F. Ü. Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi, 16(2), 319-326, 2004

Bir Hermit İşleri ve Çizitinin En Alt Özdeğerinin 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

Yapısal Eşdeğişim İlkesi'nin (VIF) kurallarıyla birbirinden elde edilen bütün çizitler aynı eşdeşlik sınıflarına aittirler[1-7]. Ayrıca bu çizitler Hermit işlerleriyle ("operatör") temsil edilir [1-7]. Basit resimli kural ile çizitlerin özdeğerleri bulunarak izgesel aralık elde edilir [8]. Çalışmamızda amaçlanan, izgesel yarıçapını ("spectral radious") yâni en alt özdeğerini ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq .... \geq \lambda_n$ şeklinde sıralanmış özdeğerlerden λ_1'i) hesaplayan basit resimli formulü bulmaktır. Böylece en üst (en küçük) özdeğere de ulaşılabilir.

Anahtar Kelimeler: İzgesel yarıçap, çizit, Hermit işleri, en üst özdeğer, en alt özdeğer.

Finding The Largest Eigenvalue of A Hermit Operator and Graph

Abstract

All graphs which obtained in terms of each other by using Valency Interaction Formulas (VIFs) belong to the same equivalence classes [1-7]. Also, these graphs are represented by Hermitian operators [1-7]. By using "simple pictorial rules" spectral spread is obtained with the eigenvalues of these graphs [8]. In this paper, our object is to find spectral radious namely the largest eigenvalue λ_1 ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq .... \geq \lambda_n$) by using "simple pictorial rules". Thus the least eigenvalue can be obtained.

Keywords: Spectral radious, graph, Hermitian operator, the least eigenvalue, largest eigenvalue.

1. Giriş

Tarım ve Sinanoğlu [8] n köşeli, d kenarlı bir çizitin("graf") izgesel aralığını(S(A)) veren

$$S(\boldsymbol{A}) \leq 2\sqrt{d} \tag{1}$$

formülü incelemişlerdir.

Bu makaledeki amacımız ise, basit formül ya da kurallarla en büyük(en alt) özdeğeri bulmaya çalışmaktır. Bundan sonra (1) denklemi de kullanılarak, en küçük (en üst) özdeğer için iyi bir sınır da bulabiliriz.

2. Kullanılacak Çizitlerin Özellikleri

Aldığımız çizitler, Tarım ve Sinanoğlu [8]'de olduğu gibi aynı özelliklere sahiptir. Yâni yönsüz, tüm çizgilerinin kuvveti +1 değerinde basit çizitlerdir ve köşe noktalarında kulak ("loop") yoktur. Ayrıca çizitler yönsüz olduğundan çizitin bağlantı dizeyi bakışımlıdır ("simetrik"). Bunlar n-boyutlu sonlu bir yöney uzayı üzerinde gerçel Hermit işlerlerine tekabül eder.

3. En Büyük Özdeğerin Bulunması

İzgesel aralık bilindiğine göre, şimdi izgesel yarıçapı (en büyük özdeğeri) veren bir formüle ihtiyaç olacaktır. En büyük özdeğeri, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \ldots\ldots \geq \lambda_n$ olmak üzere kenar sayısı (d) ve nokta sayısı (n) cinsinden,

Yuan : Bağlaşık("connected") bir çizit için [9,10,11]: $\lambda_1 \leq (2d\text{-}n+1)^{1/2}$ (2)

Wilf : Herhangi bir çizit için [9,10,12]: $\lambda_1 \leq (2d\text{-}((n\text{-}1)/n))^{1/2}$ (3)

Stanley : Herhangi bir çizit için [9,10,13]: $\lambda_1 \leq (1/2)(-1+(1+8d)^{1/2})$ (4)

veren formüllerdir. Bu denklemlerde, çiziti temsil eden ***A*** dizeyinin öğeleri $a_{ij}=1$, $a_{ii}=0$ dır ve dizey bakışımlıdır.

Cetvel.1'de görüldüğü gibi, Mathematica ile o çiziti temsil eden Hermit dizeyinin özdeğerleri bulunmuş ve (2,3,4) denklemleri ile karşılaştırılmıştır.

