F. Ü. Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi, 16(2), 311-317, 2004

Bir Hermit İşleri ve Çizitinin En Alt ve En Üst Özdeğerleri Arasındaki İzgesel Aralığın Bulunması

Elif Tekin TARIM ve Oktay SİNANOĞLU*
Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Matematik Bölümü, 34010, Topkapı, İSTANBUL
*Yale University, ABD; Hoca Ahmet Yesevî Üniversitesi, Türkistan, KAZAKİSTAN

Özet

Önceki yayınlarda [1-7] sonlu yöney ("vektör") uzayları üzerindeki tüm Hermit işlerler ("operatör") eşdeşlik sınıflarına ayrılmıştı. Her sınıf, özdeğerlerinin (+), (0), (-) türlerinden kaçar adet olduğuyla belirleniyordu. Ayrıca her Hermit işlerini temsil eden çizitler, yapısal eşdeğişim ilkesine (VIF) göre üç resimli çizit ("graf") kuralı ile aynı sınıftaki tüm çizitlere dönüştürülebiliyordu. Bu çalışmamızda Hermit çizitinin (ve dizeyinin ("matris")) en üst ve en alt özdeğerleri arasındaki "izgesel aralığını" ("spectral spread") kolayca, resimli yoldan bulunması için yöntemler araştırılmıştır. Böylece nicem kimyası, fiziği gibi uygulamalarda büyük bilgisayar hesaplamalarına gerek kalmadan bunlar hesaplanabilmiştir.

Anahtar Kelimeler: İzgesel aralık, çizit, Hermit işleri, en üst ve en alt özdeğerler.

Finding between The Largest And Least Eigenvalue of A Hermitian Operator and Its Graph

Abstract

In the previous papers [1-7], all Hermitian operators on the finite vector spaces have been distincted into their equivalence classes. Each class was identified according to the number of (+), (-) , (0) eigenvalue types. Also, all the graphs which represent the Hermitian operators could have been transformed into the graphs which were in the same class by three pictorial rules according Valency Interaction Formulas (VIF). In this paper we made some studies to find a method of graph for determining the "spectral speread" which was between the least and largest eigenvalues. Therefore, spectral spread in quantum chemistry and physics can be calculated easily without large scale computer calculations.

Keywords: Spectral speread, graph, Hermitian operator, the least and largest eigenvalues.

1. Giriş

Yapısal eşdeğişim ilkesinin (VIF) üç tane kuralı vardır [1, 7]. Bu kurallarla çizit daha basit bir çizite indirgenerek, "*Değerlik Biçim Dizini"* elde edilir ve DBD≡{n_+, n_0, n_-} şeklinde gösterilir [1-7]. n, Hermit işlerlerinin üstünde çalıştığı sonlu yöney uzayı V_n' in boyutu ve n= n_++ n_0+n_- dir [1-7].

{n_+, n_0, n_-; n_++ n_0+ n_-=n} şeklinde üç tamsayı, V_n üstü Hermit işlerlerinin temsili olan nxn boyutlu dizeylerin özdeğer türlerini belirler. Bu tamsayılar özdeğerlerin n_+ tanesinin (+) değerli, n_0 tanesinin sıfır değerli ve n_- tanesinin de (-) değerli olduğunu gösterir[1-7].

Kimyada bu sayılar bir özdeciğin bağ-yapan(n_+), bağa-karşı(n_-) ve bağ-yapmayan(n_0) MO sayılarını verir. Bu sayılar Nicem kimyasında da enerji düzeylerine karşılık gelirler. (+)

değerli özdeğerler, sıfır ve (-) değerlilerden ne kadar fazlaysa özdeciğin kararlılığı veya tepkimenin olabilirliği hakkında bilgiye sahip oluruz [1-7].

Amacımız, özdeciğin kararlılığı veya tepkimenin olabilirliği hakkında daha kesin bilgiler elde etmek için en üst (en küçük) ve en alt (en büyük) özdeğeri basit formül ya da kurallarla bulmaya çalışmaktır. Bunun için bu makalede izgesel aralığın bulunması incelenecektir. Fizik ve kimyadaki uygulamalarından öte, bu konu temel matematik için de önemlidir.

