e G_2$ به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} E_{DS}(G_1 \circ_e G_2)=&\,2(3r-1)(n_1+n_2-5+4r-2+\{[(4r-2)+(3r-1)(n_1+n_2-5)^2]^2 \\ &+8(3r-1)^2(n_1+n_2-4)-4(4r-2)(3r-1)(n_1+n_2-5)\}). \end{aligned}$$

برهان. ماتریس مجموع درجات هم‌پوشانی یالی $G_1 \circ_e G_2$ به‌صورت زیر می‌باشد.

$$DS(G_1 \circ_e G_2)=\begin{bmatrix} 0 & 4r-2 & 3r-1 & \cdots & 3r-1 & 3r-1 & \cdots & \cdots & 3r-1 \\ 4r-2 & 0 & 3r-1 & \cdots & 3r-1 & 3r-1 & \cdots & \cdots & 3r-1 \\ 3r-1 & 3r-1 & 0 & \cdots & 3r-1 & 3r-1 & \cdots & \cdots & 3r-1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 3r-1 & 3r-1 & 3r-1 & \cdots & 0 & 3r-1 & \cdots & \cdots & 3r-1 \\ 3r-1 & 3r-1 & 3r-1 & \cdots & 3r-1 & 0 & \cdots & \cdots & 3r-1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 3r-1 & 3r-1 & 3r-1 & \cdots & 3r-1 & 3r-1 & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

به این ترتیب چندجمله‌ای مشخصه آن عبارت است از:

$$\phi(G_1 \circ_e G_2,\gamma)\begin{vmatrix}
\gamma & -(4r-2) & -(3r-1) & \cdots & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & \cdots & -(3r-1)\\
-(4r-2) & \gamma & -(3r-1) & \cdots & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & \cdots & -(3r-1)\\
-(3r-1) & -(3r-1) & \gamma & \cdots & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & \cdots & -(3r-1)\\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\
-(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & \gamma & -(3r-1) & \cdots & \cdots & -(3r-1)\\
-(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & -(3r-1) & \gamma & \cdots & \cdots & -(3r-1)\\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\
-(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & \cdots & \gamma
\end{vmatrix}$$

از سطر چهارم تا سطر آخر یعنی سطر (n_1+n_2-2)ام، قرینه سطر سوم را به هر سطر اضافه می‌کنیم.

$$=\left|\begin{array}{ccccc|cccc}
\gamma & -(4r-2) & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & -(3r-1)\\
-(4r-2) & \gamma & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & -(3r-1)\\
-(3r-1) & -(3r-1) & \gamma & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & -(3r-1) & \cdots & -(3r-1)\\
0 & 0 & -(\gamma+3r-1) & (\gamma+3r-1) & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\\
0 & 0 & -(\gamma+3r-1) & 0 & (\gamma+3r-1) & 0 & 0 & \cdots & 0\\
\hline
0 & 0 & -(\gamma+3r-1) & \cdots & 0 & (\gamma+3r-1) & 0 & \cdots & 0\\
0 & 0 & -(\gamma+3r-1) & \cdots & 0 & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\
0 & 0 & -(\gamma+3r-1) & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & (\gamma+3r-1)
\end{array}\right|$$

با افزودن مجموع ستون‌های چهارم به بعد به ستون سوم خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
=&\begin{vmatrix}
\gamma & -(4r-2) & -(n_1+n_2-4)(3r-1)\\
-(4r-2) & \gamma & -(n_1+n_2-4)(3r-1)\\
-(3r-1) & -(3r-1) & \gamma-(n_1+n_2-5)(3r-1)
\end{vmatrix} X \left|(\gamma+3r-1)I_{n_1+n_2-5}\right|\\
=&(\gamma+3t-1)^{n_1+n1-2-5}(\gamma+4r-2)\Big[\gamma^2-\{(4r-2)+(3r-1)(n_1+n1-2-5)\}\gamma\\
&+(4r-2)+(3r-1)(n_1+n1-2-5)-2(3r-1)^2(n_1+n_2-4)\Big].
\end{aligned}$$

و همانند قضایای قبل ثابت می‌شود. □

مثال ۴.۴.۳. فرض کنید گراف های G_1 و G_2 به ترتیب گراف هایی rـ منتظم از مرتبه $n_1=3$ و $n_2=4$ باشند. اگر $r=2$ باشد، آن‌گاه انرژی مجموع درجات هم‌پوشانی یالی G_1 و G_2 عبارت است از:

$$E_{DS}(G_1 \circ_v G_2)=38/5764.$$

قضیه ۸.۴.۳. انرژی مجموع درجات هم‌پوشانی رأسی دورهای C_m و C_n عبارت است از:

$$E_{DS}(C_m \circ_v C_n)=4\sqrt{(m+n-3)^2+9(m+n-2)}+4(m+n-2).$$

برهان. فرض کنید C_m و C_n دورهایی از مرتبه m و n باشند. ماتریس مجموع درجات هم‌پوشانی رأسی آن‌ها را با $DS(C_m \circ_v C_n)$ نشان داده و به‌صورت زیر می‌نویسیم:

$$DS(C_m \circ_v C_n) = \begin{bmatrix} ۰ & ۶ & ۶ & ۶ & \cdots & ۶ \\ ۶ & ۰ & ۴ & ۴ & \cdots & ۴ \\ ۶ & ۴ & ۰ & ۴ & \cdots & ۴ \\ ۶ & ۴ & ۴ & ۰ & \cdots & ۴ \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ ۶ & ۴ & ۴ & ۴ & \cdots & ۰ \end{bmatrix}.$$

ولذا چند جمله‌ای مشخصه آن عبارت است از:

$$\phi(C_m \circ_v C_n, \gamma) = det\Big(\gamma I - DS(C_m \circ_v C_n)\Big) = \begin{vmatrix} \gamma & -۶ & -۶ & -۶ & \cdots & -۶ \\ -۶ & \gamma & -۴ & -۴ & \cdots & -۴ \\ -۶ & -۴ & \gamma & -۴ & \cdots & -۴ \\ -۶ & -۴ & -۴ & \gamma & \cdots & -۴ \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -۶ & -۴ & -۴ & -۴ & \cdots & \gamma \end{vmatrix}.$$