Sonuç olarak, kullanılan çizitler için en büyük özdeğer hakkında iyi bir yaklaşıklıkla, (2) denklemi en iyi sonucu verir. Buna ait teorem şöyledir:

Sav(Teorem).1: ***Ç***, d kenarlı ve n noktalı birleştirilmiş basit bir çizit olsun. O zaman ***Ç*** çizitinin ***A*** bağlantı dizeyinin izgesel yarıçapını

$$\rho(\boldsymbol{A}) \leq \sqrt{2d-n+1} \tag{5}$$

verir. Eşitlik durumu, ancak ve ancak ***Ç*** aşağıdaki iki çizitten birine eşlevse ("izomorf"), sağlanır[11].

a) $K_{1,n-1}$ yıldız.

b) K_n tam çizit.

Burada sözü edilen $\rho(\boldsymbol{A})$ en büyük özdeğere karşılık gelmektedir. Cetvel.2' de n köşeli, d kenarlı çizitlerde en büyük özdeğer (λ_1) için hata çözümlemesi görülmektedir.

Cetvel.1 Çizitleri temsil eden ***A*** dizeyinin özdeğerleriyle (λ_i) (2,3,4) denklemlerinin karşılaştırılması

Çizit	Hermit Dizeyi	Özdeğerler(λ_i)	(2) denklemi	(3) denklemi	(4) denklemi
n=3					
$K_{1,2}$	$\begin{bmatrix}1&0&1\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}$	$\boldsymbol{\lambda_1 = 1.41421}$ $\lambda_2 = 0$ $\lambda_3 = -1.4142$	$\lambda_1 \le 1.41421$	$\lambda_1 \le 1.82574$	$\lambda_1 \le 1.56155$
K_3	$\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix}$	$\boldsymbol{\lambda_1 = 2}$ $\lambda_2 = -1$ $\lambda_3 = -1$	$\lambda_1 \le 2$	$\lambda_1 \le 2.3094$	$\lambda_1 \le 2$
n=4					
$K_{1,3}$	$\begin{bmatrix}0&1&0&0\\1&0&1&1\\0&1&0&0\\0&1&0&0\end{bmatrix}$	$\boldsymbol{\lambda_1 = 1.73205}$ $\lambda_2 = 0$ $\lambda_3 = 0$ $\lambda_4 = -1.73205$	$\lambda_1 \le 1.73205$	$\lambda_1 \le 2.64575$	$\lambda_1 \le 2$
	$\begin{bmatrix}0&1&0&0\\1&0&1&0\\0&1&0&1\\0&0&1&0\end{bmatrix}$	$\boldsymbol{\lambda_1 = 1.61803}$ $\lambda_2 = 0.61803$ $\lambda_3 = -0.61803$ $\lambda_4 = -1.61803$	$\lambda_1 \le 1.73205$	$\lambda_1 \le 2.29129$	$\lambda_1 \le 2$
	$\begin{bmatrix}0&1&0&1\\1&0&1&0\\0&1&0&1\\1&0&1&0\end{bmatrix}$	$\boldsymbol{\lambda_1 = 2}$ $\lambda_2 = 0$ $\lambda_3 = 0$ $\lambda_4 = -2$	$\lambda_1 \le 2.23608$	$\lambda_1 \le 2.69258$	$\lambda_1 \le 2.37228$
	$\begin{bmatrix}0&1&0&1\\1&0&1&0\\0&1&0&1\\1&0&1&0\end{bmatrix}$	$\boldsymbol{\lambda_1 = 2.56155}$ $\lambda_2 = 0$ $\lambda_3 = -1$ $\lambda_4 = -1.56155$	$\lambda_1 \le 2.64575$	$\lambda_1 \le 3.04138$	$\lambda_1 \le 2,70156$
K_4	$\begin{bmatrix}0&1&0&1\\1&0&1&0\\0&1&0&1\\1&0&1&0\end{bmatrix}$	$\boldsymbol{\lambda_1 = 3}$ $\lambda_2 = -1$ $\lambda_3 = -1$ $\lambda_4 = -1$	$\lambda_1 \le 3$	$\lambda_1 \le 3.35410$	$\lambda_1 \le 3.27492$