2. Kullanılacak Çizitlerin Özellikleri

Ele aldığımız çizitler, yönsüz ve tüm çizgilerinin kuvveti +1 değerinde basit çizitlerdir. Köşe noktalarında kulak ("loop") yoktur. Ayrıca çizitler yönsüz olduğundan çiziti temsil eden Hermit dizeyi bakışımlı ("simetrik") ve çizitin bağlantı dizeyidir ("connectivity") [8, 9].

Ç, n-köşeli bir çizit olsun. ***Ç*** çizitinin bağlantı dizeyi de ***A*** olsun. Köşe noktalarında kulak olmadığından ***A***'nın asal köşegen öğeleri sıfırdır (İz(***A***)=0). ***A*** bakışımlı ve ***A***'nın dizey öğeleri gerçel sayılar (a_{ij}= 0 veya 1) olarak aldığımızdan $\lambda_1,\lambda_2,....,\lambda_n$ özdeğerleri de gerçel sayı olacaktır.

Tanım.1 : Bir ***A*** dizeyinin özdeğerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq ..... \geq \lambda_n$ şeklinde olsun. λ_1 en büyük özdeğerini *en alt özdeğer* olarak adlandıracağız (çünkü nicem kimyası ve fiziğinde enerji düzeyleri gösterilirken λ_1 en düşük düzeye karşılık gelir.). Aynı şekilde λ_n de *en üst özdeğer* diyeceğiz.

Tanım.2 : En büyük özdeğerle (λ_1) en küçük özdeğer (λ_n) arasındaki fark (λ_1-λ_n) ***A***'nın *izgesel aralığı* ("spectral spread") olarak adlandırılır [10]. Bunu

$$S(\boldsymbol{A})= \lambda_1-\lambda_n \qquad (1)$$

olarak gösterelim.

2. Bir Çizitin İzgesel Aralığının Basit Resimli Kuralla Bulunması

Bugüne kadar yapılan çalışmalar izgesel yarıçap ve izgesel aralığın bulunması üzerinedir. Şimdi izgesel aralık üzerinde duralım.

Bazı tanım ve açıklamalardan sonra basit bir çizit alarak ona VIF kurallarını* uygulayalım ve onun DBD'sini bulalım.

---

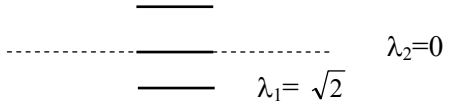
* **1. Kural:**Kappa Kuralı: Bir çizitin bir köşesini sıfırdan farklı + veya – işaretli bir κ sayısı ile çarpmak,o köşeden çıkan tüm çizgilerin kuvvetini κ ile çarpmaktır.

2. Kural:Yıldız Kuralı: Çizite ait herhangi bir köşe ucundan tutulup kaldırılarak diğer bir köşe üzerine konursa, çakışan çizgilerin kuvvetleri toplanıp, tek çizgi halinde çizilir. Köşeye ait çizgiler olduğu gibi kalır.

Örneğin,  çizitini ele alalım. Çizitin bağlantı dizeyi $A=\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}$ dır. VIF kurallarıyla çizit



çizitine indirgenir ve DBD={n_+=1, n_-=1, n_0=1} bulunur. ***A***' nın gerçek özdeğerleri ise



şeklindedir.

En büyük özdeğerin sıfır olan özdeğere uzaklığı $|\lambda_1|$, en küçük özdeğerin sıfır olan özdeğere uzaklığı $|\lambda_n|$ dir ve bize $|\lambda_1|+|\lambda_n|$ gerekir. İz(***A***)=0 olduğundan, ***A***'nın özdeğerlerinin toplamı sıfırdır ve bu yüzden de mutlaka çizitin (+) ve (-) değerli özdeğerleri vardır. Yani $\lambda_1 \geq 0$ dır. Böylece

$$|\lambda_1|+|\lambda_n|=\lambda_1-\lambda_n$$

olarak da yazılabilir.

Tanım.3 : ***A*** bir karmaşık dizey olmak üzere Frobenius normu

$$\|\boldsymbol{A}\|_F=\left(\sum_{i,j}|a_{i,j}|^2\right)^{1/2} \qquad (2)$$

dır [11].