قرینه سطر دوم را به سطر سوم و سطرهای بعدی اضافه می‌کنیم. لذا داریم:

$$\begin{vmatrix} \gamma & -۶ & -۶ & -۶ & \cdots & -۶ \\ -۶ & \gamma & -۴ & -۴ & \cdots & -۴ \\ ۰ & -(\gamma+۴) & \gamma+۴ & ۰ & \cdots & ۰ \\ ۰ & -(\gamma+۴) & ۰ & \gamma+۴ & \cdots & ۰ \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ ۰ & -(\gamma+۴) & ۰ & ۰ & \cdots & \gamma+۴ \end{vmatrix}.$$

ستون سوم ستون‌های بعد از آن را با هم جمع می‌کنیم و به ستون دوم اضافه می‌کنیم. بنابراین داریم:

$$\begin{vmatrix} \gamma & -۶(m+n-۲) & -۶ & -۶ & \cdots & -۶ \\ -۶ & \gamma-۴(m+n-۳) & -۴ & -۴ & \cdots & -۴ \\ ۰ & ۰ & \gamma+۴ & ۰ & \cdots & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۰ & \gamma+۴ & \cdots & ۰ \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ ۰ & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots & \gamma+۴ \end{vmatrix}.$$

پس مقادیر ویژه از معادله زیر به‌دست می‌آید.

$$(\gamma+۴)^{m+n-۳}\Big[\gamma\big(\gamma-۴(m+n-۳)-۳۶(m+n-۲)\big)\Big] = ۰.$$

به این ترتیب قضیه اثبات می‌شود. □

قضیه ۹.۴.۳. انرژی مجموع درجات هم‌پوشانی یالی دورهای C_m و C_n به‌صورت زیر می‌باشد:

$$E_{(C_m \circ_e C_n)} = ۲(۲m + ۲n - ۷) + ۲\sqrt{۴m^۲ + ۴n^۲ - ۲۰m - ۲۰n + ۸mn + ۴۱}.$$

برهان. ماتریس مجموع درجات هم‌پوشانی یالی دورهای C_m و C_n از مرتبه‌های m و n عبارت است از:

$$DS(C_m \circ_e C_n) = \begin{bmatrix} ۰ & ۶ & ۴ & ۴ & \dots & ۴ \\ ۶ & ۰ & ۴ & ۴ & \dots & ۴ \\ ۴ & ۴ & ۰ & ۴ & \dots & ۴ \\ ۴ & ۴ & ۴ & ۰ & \dots & ۴ \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ ۴ & ۴ & ۴ & ۴ & \dots & ۰ \end{bmatrix}.$$

و هم‌چون قضایای قبل انرژی موردنظر با توجه به این ماتریس به‌دست می‌آید. □

۵.۳ کران‌هایی از انرژی مجموع درجات

در این بخش قصد داریم کران‌هایی برای انرژی مجموع درجات گراف براساس پارامترهای مختلف مشخص کنیم. به این منظور به اثبات قضایای زیر می‌پردازیم.

قضیه ۱.۵.۳. اگر G یک گراف از مرتبه n باشد و با فرض اینکه $M = \sum_{۱ \leq i < j \leq n} (d_i + d_j)^۲$ باشد، آن‌گاه داریم:

$$\sqrt{۲M} \leq E_{DS}(G) \leq \sqrt{۲Mn}. \qquad (۸.۳)$$

برهان. با جای‌گذاری $a_i = ۱$ و $b_i = |\gamma_i|$ در نامساوی (۳.۱) داریم:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i| \right)^۲ &\leq n \sum_{i=۱}^{n} \gamma_i^۲ \\ [E_{DS}(G)]^۲ &\leq n(۲M) \\ E_{DS}(G) &\leq \sqrt{۲Mn}. \qquad (۹.۳) \end{aligned}$$

به این ترتیب کران بالای مورد نظر به دست می‌آید. حال به اثبات کران پایین آن می‌پردازیم.

طبق تعریف انرژی مجموع درجات گراف داریم:

$$\begin{aligned}[E_{DS}(G)]^۲ &= \left(\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|\right)^۲ \\ &\geq \sum |\gamma_i|^۲ \\ &= ۲M.\end{aligned}$$

در نتیجه داریم:

$$E_{DS}(G) \geq \sqrt{۲M}. \tag{۱۰.۳}$$

و از ترکیب دو نامساوی (۹.۳) و (۱۰.۳) داریم:

$$\sqrt{۲M} \leq E_{DS}(G) \leq \sqrt{۲Mn}.$$

□

قضیه ۲.۵.۳. اگر G یک گراف از مرتبه n باشد. با فرض اینکه $M = \sum_{۱\leq i<j\leq n}(d_i + d_j)^۲$ و $\triangle$ حاصلضرب قدر مطلق‌های مقادیر ویژه ماتریس $DS(G)$ باشند، آن‌گاه داریم:

$$E_{DS}(G) \geq \sqrt{۲M + n(n-۱)\triangle^{\frac{۲}{n}}}. \tag{۱۱.۳}$$

برهان. با استفاده از تعریف انرژی مجموع درجات گراف داریم:

$$\begin{aligned}[E_{DS}(G)]^۲ &= \left(\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|\right)^۲ \\ &= \sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|^۲ + ۲\sum_{i<j} |\gamma_i||\gamma_j|,\end{aligned}$$

که با استفاده از تساوی (۲.۳) داریم:

$$\begin{aligned} &= ۲M + ۲\sum_{i<j} |\gamma_i||\gamma_j| \\ &= ۲M + \sum_{i\neq j} |\gamma_i||\gamma_j|. \end{aligned} \tag{۱۲.۳}$$