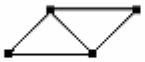
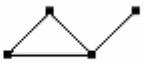
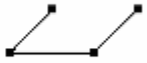
Cetvel.2 n=çizitin köşe sayısı; d=çizitin kenar sayısı olmak üzere (5) denklemi için hata çözümlemesi

n	**d**	**(5) denklemi (λ_1)**	**En alt özdeğer (λ)**	$\lvert\lambda_1 - \lambda\rvert$
3	2	1.41420	1.41421	0.00001
3	3	2.00000	2.00000	0.00000
4	3	1.73205	1.61803	0.11402
4	4	2.23607	2.00000	0.23607
5	4	2.00000	1.73205	0.26795
5	5	2.44940	2.00000	0.44940
6	5	2.23607	1.80194	0.43413
6	6	2.00000	2.00000	0.64575
7	6	2.44949	1.84776	0.60163
7	7	2. 82843	2. 00000	0.82843
8	7	2.64575	1.87939	0.76636
8	8	3.00000	2.00000	1.00000
9	8	2.82843	1.90211	0.92632
9	9	3.16228	2.00000	1.16228

Sav.2 : Aynı nokta sayısına sahip çizitlerde kenar sayısı arttıkça en alt özdeğer de büyür.

İspat: Bunun ispatı Sav.1' den açıkca görülür.

Örnek.1. Aşağıda görüldüğü gibi, n=4 noktalı çizitlerde kenar sayıları arttıkça en alt özdeğer artar.

			
d=6	d=5	d=4	d=3
λ_1= 3.000 λ_2= 1.000 λ_3=-1.000 λ_4=-1.000	**λ_1=2.562** λ_2= 0.000 λ_3=-1.000 λ_4=-1.562	**λ_1= 2.170** λ_2= 0.311 λ_3=-1.000 λ_4=-1.480	**λ_1=1.618** λ_2= 0.618 λ_3= 0.618 λ_4=-1.618

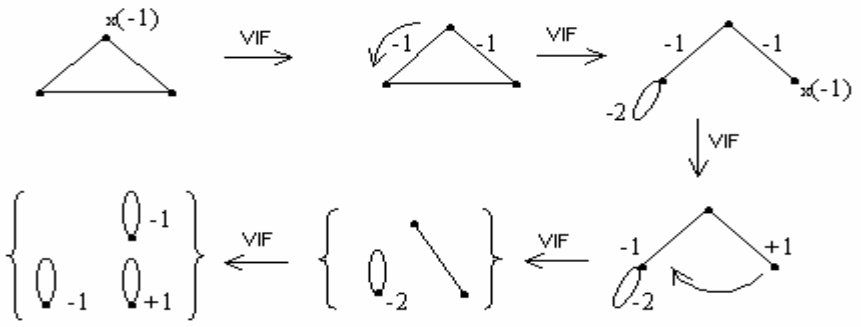
4. Hückel ve Möbius Çizitleri için Özel Durumlar

Tanım.1. (*Hückel Durumu*): Hückel üçgeni, tüm kenar kuvvetleri 1 olan n=3 köşeli bir çizittir. Şekil.1'de olduğu gibi, VIF kurallarıyla* indirgenerek, DBD=$\{n_+=1, n_0=0, n_-=2\}$ elde edilir [1-8, 14, 15, 17] (DBD$\equiv\{n_+, n_0, n_-\}$ şeklinde gösterilir. $n= n_+ + n_0 + n_-$ dir ve bu üç tamsayı 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 [1-6, 14].).

* **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.

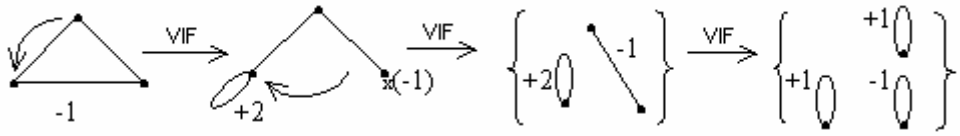
2. Kural:Yıldız Kuralı: Çizite ait herhangi bir köşe ucundan tutulup kaldırılarak diğer bir köşe üzerine konursa, çakışan çizgilerin kuvvetleri toplanıp, tek çizgi halinde çizilir. Köşeye ait çizgiler olduğu gibi kalır.

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.



Şekil.1. Hückel üçgeni ve indirgenmesi.

Tanım.2. (*Möbius Durumu*): Möbius üçgeni, bir kenar kuvveti –1 olan bir çizittir. VIF kuralları kullanılarak, DBD={n_+=2, n_0=0, n_-=1} bulunur [1-7, 14-17]



Şekil.3. Möbius üçgeni ve indirgenmesi.

Sav.3: n-gen şeklindeki çizitlerde kenar sayısı tek olduğunda, Hückel durumundaki DBD Möbius durumunda ters döner.