Tanım.4 : Bir dizeyin eki ("adjoint") ile çarpmaya gore değişme özelliği varsa bu dizeye *normal dizey* denir. Yani [***A***, $\boldsymbol{A}^+$] =0 dır.

--------- 0 ---------

L. Mirsky'nin S(***A***)'nın üst sınırını veren teoremi şöyledir [11]:

Sav (Teorem).1 : ***A*** nxn boyutlu bir karmaşık dizey ve n≥ 3 olmak üzere,

---

3. Kural: Değiş-tokuş Kuralı: Çizitin noktaları 1,2,...,n şeklinde numaralandırılsın. Çizit köşe numaralarını sabit tutup çizgileri de beraber taşıyarak noktaların yerlerini değiştirebiliriz. Ya da noktaları sabit tutup numaraları değiş-tokuş işlerleri ile değiştirebiliriz.

$$S(\boldsymbol{A}) \le \left(2\|\boldsymbol{A}\|_F^{\,2} - \frac{2}{n}\left|İz(\boldsymbol{A})\right|^2 \right)^{1/2} \tag{3}$$

dır. (3) denkleminin eşitlik hali, ancak ve ancak ***A*** bir normal dizey ve ***A***'nın (n-2) tane özdeğeri birbirine ve kalan iki tanesinin aritmetik ortalamasına eşitse, sağlanır.

Sav.2 : ***A*** nxn boyutlu bir karmaşık dizey ve n≥ 3 olmak üzere,

$$S(\boldsymbol{A}) \le 2\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} R_t^i(\xi) \right)^{1/t} \tag{4}$$

olur. Burada $\xi \in C$, t ≥1 ve $R_t^i(\xi)$ ***A*** - ξ ***I*** 'nın *i*.satırındaki öğelerin mutlak değerleri toplamıdır [11].

Yardımcı Sav: ***A*** nxn boyutlu karmaşık dizey olsun (n≥3). Sav.2'deki (4) denkleminde $\xi = 0$, t = 1 alındığında S(***A***) üst sınırı şöyledir [11]:

$$S(\boldsymbol{A}) \le \sum_{i,j=1}^{n} \left| a_{ij} \right| . \tag{5}$$

d, ***Ç*** çizitinin kenar sayısı, n ise köşe sayısı olmak üzere (2) denklemini yeniden yazarsak;

$$\|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{2d} \tag{6}$$

olur. İz(***A***)=0 olduğundan da (3) denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$S(\boldsymbol{A}) \le \left(2\|\boldsymbol{A}\|_F^{\,2}\right)^{1/2} .$$

Bunda (6) denklemi yerine koyulursa,

$$S(\boldsymbol{A}) \le 2\sqrt{d} \tag{7}$$

elde edilir. (5) denklemi ise

$$S(\boldsymbol{A}) \le 2d \tag{8}$$

olarak elde edilir.

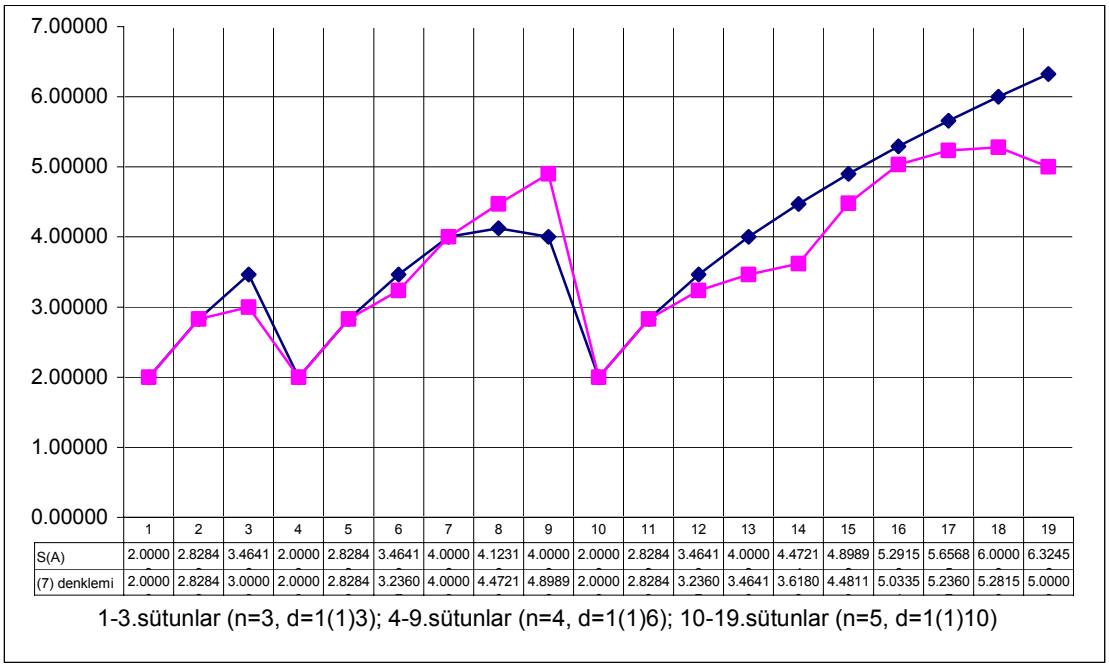
Cetvel.1'de bazı çizitler üzerinde, o çizitleri temsil eden Hermit dizeylerinin özdeğerleri Mathematica ile bulunarak (7) ve (8) denklemleri ile izgesel aralık değerinin (S(***A***)) karşılaştırılması yapılmıştır.