در اعداد نامنفی همواره میانگین حسابی بزرگتر از میانگین هندسی است. لذا داریم:

$$\begin{aligned}\frac{۱}{n(n-۱)}\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i||\gamma_j| &\geq (\Pi_{i\neq j}|\gamma_i||\gamma_j|)^{\frac{۱}{n(n-۱)}} \\ &= \left(\Pi_{i=۱}^{n}|\gamma_i|^{۲(n-۱)}\right)^{\frac{۱}{n(n-۱)}} \\ &= \Pi_{i=۱}^{n}|\gamma_i|^{\frac{۲}{n}} \\ &= \triangle^{\frac{۲}{n}}.\end{aligned}$$

بنابراین داریم:

$$\sum_{i=1}^{n} |\gamma_i||\gamma_j| \geq n(n-1) \bigtriangleup^{\frac{2}{n}} . \tag{۱۳.۳}$$

حال با استفاده از روابط (۱۲.۳) و (۱۳.۳) می‌توان نوشت:

$$[E_{DS}(G)]^2 \geq 2M + n(n-1)\bigtriangleup^{\frac{2}{n}}$$
$$\Longrightarrow E_{DS}(G) \geq \sqrt{2M + n(n-1)\bigtriangleup^{\frac{2}{n}}}.$$

□

قضیه ۳.۵.۳. اگر G یک گراف از مرتبه n و اندازه m باشد و با فرض اینکه $M = \sum_{1\leq i<j\leq n}(d_i + d_j)^2$ باشد، آن‌گاه داریم:

$$E_{DS}(G) \geq \sqrt{2Mn - \frac{n^2}{4}(\gamma_1 - \gamma_n)^2}, \tag{۱۴.۳}$$

جایی که γ_1 و γ_n بزرگترین و کوچکترین مقادیر ویژه هستند.

برهان. فرض کنید $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$ مقادیر ویژه ماتریس $DS(G)$ هستند، با جایگزینی $a_i = 1$ و $b_i = |\gamma_i|$ در نامساوی (۵.۱) داریم:

$$\sum_{i=1}^{n} 1^2 \sum_{i=1}^{n} |\gamma_i|^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} |\gamma_i|\right)^2 \leq \frac{n^2}{4}(\gamma_1 - \gamma_n)^2$$
$$2Mn - (E_{DS}(G))^2 \leq \frac{n^2}{4}(\gamma_1 - \gamma_n)^2$$
$$E_{DS}(G) \geq \sqrt{2Mn - \frac{n^2}{4}(\gamma_1 - \gamma_n)^2}.$$

□

قضیه ۴.۵.۳. فرض کنید G یک گراف باشد و مقادیر ویژه ماتریس $DS(G)$، صفر نباشند. با فرض اینکه $M = \sum_{1\leq i<j\leq n}(d_i + d_j)^2$ باشد، در این‌صورت داریم:

$$E_{DS}(G) \geq \frac{2\sqrt{\gamma_1\gamma_n}\sqrt{2Mn}}{\gamma_1 + \gamma_n}, \tag{۱۵.۳}$$

که در این فرمول γ_1 و γ_n به ترتیب بزرگترین و کوچکترین مقادیر ویژه هستند.

برهان. فرض کنید $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$ مقادیر ویژه از ماتریس $DS(G)$ باشند. با فرض این‌که در

نامساوی (۴.۱) مقادیر $b_i = ۱$ و $a_i = |\gamma_i|$ باشند، داریم:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|^۲ \sum_{i=۱}^{n} ۱^۲ \leq& \frac{۱}{۴}\left(\sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_۱}} + \sqrt{\frac{\gamma_۱}{\gamma_n}}\right)^۲ \left(\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|\right)^۲ \\
۲Mn \leq& \frac{۱}{۴}\left(\frac{(\gamma_۱+\gamma_n)^۲}{\gamma_۱\gamma_n}\right)(E_{DS}(G))^۲ \\
(E_{DS}(G))^۲ \geq& \frac{۴(\gamma_۱\gamma_n)(۲Mn)}{(\gamma_۱+\gamma_n)^۲} \\
E_{DS}(G) \geq& \frac{۲\sqrt{\gamma_۱\gamma_n}\sqrt{۲Mn}}{\gamma_۱+\gamma_n}.
\end{aligned}$$

□

قضیه ۵.۵.۳. فرض کنید G یک گراف از مرتبه n و اندازه m باشد. اگر $\gamma_۱, \gamma_۲, \ldots, \gamma_n$ مقادیر ویژه از ماتریس $DS(G)$ باشند و $M = \sum_{۱\leq i<j\leq n}(d_i+d_j)^۲$ باشد، آن‌گاه داریم:

$$E_{DS}(G) \geq \sqrt{۲Mn - \alpha(n)(|\gamma_۱| - |\gamma_n|)^۲}, \tag{۱۶.۳}$$

جایی که $\alpha(n) = n\left[\frac{n}{۲}\right]\left(۱ - \frac{۱}{n}[\frac{n}{۲}]\right)$ می‌باشد.

برهان. فرض کنید $\gamma_۱, \gamma_۲, \ldots, \gamma_n$ مقادیر ویژه ماتریس $DS(G)$ باشند، با جای‌گذاری $a_i = |\gamma_i| = b_i$ و $a = |\gamma_n| = b$ و $A = |\gamma_۱| = B$ در نامساوی (۶.۱) داریم:

$$\left| n\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|^۲ - \left(\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|\right)^۲ \right| \leq \alpha(n)(|\gamma_۱| - |\gamma_n|)^۲ \tag{۱۷.۳}$$

با توجه به این‌که می‌دانیم $E_{DS}(G) = \sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|$ و $\sum_{i=۱}^{n} |\gamma_i|^۲ = ۲M$ است. پس با قرار دادن این مقادیر در نامساوی (۱۴.۳) داریم:

$$۲Mn - (E_{DS}(G))^۲ \leq \alpha(n)\left(|\gamma_۱| - |\gamma_n|\right)^۲,$$

پس با یک محاسبه ساده نامساوی زیر به‌دست می‌آید:

$$E_{DS}(G) \geq \sqrt{۲Mn - \alpha(n)\left(|\gamma_۱| - |\gamma_n|\right)^۲}.$$

□

نتیجه ۱.۵.۳. اگر $\alpha(n) \leq \frac{n^۲}{۴}$ باشد، آن‌گاه طبق نامساوی (۱۶.۳) داریم:

$$E_{DS}(G) \geq \sqrt{۲Mn - \frac{n^۲}{۴}\left(|\gamma_۱| - |\gamma_n|\right)^۲}. \tag{۱۸.۳}$$

که این نامساوی نشان می‌دهد نامساوی (۱۶.۳) از نامساوی (۱۴.۳) قوی‌تر است.