İspat: Frost-Musulin Algoritmasına [15, 18] göre; Hückel'de çizitin köşesi aşağı gelecek şekilde, Möbius da ise çizitin kenarı aşağıya gelecek şekilde yarıçapı 2 olan bir çemberin içine çizitler yerleştirilirse, örneğin 3-gen çiziti ele alalım:

DBD={ n_+=1, n_0=0, n_-=2} DBD={ n_+=2, n_0=0, n_-=1}

λ_1=2, λ_2=λ_3=-1 λ_1=λ_2=1, λ_3=-2

bulunur.

5. Uygulamadan Elde edilen Sonuçlar

Tanım.3 : x-o-x-o-.... şeklinde işaretlenebilen çizitlere *atlamalı ("alternant") çizit* denir [19, 20]. Asla atlamalı çizitde x-x veya o-o bir kenarın iki ucunda (yan yana) bulunmaz. Örneğin,

atlamalı atlamasız

Çiziti temsil eden nxn boyutlu ***A*** Hermit dizeyinin özdeğerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \ldots \geq \lambda_n$ olmak üzere,

Sonuç.1 : K_n , yâni tam çizitlerde $\lambda_1 = n-1$ ve $\lambda_n = -1$ dir.

Sonuç.2 : n-gen çizitlerde daima $\lambda_1 = 2$ dir.

Sonuç.3 : Atlamalı çizitlerde en küçük özdeğerin sıfır özdeğeriyle arasındaki uzaklık ile en büyük özdeğerin sıfır özdeğeriyle arasındaki uzaklık birbirine eşit ve $n_+ = n_-$ idi [5,14,15,17]. Ayrıca $S(A) = \lambda_1 - \lambda_n$ idi.

Yâni $|\lambda_1| = |\lambda_n|$ ise $\lambda_1 = -\lambda_n$ ve $S(\boldsymbol{A}) = \lambda_1 - \lambda_n = 2\lambda_1$ olur .

(2) denkleminin her iki tarafının da karesini alalım:

$$\lambda_1^2 \leq 2d-n+1 \quad . (6)$$

(1) denkleminde $S(\boldsymbol{A})$ yerine $2\lambda_1$ yazıp, her iki tarafın da karesini alırsak

$$2\lambda_1 \leq 2\sqrt{d}$$

$$\lambda_1 \leq \sqrt{d}$$

$$\lambda_1^2 \leq d \quad (7)$$

eşitsizliğini elde ederiz. Şimdi (6) ve (7) denklemlerini taraf tarafa çıkaralım:

$$0 \leq d-n+1$$

olur. Atlamalı çizitlerde kenar ve köşe sayısı arasındaki şu bağıntıyı elde ederiz:

$$d \geq n-1 \quad (8)$$

Sonuç.4 : Çift kenar (veya köşe) sayısına sahip n-gen çizitlerde $\lambda_1 = 2$, aynı zamanda da çizit atlamalı olacağından $\lambda_n = -2$ olur .

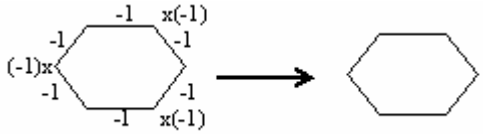
Sonuç.5 : Sav.2'nin sonucu olarak, $n = n_+ + n_0 + n_-$ olduğuna göre, aynı DBD ye sahip çizitlerin de, kendi aralarında, kenar sayıları arttıkça en büyük özdeğerleri büyür (Örnek.2).

Örnek.2 : Aynı DBD ye sahip n=4 nokta sayısına sahip çizitler için en büyük özdeğerin arttığını gösteren örnek.

n=4, DBD=(n_+=1, n_0=2, n_-=1)			n=4, DBD=(n_+=2 n_0=0, n_-=2)		
d=4	d=2	d=1	d=4	d=3	d=2
λ_1= 2.000	**λ_1= 1.414**	**λ_1= 1.000**	**λ_1= 2.170**	**λ_1= 1.618**	**λ_1= 1.000**
λ_2= 0.000	λ_2= 0.000	λ_2= 0.000	λ_2= 0.311	λ_2= 0.618	λ_2= 1.000
λ_3= 0.000	λ_3= 0.000	λ_3= 0.000	λ_3=-1.000	λ_3=-0.618	λ_3=-1.000
λ_4=-2.000	λ_4=-1.414	λ_4=-1.000	λ_4=-1.480	λ_4=-1.618	λ_4=-1.000

Sonuç.6 : Tüm kenarları –1 olan n-gen çizitlerde, kenar (veya köşe) sayısı çift olanlar Hückel durumuna indirgenir ve Sonuç.4' den λ_1=2, λ_n= -2 olur.

