ISSN : 1300 - 2708

FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FIRAT UNIVERSITY

FEN VE MÜHENDİSLİK BİLİMLERİ DERGİSİ

JOURNAL OF SCIENCE
AND ENGINEERING

"I. TÜRK DÜNYASI MATEMATİK SEMPOZYUMU"
ÖZEL SAYISI/ SPECIAL ISSUE

Cilt / Vol. : 11 Sayı / Number : 3

Elazığ, 1999

F.Ü. Fen ve Müh. Bilimleri Dergisi **11**(3), 1999, 345-350

Topolojik Olarak Sınıflandırılmış Çizitlerin ve Tüm İzsiz nxn Hermit İşlerlerinin Kaç Adet Sınıfı Olduğunu Gösterir Formülün Bulunması

Elif Tekin Tarım, Oktay Sinanoğlu*
Yıldız Teknik Evrenkenti, Fen-Edebiyat Bölümcesi, Matematik Bölümü, Şişli, İstanbul,Türkiye
*Yıldız Teknik Evrenkenti, Fen-Edebiyat Bölümcesi, Kimya Bölümü, Şişli, İstanbul,Türkiye;
Yale Evrenkenti, ABD; Hoca Ahmet Yesevî Evrenkenti, Kazakistan

Özet

"Yapısal eşdeğişim ilkesi" [1] ile bir çizitin ("graf") ve onun temsil ettiği Hermit işlerlerinin artı özdeğerlerinin sayısını (n_+), eksi özdeğerlerinin sayısını (n_-) ve sıfır olan özdeğerlerinin sayısını (n_0) buluruz (örneğin, bu sayılar nicem kimyasında bir özdecik veya tepkimede eksicik enerji düzeylerine karşılık gelir).

Yapısal eşdeğişim ilkesinin üç tane kuralı vardır [1]. Bu kurallarla çizit daha basit bir çizite indirgenerek, DBD≡{n_+, n_0, n_-}'si bulunur. Burada n Hermit işlerlerinin üstünde çalıştığı sonlu yöney uzayı, V_n' in boyutu ve $n= n_+ + n_0 + n_-$ dir [1].

Yapısal eşdeğişim ilkesinin kurallarıyla birbirlerinden elde edilen bütün çizitler aynı eşdeşlik sınıflarına aittirler [5,6]. Yani aynı DBD'ye sahip çizitler bir ilinsel ("topolojik") sınıf oluşturur [2-6].

Bu çalışmada nxn boyutlu, izi ("trace") sıfır olan Hermit işlerleri ve onların n-noktalı çizitlerinin kaç adet ilinsel sınıfı olduğunu veren formülü bulduk.

How Many Topological Equivalence Classes Are There for nxn Traceless Hermitian Operators and for all the n-point "Simple Graphs" ?

Abstract

The numbers of positive, null and negative eigenvalues (n_+, n_0 and n_- respectively) of any Hermitian operator and of the graphs that represent it are found pictorially using the new "principle of linear covariance " [1] and the three pictorial rules [2-6] directly from the graphs. The rules also allow one to obtain all the graphs that belong to the same topological-algebraic equivalence class [1-6]. Each class is characterized by the three integers n_+, n_0 and n_- which are topological invariants [1-5].

In this paper, given $\underline{n}$, the dimension of the linear vector space V_n on which nxn Hermitian operators act (also n=no. of vertices of representing graphs), we find the formulae which yield the number of possible equivalence classes the n-point "simple graphs" and the nxn traceless Hermitian operators.

Giriş

Sinanoğlu' nun bu kurultaydaki bildirisinde [1] sonlu bir Hilbert alt-uzayı V_n üzerindeki Hermit işlerleri ("operatör") ve onları temsil eden çizitler ilinsel ("topolojik") eşdeşlik ("equivalence") sınıflarına ayrılmış, her bir sınıfı belirleyen ilinsel değişmezler bulunmuştu. Bu değişmezler {n_+, n_0, n_-; $n_+ + n_0 + n_- = n$} şeklinde üç tamsayı idi. Tamsayılar Hermit işlerlerinin V_n üstü Hermit işlerlerinin temsili nxn dizeylerin ("matris") özdeğer türlerini belirliyor, n_+ tanesinin (+) değerli, n_0 tanesinin sıfır değerli ve n_- tanesinin de (-) değerli olduğunu bildiriyordu.