قضیه ۶.۵.۳. فرض کنید G یک گراف از مرتبه n و اندازه m باشد و با فرض اینکه $M = \sum_{1\leq i<j\leq n}(d_i+d_j)^2$ باشد. اگر $\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_n$ مقادیر ویژه از ماتریس $DS(G)$ باشند، آن‌گاه داریم:

$$E_{DS}(G) \geq \frac{|\gamma_1||\gamma_n|n + 2M}{|\gamma_1| + |\gamma_n|} \tag{۱۹.۳}$$

که در این فرمول γ_1 و γ_n به ترتیب کمترین و بیشترین مقادیر γ_i هستند.

برهان. فرض کنید $\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_n$ مقادیر ویژه ماتریس $DS(G)$ باشند، با جای‌گذاری $b_i = |\gamma_i|$ و $a_i = 1$ و $r = |\gamma_n|$ و $R = |\gamma_1|$ در نامساوی (۷.۱) داریم:

$$\sum_{i=1}^{n} |\gamma_i|^2 + |\gamma_1||\gamma_n| \sum_{i=1}^{n} 1 \leq (|\gamma_1| + |\gamma_n|) \sum_{i=1}^{n} |\gamma_i|,$$

با توجه به این‌که $E_{DS}(G) = \sum_{i=1}^{n} |\gamma_i|$ و $\sum_{i=1}^{n} |\gamma_i|^2 = 2M$ هستند و قرار دادن در نامساوی فوق داریم:

$$\begin{aligned} 2M + |\gamma_1||\gamma_n|n &\leq (|\gamma_1| + |\gamma_n|)\, E_{DS}(G), \\ E_{DS}(G) &\geq \frac{|\gamma_1||\gamma_n|n + 2M}{|\gamma_1| + |\gamma_n|}. \end{aligned}$$

□

فصل ۴

انرژی مجموع خروج از مرکز

۱.۴ مقدمه

در این فصل نوع مشابه‌ای از انرژی مجموع درجات به نام انرژی مجموع خروج از مرکز را بررسی می‌کنیم. برای این کار ابتدا تعریف مختصری از این انرژی خواهیم داشت، سپس با یک مثال این انرژی را محاسبه می‌کنیم و در ادامه کران‌هایی برای مقادیر ویژه و انرژی مجموع خروج از مرکز مشخص می‌کنیم.نتایج این فصل برگرفته از مرجع [۳۳] می‌باشد.

۲.۴ انرژی مجموع خروج از مرکز

تعریف ۱.۲.۴. فرض کنید G یک گراف ساده از مرتبه n و اندازه m باشد. طول کوتاه‌ترین مسیر بین v_i و v_j در گراف G را فاصله بین دو رأس v_i و v_j می‌نامیم. برای رأس v_i بزرگ‌ترین فاصله رأس v_i از سایر رئوس گراف G را خروج از مرکز رأس v_i نامیده و با $e_i = ecc(v_i)$ نشان می‌دهیم.

ماتریس مجموع خروج از مرکز گراف G را به صورت $ES(G) = [a_{ij}]$ نمایش داده، بطوری که:

$$a_{ij} = \begin{cases} e_i + e_j & , \ i \neq j \\ \circ & , \ i = j \end{cases}$$

چند جمله‌ای مشخصه ماتریس مجموع خروج از مرکز به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\phi(G,\mu) = det(\mu I - ES(G)).$$

از آنجا که $ES(G)$ یک ماتریس متقارن با درایه های حقیقی است، ریشه‌های $\phi(G,\mu) = ۰$ اعداد حقیقی هستند که به صورت $\mu_۱ \geq \mu_۲ \geq ... \geq \mu_n$ مرتب می‌شوند و $\mu_۱$ بزرگ‌ترین و μ_n کوچک‌ترین مقدارهای ویژه هستند. اگر مقادیر ویژه $\mu_۱, \mu_۲, ..., \mu_n$ به ترتیب دارای تکرار $k_۱, k_۲, ..., k_n$ باشند، طیف گراف G به صورت زیر نوشته می‌شود:

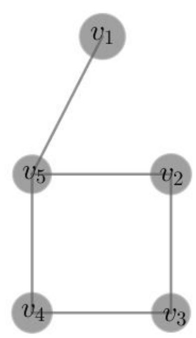
$$Spec(G) = \begin{pmatrix} \mu_۱ & \mu_۲ & ... & \mu_n \\ k_۱ & k_۲ & ... & k_n \end{pmatrix}.$$

به این ترتیب انرژی مجموع خروج از مرکز گراف G ، به صورت مجموع قدرمطلق این مقادیر ویژه تعریف می شود. یعنی داریم:

$$E_{ES}(G) = \sum_{i=۱}^{n} |\mu_i|.$$

حال به مثالی در این زمینه می‌پردازیم.