Örnek.3 : Sonuç.6' da sözü edilen durum için örnek 6-gen alalım.



Sonuç.7 : Sav.3'e göre, n-gen şeklindeki çizitlerde kenar (veya köşe) sayısı tek olduğunda, Hückel durumundaki çizitlerin DBD'si Möbius durumunda ters döndüğünden, (2) denklemi Sav.3'ü sağlayan Möbius çizitleri için de kullanılır.

7. Sonuç

En alt (en büyük) özdeğerin bulunması için bugüne kadar pek çok çalışma yapılmıştır [9-13]. Bunlardan Yuan, Wilf ve Stanley'e ait kenar ve köşe sayısına bağlı en alt özdeğeri veren formülleri alıp, kendi çizitlerimize uyguladığımızda Yuan'a ait (2) denkleminin en uygun olduğunu gördük. Bu denklemi çizitlerimize uyguladığımızda Sav.2, Hückel ve Möbius çizitleri için özel durumlar ve Sav.3 ortaya çıktı. Ayrıca Sonuç.1-Sonuç.7'de de bu savlardan ve uygulamalardan ortaya çıkan sonuçları inceledik.

İzgesel aralık ve en alt özdeğer denklemleri kullanılarak en üst (en küçük) özdeğer için de iyi bir sınır elde edebiliriz. Bunlar kullanılarak nicem kimyası ve fizikte enerji düzeyleri, özdeciğin kararlılığı veya tepkimenin olabilirliği hakkında ön bilgiler edinilerek büyük bilgisayar hesaplamalardan kurtulabiliriz.

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.

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 In Organic Or Inorganic Chemistry Regarding The Realitive 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 Inorganic 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 İşlerleri Ve Onları Temsil Eden Çizitlerin Cebirsel, Topolojik Sınıflara Ayrılması, Sınıf Değişmezleri; Yeni Eşdeğişim İlkesi; Nicem Fizik ve Kimyasına Uygulamalar", F.Ü. Fen ve Müh. Bilimleri Dergisi, 11, 3, 329-344, 1999.
8. E.T. Tarım ve O. Sinanoğlu, Bir Hermit İşleri Ve Çizitinin En Alt Ve En Üst Özdeğerleri Arasındaki İzgesel Aralığın Bulunması, F.Ü. Fen ve Müh. Bilimleri Dergisi (baskıda), 2004.
9. D. Cvetkovic ve P. Rowlinson, The Largest Eigenvalue Of A Graph: A Survey, Linear Algebra and Its Applications, 28, 3-33, 1990.
10. O. Rojo ve R. Jiménez, A Decreasing Sequence of Upper Bounds for Perron Root, Computers Math. Applic., 28, 8, 9-15, 1994.
11. H.Yuan, A Bound On The Spectral Radius Of Graphs, Linear Algebra Appl., 108, 135-139, 1988.
12. H.S. Wilf, The Eigenvalues Of A Graph and Its Chromatic Numbers, J.London Mathematics Society, 42, 330-332, 1967.
13. R. Stanley, A Bound On The Spectral Radius Of Graphs With Edges, Linear Algebra and Its Applications, 87, 267-269, 1987.
14. O. Sinanoğlu, The New Pictorial Structural Covariance Method For Qualitative Quantum Chemistry II: Arenes With Or Without Polyene Side Chains and Polyene Bridges, Journal of Mathematical Chemistry, 2, 117-136, 1988.
15. O. Sinanoğlu, The New Pictorial Structural Covariance Method For Qualitative Quantum Chemistry III: Fused Polycyclics And Their Ions, Journal of Mathematical Chemistry, 2, 137-154, 1988.
16. O. Sinanoğlu, Chemical Applications Of Topology And Graph Theory, ed. R.B. King, Elsevier, Amsterdam, 57-74, 1983.
17. O.Sinanoğlu, Ten Classes Of Bicyclo[p.q.o] Pi-Hydrocabons, And Their Anions And Cations. Electronic Rules Directly From Structural Formulas, Tedrahedron Letters, 29, 8, 889-892, 1988.
18. A. Balaban, Chemical Applications Of Graph Theory, Academic press, NY, 1976.
19. F. Harary, Graph Theory, Reading, Addison-Wesley, 1969.
20. R.J. Wilson, Introduction To Graph Theory, London, Longman, 1972.