Cetvel.1'den görüleceği gibi (8) denklemi gerçek değerden oldukça uzaklaşan sonuçlar verdi. (7) denklemi ise gerçek değerlere çok daha yakın sonuçlar vermiştir.

Cetvel.1 S(***A***) ile (7) ve (8) denklemlerinden elde edilmiş değerlerin karşılaştırılması.

Çizit	Çiziti Temsil Eden Hermit Dizeyi A	A dizeyinin özdeğerleri (λ_i)	S(A)	Denklem (7)	Denklem (8)
n=3					
	$\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=1$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=-1$	2	S(***A***)≤2	S(***A***)≤2
	$\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=1.4142$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=-1.4142$	2.8284	S(***A***)≤2.8284	S(***A***)≤4
 K_3	$\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=2$ $\lambda_2=-1$ $\lambda_3=-1$	3	S(***A***) ≤3.4641	S(***A***)≤6
n=4					
	$\begin{bmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=1$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=0$ $\lambda_4=-1$	2	S(***A***) ≤2	S(***A***)≤2
	$\begin{bmatrix}0&1&0&0\\1&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=1.4142$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=0$ $\lambda_4=-1.4142$	2.8284	S(***A***) ≤2.8284	S(***A***)≤4
	$\begin{bmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=1$ $\lambda_2=1$ $\lambda_3=-1$ $\lambda_4=-1$	2	S(***A***) ≤2.8284	S(***A***)≤4
	$\begin{bmatrix}0&1&0&0\\1&0&1&0\\0&1&0&1\\0&0&1&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=1.61803$ $\lambda_2=0.61803$ $\lambda_3=-0.61803$ $\lambda_4=-1.61803$	3.2361	S(***A***) ≤3.4641	S(***A***)≤6
	$\begin{bmatrix}0&1&1&0\\1&0&1&0\\1&1&0&0\\0&0&0&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=2$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=-1$ $\lambda_4=-1$	3.4641	S(***A***) ≤3.4641	S(***A***)≤6
	$\begin{bmatrix}0&1&0&1\\1&0&1&0\\0&1&0&1\\1&0&1&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=2$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=0$ $\lambda_4=-2$	4	S(***A***) ≤4	S(***A***)≤8
	$\begin{bmatrix}0&1&1&1\\1&0&1&0\\1&1&0&0\\1&0&0&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=2.17$ $\lambda_2=0.311$ $\lambda_3=-1$ $\lambda_4=-1.48$	3.6500	S(***A***) ≤4	S(***A***)≤8
	$\begin{bmatrix}0&1&1&1\\1&0&1&0\\1&1&0&1\\1&0&1&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=2.56155$ $\lambda_2=0$ $\lambda_3=-1$ $\lambda_4=-1.56155$	4.1231	S(***A***) ≤4.4721	S(***A***)≤10
 K_4	$\begin{bmatrix}0&1&1&1\\1&0&1&1\\1&1&0&1\\1&1&1&0\end{bmatrix}$	$\lambda_1=3$ $\lambda_2=-1$ $\lambda_3=-1$ $\lambda_4=-1$	4	S(***A***) ≤4.8990	S(***A***)≤12