مثال ۱.۲.۴. فرض کنید گراف G به صورت زیر باشد:



شکل ۱.۴: گراف G

ماتریس مجموع خروج از مرکز گراف G عبارت است از:

$$ES(G) = \begin{bmatrix} ۰ & ۵ & ۶ & ۵ & ۵ \\ ۵ & ۰ & ۵ & ۴ & ۴ \\ ۶ & ۵ & ۰ & ۵ & ۵ \\ ۵ & ۴ & ۵ & ۰ & ۴ \\ ۵ & ۴ & ۵ & ۴ & ۰ \end{bmatrix}$$

چند جمله‌ای مشخصه آن بدین صورت است:

$$\phi(G,\mu)=(\mu+4)^2(\mu+6)(\mu^2-14\mu-102).$$

با حل این معادله، مقادیر ویژه این ماتریس بدست می‌آید که به قرار زیر می‌باشد.

$$\mu_1=19/2882 \quad ,\ \mu_2=-4 \quad ,\ \mu_3=-4 \quad ,\ \mu_4=-5/2882 \quad ,\ \mu_5=-6.$$

بنابراین طبق تعریف، انرژی مجموع خروج از مرکز گراف G برابر است با:

$$E_{ES}(G)=38/5764.$$

۳.۴ کران‌هایی برای بزرگ‌ترین مقادیر ویژه ماتریس مجموع خروج از مرکز

فرض کنید G یک گراف و $ES(G)$ ماتریس مجموع خروج از مرکز گراف G باشد. ازآنجایی که $tr(ES(G))=0$ است، برای مقادیر ویژه مجموع‌خروج از مرکز داریم:

$$\sum_{i=1}^{n}\mu_i=0 \tag{۱.۴}$$

$$\sum_{i=1}^{n}{\mu_i}^2=tr(ES(G))^2=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}a_{ji} \tag{۲.۴}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(a_{ij})^2=2\sum_{i<j}(e_i+e_j)^2$$

$$\Longrightarrow \sum_{i=1}^{n}{\mu_i}^2=2M \quad \text{که} \quad M=\sum_{1\leq i<j\leq n}(e_i+e_j)^2$$

اگر r شعاع و D قطر گراف باشند، آن‌گاه $r\leq e_i\leq D$ می‌باشد. در این صورت:

$$2n(n-1)r^2\leq M\leq 2n(n-1)D^2$$

قضیه ۱.۳.۴. فرض کنید G گرافی همبند از مرتبه n باشد. اگر $ecc(v_i)=e_i=e$ برای $i=1,2,...,n$ باشد، آن‌گاه G فقط یک مقدار ویژه مثبت برابر $2(n-1)e$ دارد.

برهان. فرض کنید G گراف ساده همبند از مرتبه n باشد و $ecc(v_i)=e_i=e$ برای $i=1,2,...,n$ باشد. در این صورت داریم:

$$a_{ij}=\begin{cases}e_i+e_j & ,\ i\neq j\\ 0 & ,\ i=j\end{cases}=\begin{cases}2e & ,\ i\neq j\\ 0 & ,\ i=j\end{cases}$$

پس چند جمله‌ای مشخصه ماتریس مجموع خروج از مرکز گراف G به صورت زیر خواهد بود:

$$\phi(G,\mu) = det(\mu I - ES(G)) = det(\mu I - ۲e(A(k_n))) = ۰,$$

که در اینجا $A(K_n)$ ماتریس مجاورت گراف کامل K_n است.

$$\begin{aligned} det(\mu I - ۲e(A(K_n))) &= (۲e)^n \Big| \frac{\mu}{۲e} I - A(K_n) \Big| \\ &= (۲e)^n \Big(\frac{\mu}{۲e} - (n-۱) \Big) \big(\frac{\mu}{۲e} + ۱ \big)^{n-۱} \\ &= \Big[\mu - ۲(n-۱)e \Big] (\mu + ۲e)^{n-۱}. \end{aligned}$$

بنابراین داریم:

$$\Big[\mu - ۲(n-۱)e \Big] (\mu + ۲e)^{n-۱} = ۰$$

$$\Longrightarrow Spec(ES(G)) = \begin{pmatrix} ۲(n-۱)e & -۲e \\ ۱ & n-۱ \end{pmatrix}.$$

پس گراف G یک مقدار ویژه مثبت برابر $۲(n-۱)e$ دارد. □

نتیجه ۱.۳.۴. اگر $G = K_n$ باشد آن‌گاه داریم:

$$Spec(ES(K_n)) = \begin{pmatrix} ۲(n-۱) & -۲ \\ ۱ & n-۱ \end{pmatrix}.$$

نتیجه ۲.۳.۴. اگر G گراف دو بخشی کامل به صورت $G = K_{p,q}$ باشد بطوری که $p, q \neq ۱$ باشند، آن‌گاه داریم:

$$Spec(ES(K_{p,q})) = \begin{pmatrix} ۴(p+q-۱) & -۴ \\ ۱ & p+q-۱ \end{pmatrix}.$$

نتیجه ۳.۳.۴. اگر $G = C_n$، یک دور از مرتبه n باشد، آن‌گاه داریم:

$$Spec(ES(C_n)) = \begin{pmatrix} n(n-۱) & -n \\ ۱ & n-۱ \end{pmatrix} \quad ,\text{اگر } n \text{ زوج باشد}$$

$$Spec(ES(C_n)) = \begin{pmatrix} (n-۱)^۲ & -(n-۱) \\ ۱ & n-۱ \end{pmatrix} \quad ,\text{اگر } n \text{ فرد باشد}$$

نتیجه ۴.۳.۴. اگر G یک گراف ستاره بصورت $S_n = K_{1,n}$ باشد آن‌گاه برای $n \geq ۲$ داریم:

$$Spec(ES(S_n)) = \begin{pmatrix} -۴ & ۲n - ۲ + \sqrt{۴n^۲ + n + ۴} & ۲n - ۲ - \sqrt{۴n^۲ + n + ۴} \\ n-۱ & ۱ & ۱ \end{pmatrix}$$

حال کران بالایی برای شعاع طیفی می‌یابیم.

قضیه ۲.۳.۴. اگر G یک گراف از مرتبه n باشد آن‌گاه داریم: $\mu_1 \leq \sqrt{\frac{2M(n-1)}{n}}$.
در رابطه فوق تساوی برقرار است اگر برای هر $i = 1,2,...,n$، $ecc(v_i) = e_i = e$ باشد.