Bu bildiride belli bir n için V_n üzeri tüm Hermit işlerlerinin (ve onları temsil eden tüm çizitlerin) kaç tane eşdeşlik sınıfına ayrıldığı sorusunu ele alacağız. Önce izi ("trace") sıfır olan Hermit işlerlerinin ve onları temsil eden "basit çizitlerin" ("simple graph") sınıf sayısını bulacağız.

nxn boyutlu Hermit işlerleri ve onların n-noktalı çizitlerinin kaç adet ilinsel sınıfı olduğu sorusu, n sayısının $n= n_+ + n_0 + n_-$ ($n \geq n_+, n_0, n_- \geq 0$) şeklindeki toplamının,

ama izin sıfır olması koşulundan gelen sınırlamalarla, kaç türlü yazılabileceği sorusuna dönüştürülebilir. Bunun için de aşağıdaki iki savı ("teorem") kullanacağız.

Bu savlardan birincisi bize üç tamsayının toplamının ($n=n_+ + n_0 + n_-$), bazı sınırlamalar olmaksızın, kaç türlü yazılacağını verir. Yani 3 çeşit ögesi olan bir kümeden kaç tane n-li bireşimlerin yazılacağını bulacağız. Ayrıca, örneğin 3 çeşit kurabiyesi olan pastanede 6-lı kurabiye bireşimleri yapmak istersek, bazı ögeler tekrarlı olacaktır. Yani tekrarlı ögeleri de gözönüne almalıyız.

Sav.1. Tekrarlı ögelere izin verildiğinde s çeşit ögesi olan bir kümeden alınacak r tane öge ("r-bireşimler"), öge cinsi belirtilmeden, C (s+r-1, r) tane seçilebilir [7a].

$$C(s+r-1,r)=\frac{(s+r-1)!}{(s-1)!\,r!} \qquad (1)$$

Şimdi sınırlamalar yapıldıktan sonraki bir kümenin öge sayısını bulalım. $P_1,P_2,...,P_s$ koşullarını sağlayan ögelerin bulunduğu bir A kümesinin ögelerinin sayısını bulmak istersek, bu A kümesindeki P_i koşulunu sağlayan ögelerin bulunduğu bir altküme A_i olmak üzere; bu sayı, A_i altkümelerinin kesişim kümesinin öge sayısını verir ve

$$|A_1 \cap A_2 \cap .... \cap A_s| = N(P_1P_2...P_s) \qquad (2)$$

şeklinde yazılır[7b].

$P_1, P_2,...,P_s$ koşullarını taşımayan ögelerin sayısı $N(P_1'P_2'...P_s')$ ve kümedeki ögelerin sayısı N ile gösterilsin. O zaman bu

$$N(P_1'P_2'...P_s')=N-|A_1 \cup A_2 \cup .... \cup A_s| \qquad (3)$$

olarak yazılır [7b].

Sav.2. $A_1,A_2,...,A_s$ sonlu kümeler olsun. Bu kümelerin bileşim kümesinin birbirinden değişik ögelerinin sayısı

$$|A_1 \cup A_2 \cup .... \cup A_s| = \sum_{i\geq 1}^{s}|A_i| - \sum_{i,j\geq 1}^{s}|A_i \cap A_j| + \sum_{i,j,k\geq 1}^{s}|A_i \cap A_j \cap A_k| - ... \qquad (4)$$
$$.... + (-1)^{s+1}|A_1 \cap A_2 \cap ... \cap A_s|$$

dır. ("İçerme-Dışarma İlkesi", "The Principle of Inclusion-Exclusion") [7c].

O halde, $P_1, P_2,...,P_s$ koşullarını taşımayan ögelerin sayısı

$$N(P_1'P_2'...P_s')=N-\sum_{i\geq 1}^{s}N(P_i)+\sum_{i,j\geq 1}^{s}N(P_iP_j)-\sum_{i,j,k\geq 1}^{s}N(P_iP_jP_k)+...+(-1)^s N(P_1P_2...P_s) \qquad (5)$$

olarak bulunur [7b].

----------o----------

Sav.1'e göre bizim sorumuz için s=3 ve r = n dir. O zaman C(3+n-1,n)=C(n+2,n) olur. Yani,

$$C(n+2,n)=\frac{(n+2)!}{2!\,n!}=\frac{(n+2)(n+1)}{2} \qquad (6)$$

çeşit sınıf elde edilecektir. Ayrıca $n=n_+ + n_0 + n_-$ idi ve $0 \le n_0 \le n$ dir.

$n_0 = n$ olduğunda $\Rightarrow n_- = n_+ = 0$ olur.

$n_0 < n$ olduğunda $\Rightarrow n_+ + n_- = n - n_0$ olur.