Şimdi (7) denkleminin hata çözümlemesini yaparsak, çizitler için oluşan hata Şekil.1 de görülür. Burada n=3 noktalı çizitlerden kenar sayısı d=1,2,3 olanlar 1-3.sütunlarda; n=4 için kenar sayısı d=1,2,3,...,6 olanlar 4-9.sütunlarda ve 10-19. sütunlarda ise n=5 köşeli ve d=1,2,3,...,10 kenarlı çizitlerin izgesel aralık değerleri ve (7) denklemiyle elde edilen değerlerin sonuçları incelenmiştir.



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
S(A)	2.0000	2.8284	3.4641	2.0000	2.8284	3.4641	4.0000	4.1231	4.0000	2.0000	2.8284	3.4641	4.0000	4.4721	4.8989	5.2915	5.6568	6.0000	6.3245
(7) denklemi	2.0000	2.8284	3.0000	2.0000	2.8284	3.2360	4.0000	4.4721	4.8989	2.0000	2.8284	3.2360	3.4641	3.6180	4.4811	5.0335	5.2360	5.2815	5.0000

1-3.sütunlar (n=3, d=1(1)3); 4-9.sütunlar (n=4, d=1(1)6); 10-19.sütunlar (n=5, d=1(1)10)

Şekil.1 n köşeli, d kenarlı çizitlerde (7) denklemi için K_5' e (n=5) kadar hata çözümlemesi. S(***A***)=λ_1-λ_n, n:köşe sayısı, d:kenar sayısı

Sonuç

Bir çizitin (Hermit işleri) izgesel aralığının sınırını kenar ve köşe sayısına bağlı basit ve resimli kurallarla bulmak, izgesel aralık hakkında çok büyük hesaplamalar yapmadan kolayca fikir sahibi olmamızı sağlar. Ayrıca bu sonuç, bir dizeyin en büyük özdeğere ait sınır değerinin basit resimli kurallarla elde edilmesi üzerine olan bir sonraki makalemizle birlikte kullanılması; kimya ve fizikte büyük hesaplamalar gerektiren enerji düzeyleri, özdeciğin kararlılığı ve tepkimenin olabilirliği hakkındaki ön bilgiye basit bir şekilde ulaşmamızı sağlayacaktır.

Kaynaklar

1. O. Sinanoğlu, Structural covariance of graphs, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65, 255-265, 1984.
2. O. Sinanoğlu, A principle of linear covariance for quantum mechanics and the electronic structure theory of molecules and other atom clusters, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65, 233-242, 1984.
3. O. Sinanoğlu, deformational covariance of graphs, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65, 267-270, 1984.
4. O. Sinanoğlu, Non-unitary classification of molecular electronic structures and other atom clusters, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65, 249-254, 1984.

5. O. Sinanoğlu, A theorem for qualitative deductions ın organic or ınorganic chemistry regarding the relative stabilities, distortions and reactions of molecules, Chemical Pyhics Letters, 103, 4, 315-322, 1984.
6. O. Sinanoğlu, new method for qualitative quantum chemical deductions on organic or ınorganic molecules or clusters directly from structural formulas or ORTEP diagrams, Theoretica Chimica Acta, 68, 251-270, 1985.
7. O. Sinanoğlu, Sonlu yöney uzayları üzerine kurulan cebirsel yapılar, hermit işlerleri ve onları temsil eden çizitlerin cebirsel, topolojik sınıflara ayrılması, sınıf değişmezleri; yeni eşdeğişim ilkesi; nicem fizik ve kimyasına uygulamalar, F.Ü. Fen ve Müh. Bilimleri Dergisi, 11, 3, 329-344, 1999.
8. F. Harary, Graph Theory, Reading, Addison-Wesley, 1969.
9. R.J. Wilson, Introduction to Graph Theory, London, Longman, 1972.
10. D. Cvetkovic, ve P. Rowlinson, The largest eigenvalue of a graph: A Survey, Linear Algebra and Its Applications, 28,3-33, 1990.
11. E. Deutsch, on the spread of matrices and polynomals, Linear Algebra and Its Applications, 22, 49-55, 1978.