برهان. با جایگذاری $a_i = 1$ و $b_i = \mu_i$ برای $i = 2,3,...,n$ در نامساوی (۳.۱) داریم:

$$\Big(\sum_{i=2}^{n} \mu_i\Big)^2 \leq (n-1)\sum_{i=2}^{n} {\mu_i}^2. \tag{۳.۴}$$

با استفاده از تساوی‌های (۱.۴) و (۲.۴) داریم:

$$\sum_{i=2}^{n} \mu_i = -\mu_1 \qquad , \qquad \sum_{i=2}^{n} {\mu_i}^2 = 2M - {\mu_1}^2.$$

بنابراین نامساوی (۳.۴) به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$(-\mu_1)^2 \leq (n-1)(2M - {\mu_1}^2)$$
$$\Longrightarrow \mu_1 \leq \sqrt{\frac{2M(n-1)}{n}}.$$

حال فرض کنید برای هر$i = 1,2,...,n$، $ecc(v_i) = e_i = e$ باشد. بنابراین خواهیم داشت:

$$M = \sum_{1\leq i<j\leq n} (e_i + e_j)^2 = \sum_{1\leq i<j\leq n} 4e^2 = \binom{n}{2} 4e^2 = 2n(n-1)e^2.$$

در این صورت داریم:

$$\sqrt{\frac{2M(n-1)}{n}} = \sqrt{\frac{2(n-1)}{n} 2n(n-1)e^2} = 2(n-1)e.$$

□

۴.۴ کران‌هایی از انرژی مجموع خروج از مرکز

همان طور که در فصل‌های قبل برای انواع انرژی کران‌هایی مشخص کردیم در این بخش هم به بررسی کران‌هایی برای این نوع از انرژی می‌پردازیم. ملاحظه کردید این انرژی با انرژی مجموع درجات مشابه هستند، به همین دلیل بعضی از کران‌های آن‌ها نیز شبیه به هم است. برای مشخص کردن کران‌های مورد نظر قضایای زیر را بررسی می‌کنیم.

قضیه ۱.۴.۴. اگر G یک گراف از مرتبه n باشد آن‌گاه داریم:

$$\sqrt{2M} \leq E_{ES}(G) \leq \sqrt{2Mn}. \tag{۴.۴}$$

برهان. با جایگذاری $a_i = ۱$ و $b_i = |\mu_i|$ در نامساوی ۳.۱ داریم:

$$\Big(\sum_{i=۱}^{n} |\mu_i|\Big)^۲ \leq n \sum_{i=۱}^{n} {\mu_i}^۲$$

بنابراین با توجه به تعریف انرژی داریم:

$$\big[E_{ES}(G)\big]^۲ \leq n(۲M)$$

$$\Longrightarrow E_{ES}(G) \leq \sqrt{۲nM} \qquad (۵.۴)$$

به این ترتیب کران بالای این انرژی بدست می‌آید. حال به بررسی کران پایین آن می‌پردازیم.

$$\big[E_{ES}(G)\big]^۲ = \Big(\sum_{i=۱}^{n} |\mu_i|\Big)^۲ \geq \sum_{i=۱}^{n} |\mu_i|^۲ = ۲M.$$

بنابراین داریم:

$$E_{ES}(G) \geq \sqrt{۲M}. \qquad (۶.۴)$$

از ترکیب دو نامساوی (۵.۴) و (۶.۴) با هم قضیه اثبات می‌شود. □

قضیه ۲.۴.۴. اگر G یک گراف از مرتبه n باشد و Δ حاصلضرب قدر مطلق مقادیر ویژه ماتریس مجموع خروج از مرکز $ES(G)$ باشد، آن‌گاه داریم:

$$\sqrt{۲M + n(n-۱)\Delta^{\frac{۲}{n}}} \leq E_{Es}(G) \leq \sqrt{۲(n-۱)M + n\Delta^{\frac{۲}{n}}}. \qquad (۷.۴)$$

برهان. ابتدا به اثبات کران پایین می‌پردازیم. طبق تعریف انرژی مجموع خروج از مرکز داریم:

$$\big[E_{ES}(G)\big]^۲ = \Big(\sum_{i=۱}^{n} |\mu_i|\Big)^۲ = \sum_{i=۱}^{n} {\mu_i}^۲ + ۲\sum_{i<j} |\mu_i||\mu_j| = ۲M + \sum_{i\neq j} |\mu_i||\mu_j| \qquad (۸.۴)$$

از آنجایی که میانگین حسابی اعداد نامنفی از میانگین هندسی آن‌ها کوچک‌تر است، یعنی

$$\frac{۱}{n(n-۱)} \sum_{i\neq j} |\mu_i||\mu_j| \geq \Big(\prod_{i\neq j} |\mu_i||\mu_j|\Big)^{\frac{۱}{n(n-۱)}} = \Big(\prod_{i=۱}^{n} |\mu_i|^{۲(n-۱)}\Big)^{\frac{۱}{n(n-۱)}}$$

$$= \prod_{i=۱}^{n} |\mu_i|^{\frac{۲}{n}} = \Delta^{\frac{۲}{n}}$$

داریم:

$$\sum_{i\neq j} |\mu_i||\mu_j| \geq n(n-۱)\Delta^{\frac{۲}{n}} \qquad (۹.۴)$$

با استفاده از روابط (۸.۴) و (۹.۴) و ترکیب کردن آن‌ها داریم:

$$\big[E_{ES}(G)\big]^۲ \geq ۲M + n(n-۱)\Delta^{\frac{۲}{n}}$$

بنابراین

$$E_{Es}(G) \geq \sqrt{۲M + n(n-۱)\Delta^{\frac{۲}{n}}}. \qquad (۱۰.۴)$$

به این ترتیب کران پایین بدست می‌آید. حال به اثبات کران بالا می‌پردازیم.
با جایگذاری $|\mu_i| = \sqrt{a_i}$ که $i = ۱, ۲, ..., n$ باشد در قضیه ۶.۳.۱ داریم:

$$n\Big[\frac{۱}{n}\sum_{i=۱}^{n}{\mu_i}^۲ - \Big(\prod_{i=۱}^{n}{\mu_i}^۲\Big)^{\frac{۱}{n}}\Big] \leq n\sum_{i=۱}^{n}{\mu_i}^۲ - \Big(\sum_{i=۱}^{n}|\mu_i|\Big)^۲$$
$$\leq n(n-۱)\Big[\frac{۱}{n}\sum_{i=۱}^{n}{\mu_i}^۲ - \Big(\prod_{i=۱}^{n}{\mu_i}^۲\Big)^{\frac{۱}{n}}\Big]$$