Çizit kurallarıyla[1] [1] indirgenmiş bir çizit, Hermit işlerlerinin bir temsilidir. Bunun gerçel(tabii) özdeğerleri 3 çeşittir (artı olanlar, sıfır olanlar, eksi olanlar).Ve bu özdeğerlerin toplamı sıfırdır. Çünkü burda çizitlerimizin her bir noktasında kendisinden-kendisine bir çizgi("loop","kulak") olmayanları ve izi sıfır olan Hermit işlerlerini alıyoruz (İz H=0). Dolayısıyla $n_+ \neq 0$ ise $n_- = 0$ olamaz ($n_- \neq 0$ dır). Tersine $n_- \neq 0$ ise $n_+ \neq 0$ olmalıdır. O halde (6) denklemi ile verilen toplam eşdeşlik sınıflarının sayısından ($n_+ = 0$ ve $n_- \neq 0$) ile ($n_- = 0$ ve $n_+ \neq 0$) koşullarını sağlayan sınıfların sayısını çıkarmalıyız. Bu nedenle (Sav.2'den);

P_1 : $n_+ = 0$ ve $n_- \neq 0$

P_2 : $n_- = 0$ ve $n_+ \neq 0$

olmak üzere,

K : Toplam eşdeşlik sınıflarının sayısı

$K(P_1)$: $n_+ = 0$ ve $n_- \neq 0$ olan eşdeşlik sınıflarının sayısı

$\Rightarrow n = n_0 + n_-$; $s=2$, $r=n \Rightarrow P_{11}$: $n_0 = 0$ ve $n_- = n$

$K(P_{11})$: $n_0 = 0$ ve $n_- = n$ olanların eşdeşlik sınıflarının sayısı

$K(P_2)$: $n_- = 0$ ve $n_+ \neq 0$ olan eşdeşlik sınıflarının sayısı

$\Rightarrow n = n_0 + n_+$; $s=2$, $r=n \Rightarrow P_{21}$: $n_0 = 0$ ve $n_+ = n$

$K(P_{21})$: $n_0 = 0$ ve $n_+ = n$ olanların eşdeşlik sınıflarının sayısı

$K(P_1P_2)$: ($n_+ = 0$ ve $n_- \neq 0$) ve ($n_- = 0$ ve $n_+ \neq 0$) olan eşdeşlik sınıflarının sayısı

$$K = C(n+2,n) = \frac{(n+2)(n+1)}{2} \qquad \text{(Denklem .1' den)} \qquad (7)$$

$$K(P_1) = K(P_{11}) = C(2+n-1,n) - C(n,n) = n$$

$$K(P_2) = K(P_{21}) = C(2+n-1,n) - C(n,n) = n$$

$K(P_1P_2) = 0$ çünkü ($n_+ = 0$ ve $n_- \neq 0$) ve ($n_- = 0$ ve $n_+ \neq 0$) olan eşdeşlik sınıfı yok.

$$K(P_1'P_2') = K - K(P_1) - K(P_2) + K(P_1P_2) = \frac{(n+2)(n+1)}{2} - n - n + 0$$

olur. Böylece P_1 ve P_2 koşullarını içermeyen çözüm,

$$K(P_1'P_2') = \frac{(n+2)(n+1)}{2} - 2n \qquad (8)$$

---

[1] **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 [1].

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[1].

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

şeklinde elde edilir.

Bu formülü cebirsel yolla da elde edebiliriz [8]:

$$\left.\begin{array}{llll} n_+ = 0, & n_0 = 0,1,...n, & n_- = n, n-1,...0 & \Rightarrow n+1 \text{ tane} \\ n_+ = 1, & n_0 = 0,1,..,n-1, & n_- = n-1, n-2,...0 & \Rightarrow n \text{ tane} \\ n_+ = 2, & n_0 = 0,1,..,n-2, & n_- = n-2, n-3,...0 & \Rightarrow n-1 \text{ tane} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ n_+ = n-1, & n_0 = 0,1, & n_- = 1,0 & \Rightarrow 2 \text{ tane} \\ n_+ = n, & n_0 = 0, & n_- = 0 & \Rightarrow 1 \text{ tane} \end{array}\right\} \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

$$\Rightarrow \quad K = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

Tüm çizit sınıf sayısından çıkarılacaklar:

1) $n_+=0$ ve $n_-\neq 0$

2) $n_-=0$ ve $n_+\neq 0$

idi. O halde

$$\left.\begin{array}{llll} n_+ = 0, & n_0 = 0,...,n-1, & n_- = n,...1 & \Rightarrow n \text{ tane} \\ n_+ = n,..,1, & n_0 = 0,...,n-1, & n_- = 0 & \Rightarrow n \text{ tane} \end{array}\right\} 2n$$

elde edilir [8]. Şimdi elde ettiğimiz bu sayıyı K' dan çıkartırsak, (8) denklemini buluruz.