بنابراین

$$۲M - n\Delta^{\frac{۲}{n}} \leq ۲Mn - [E_{ES}(G)]^۲$$

و لذا داریم:

$$[E_{ES}(G)]^۲ \leq ۲(n-۱)M + n\Delta^{\frac{۲}{n}}, \qquad (۱۱.۴)$$

جایی که $M = \sum_{۱\leq i<j\leq n}(e_i + e_j)$ است.
از روابط (۱۰.۴) و (۱۱.۴) نامساوی (۷.۴) بدست می‌آید. □

قضیه ۳.۴.۴. اگر G گرافی همبند باشد به طوری که $ecc(v_i) = e_i = e$ به ازای $i = ۱, ۲, ..., n$ باشد آن‌گاه:

$$E_{ES}(G) = ۴(n-۱)e.$$

برهان. اگر G گرافی همبند با $ecc(v_i) = e_i = e$ $(i = ۱۲, ..., n)$ باشد آن گاه طبق قضیه ۱.۳.۴، Gفقط یک مقدار ویژه مثبت برابر $\mu_۱ = ۲(n-۱)e$ دارد. از آن‌جایی که $tr(ES(G)) = ۰$ می‌باشد مجموع بقیه مقادیر ویژه برابر با $-۲(n-۱)e$ می‌باشد.
بنابراین داریم:

$$E_{ES}(G) = \sum_{i=۱}^{n}|\mu_i| = ۴(n-۱)e.$$

□

۵.۴ پیشنهاد برای کارهای آتی در این راستا

همان‌طور که قبلاً اشاره شد، نظریه طیفی گراف‌ها به بررسی خواص گراف‌های مختلف با استفاده از خواص ماتریس‌ها می‌پردازد. در این راستا می‌توان ماتریس‌های مختلفی را به گراف‌ها نظیر کرد و در مورد مقادیر ویژه و انرژی این ماتریس‌ها نتایجی به موازات نتایج

حاصل قبلی، به‌دست آورد. لذا برای کارهای آتی در این زمینه موارد زیر پیشنهاد می‌شود:

۱ـ بررسی گراف‌های هم‌انرژی نسبت به انرژی مجموع درجات در گراف‌ها.

۲ـ به‌دست آوردن کران‌هایی برای انرژی مجموع درجات در گراف‌ها با استفاده از پارامترهای مختلف گرافی.

۳ـ به‌دست آوردن کران‌هایی برای انرژی ماتریس فاصله‌ای بدون علامت و انرژی احاطه گری ماتریس فاصله‌ای بدون علامت.

مراجع

[۱] ح ضرابی زاده (۱۳۷۸)، ‟**نظریه گراف‌ها و کاربردهای آن**“ موسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران، ۳۶۷ صفحه.

[۲] ا گاتمن، ع اشرفی، غ فتح تبار فیروزجایی (۱۳۸۹)، ‟**گراف‌های هم انرژی**“ فرهنگ و اندیشه ریاضی، شماره ۴۵، صفحات ۵۰-۴۱

[3] C. Adiga and M. Smitha, On maximum degree energy of a graph, *Int. J. Contem Math. Sci*., 4(8) (2009), 385-396.

[4] R. Ahrens and G. Szekeres, On a generalization of 27 lines associated with a cubic surface, *J. Austral. Math. Soc.*, 10 (1969), 485-492.

[5] S. Bernard and J. M. Child, *Higher Algebra*, Macmillan India Ltd., New Delhi (2001).

[6] M. Biernacki, H. Pidek and C. Ryll-Nardzewsk, Sur une ine galite entre des integrales definies, *Maria Curie Ska Codowska University*. A4 (1950), 1-4.

[7] N. Biggs, *Algebraic Graph Theory*, Camb. Univ. Press, Camb. UK, (1993).

[8] A. Brouwer, A. Cohen, A. Neumaier, *Distance Regular Graphs*, Springer-Verlag, New York/Berlin (1989).

[9] V. Consonni, R. Todeschini, New Spectral index for Molecule Description, *MATCH. Commun. Math. Comput. Chem.*, 60 (2008), 3-14.

[10] D. Cvetkovic, M. Doob, H. Sachs, *Spectra of Graphs-Theory and Application*, Academic Press, San Diego (1995).

[11] F. De Clerck, H. Van Maldeghem, *Some Classes of rank 2 geometries*, in*"Handbook in Incidence Geom."* Elsevier, Amsterdam/New York (1995).

[12] K. C. Das, S. A. Mojallal, I. Gutman, Improving McClelland's lower bound for energy, *MATCH. Commun. Math. Comput. Chem.*, 70, (2013), 663-668.

[13] J. B. Diaz, F. T. Metcalf, Stroner froms of a Class of inequalities of G, *Bull. Amer. Math. Soc.*, 69 (1963), 415-418.

[14] F. Harary, *Graph Theoy*, Addison-Wesley, Reading (1969).

[15] I. Gutman, Hyperenergetic And Hypoenergetic Graphs, Selected Topics on Applications of Graph Spectra, *Math. Inst.*, Belgrade, (2011), 113-135.

[16] I. Gutman, Hyperenergetic Molecular Graphs, *J. Serb. Chem. Sos.*, 64 (1999), 199-205.

[17] I. Gutman, The Energy of a Graph, *Berlin Math. Stat. Forschungszentrum*, 103 (1978), 1-22

[18] I. Gutman, The Energy of a Graph: Old and new result. *In Algebraic Combinatorics and Applications*. Springer, Berlin, Heidelberg, (2001), 169-211.

[19] I. Gutman, O. E. Polansky , *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*, Speringer Verlag, Berlin (1986).

[20] M. Hosamani, S. Ramane, On Degree Sum Energy of a Graph, *European J. Pure Appl. Math.*, 9(3) (2016), 340-345.

[21] G. Hossein, F. Tabar, A. R. Ashrafi, Some remarks on Laplaciant Eigenvalues and Laplacian Energy of Graphs, *Math. Commun.*, 15(2) (2010), 443-451.

[22] S. R. Jog, R. Kotambari, Degree Sum Energy of Some Graphs, *Annal. Pure Math.*, 11(1) (2016), 17-27.

[23] Ch. Kinkar and I. Gutman, Bounds for the energy of graphs, *Hacettepe J. Math. Stat.*, 45(3) (2016), 695-703.

[24] J. H. Koolen, Maximal Energy Graph, *Advances Appl. Math.*, 26 (2001), 47-52.

[25] B. Mc. Celland, Properties of the Latent Roots of a matrix:The Estimation of π-electron Energies, *J. Chem. Phys*., 54 (1971), 640-643.

[26] I. Z. Milovanov'c, E. I. Milovanov'c, A . Zaki'c, A short Note on Graph Energy, *MATCH. Comun. Math. Comput. Chem.*, 72 (2014), 179-182.

[27] N. Ozeki, On the Estimation of inequlities by Maximum and Minimum Valuse, *J. College Arts Sci., Chiba Uni.*, 5 (1968), 199-203.

[28] S. Payane, Nonisomorphic Generalized Quadrangles, *J. Algebra,* 18 (1971), 201-212.

[29] G. Pólya and G. Szeg″, *Problems and Theorems in analysis, Series, Integral Calculus, Theory of Functions*, Springer, Berlin (1972).

[30] H. S. Ramane , D. S. Revankar and J. B. Patil, Bounds for the degree sum eigenvalues and degree sum energy of a graph, *Int. J. Pure Appl. Math. Sci.*, 6(2) (2013), 161-167.

[31] H. S. Ramane, D. S. Revankar, I. Gutman, S. B. Rao, B. D. Acharya, H. B. Walikar, Bounds for the distance energy of a graph, *J. Kragujevac Math.* 31 (2008), 59 – 68.

[32] H. S. Ramane, D. S. Revankar, B. Zhou, Bounds for the eigenvalues of a distance matrix of a graph, *Math. Education*, No. 2 (2011).

[33] D. R. Revankar, M. M. Patil and H. S. Ramane, On eccentricity sum eigenvalue and eccentricity sum energy of a graph, *Annal. Pure Appl. Math.*, 13(1) (2017), 125-130.

[34] I. Shparlinski , On the energy of some circulant graphs, *Linear Algebraandits Applications*, 414 (2006), 378-382.

[35] J. Thas, Semi-partial geometries and spreads of classical polar spaces, *J. Combin. Theory Ser.*, A 35 (1983), 58–66.

[36] N. Trinajstic, *Chemical graph theory* , CRC Press, Boca Raton, Florida, 2 (1983).

[37] H. Walikar, H. Ramane, P. Hampiholi, *On the energy of a graph*, in *Graph Connections*, Allied Publishers, New Delhi (1999).

[38] B. Zhou, Energy of a graph, *MATCH. Commun. Math. Comput. Chem.*, 51 (2004), 111-118.

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

انرژی گراف .... Energy of graph
انرژی مجموع خروج از مرکز .... Eccentricity sum energy
انرژی مجموع درجات .... Degree sum energy
چند جمله‌ای مشخصه .... Characteristic polynomial
شعاع طیفی .... Spectral radius
طیف گراف .... Spectrum of graph
کران انرژی .... Bound for energy
گراف تادپل .... Tadpole graph
گراف تکین .... Singular graph
گراف دامبل .... Dumbbell graph
گراف‌های فرا انرژی .... Hyperenergetic graphs
گراف‌های هم‌انرژی .... Equienergetic graphs
ماتریس مجاورت .... Adjacency matrix
ماتریس مجموع خروج از مرکز .... Eccentricity sum matrix
ماتریس مجموع درجات .... Degree sum matrix
مقدار ویژه .... Eigenvalue
هم‌پوشانی .... Coalescence

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

ماتریس مجاورت	Adjacency matrix
کران انرژی	Bound for energy
چند جمله‌ای مشخصه	Characteristic polynomial
هم‌پوشانی	Coalescence
انرژی مجموع درجات	Degree sum energy
ماتریس مجموع درجات	Degree sum matrix
گراف دامبل	Dumbbell graph
انرژی مجموع خروج از مرکز	Eccentricity sum energy
ماتریس مجموع خروج از مرکز	Eccentricity sum matrix
مقدار ویژه	Eigenvalue
انرژی گراف	Energy of graph
گراف‌های هم‌انرژی	Equienergetic graphs
گراف‌های فراانرژی	Hyperenergetic graphs
گراف تکین	Singular graph
طیف گراف	Spectrum of graph
شعاع طیفی	Spectral radius
گراف تادپل	Tadpole graph

Abstract

For a simple graph $G = (V, E)$ with eigenvalues of the adjacency matrix $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$, the energy of the graph is defined by $\varepsilon(G) = \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j|$. Myriads of papers have been published in the mathematical and chemistry literatures about properties of this graph invariant due to its connetion with the energy of (bipartite) conjugated molecules. The concept has been generalized to other matrices apart from the adjacency one, and many bounds and extremal properties have been reported for these graph (matrix) energies.
In this thesis, we study two new kinds of matrices assigned to simple connected graphs, namely degree sum matrix and eccentricity sum matrix.We give some bounds for the eigenvalues, especially for the spectral radius(largest eigenvalue), of these matrices. Moreover, we define new kinds of energies with respect to these matrices and give some bounds in certain family of graphs.

Key words: Eigenvalues, Energy of a graph, Adjacency matrix, Degree sum matrix, Degree sum energy of a graph, Eccentricity sum matrix, Eccentricity energy of a graph.

Shahrood University of Technology

Faculty of Mathematical Sciences

MSc Thesis in: Graphs and Combinatorics

Bounds for Degree Sum Energy of Graphs

By: Elahe Mirzaei

Supervisors

Dr. Nader Jafari Rad
Dr. Abdollah Alhevaz

Advisor

Dr. Mahdi Reza Khorsandi

September 2018