$$\Rightarrow \quad K(P_1'P_2') = \frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n$$

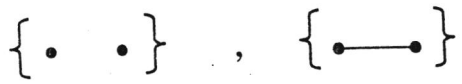
Cetvel.1 (8) denklemiyle bazı n-noktalı çizitlerin eşdeşlik sınıflarının sayısının bulunması.

n	$\frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n$
1	1
2	2
3	4
4	7
5	11
6	16
7	22
8	29
9	37
10	46

Basit resimli kurallarla[1] [1] birbirlerinden elde edilen bütün çizitler aynı eşdeşlik sınıflarındadırlar [5]. Başka deyişle aynı $\{n_+, n_0, n_-\}$'ye sahip çizitler bir ilinsel

("topolojik") sınıf oluşturur [2, 3, 4]. Aşağıdaki örneklerde n-noktalı çizitlerin eşdeşlik sınıfları n=2,3,4 için verilmiştir.

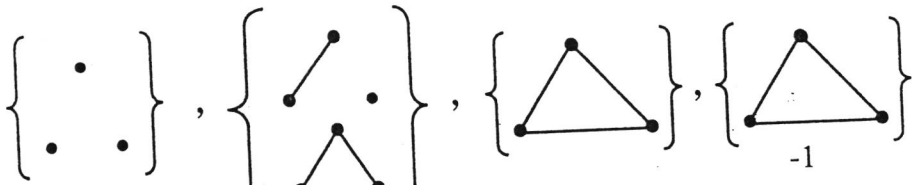
Örnekler

1) 

$\{n_+=0, n_0=2, n_-=0\}$ $\{n_+=1, n_0=0, n_-=1\}$

$$K(P_1'P_2') = \frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n = \frac{(2+1)(2+2)}{2} - 2.2 = 2$$

n=2 noktalı bir çizitin 2 tane eşdeşlik sınıfı vardır.

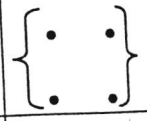
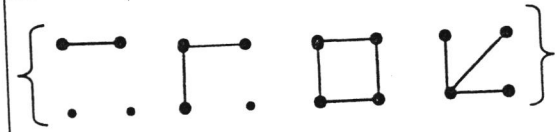
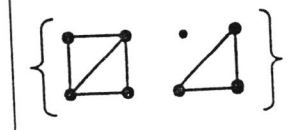
2) 

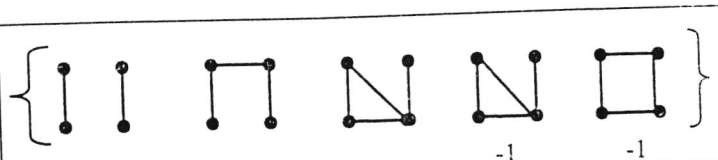
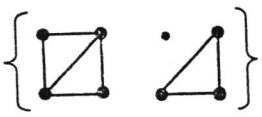
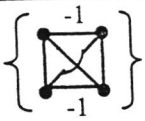
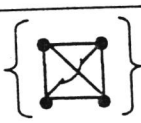
$\{n_+=0, n_0=3, n_-=0\}$ $\{n_+=1, n_0=1, n_-=1\}$ $\{n_+=1, n_0=0, n_-=2\}$ $\{n_+=2, n_0=0, n_-=1\}$

$$K(P_1'P_2') = \frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n = \frac{(3+1)(3+2)}{2} - 2.3 = 4$$

bulunur. Yani n=3 noktalı bir çizitin 4 tane eşdeşlik sınıfı vardır.

3) n=4 için eşdeşlik sınıfları aşağıdaki gibidir.

Eşdeşlik Sınıfları	Bu Sınıflardaki Çizitler
$\{n_+=0, n_0=4, n_-=0\}$	
$\{n_+=1, n_0=2, n_-=1\}$	
$\{n_+=1, n_0=1, n_-=2\}$	

$\{n_+=2, n_0=0, n_-=2\}$	
$\{n_+=2, n_0=1, n_-=1\}$	
$\{n_+=3, n_0=0, n_-=3\}$	
$\{n_+=1, n_0=0, n_-=3\}$	

$$K(P_1'P_2') = \frac{(n+1)(n+2)}{2} - 2n = \frac{(4+1)(4+2)}{2} - 2.4 = 7$$

n=4 noktalı çizitler için 7 tane eşdeşlik sınıfı vardır.

Bundan sonra yapılacak çalışma, her eşdeşlik sınıfları içindeki çizitlerin sayısını bulmak olacaktır. Ayrıca, izi sıfır olmayan Hermit işlerlerinin (ve "kulaklı" çizitlerin) sınıflandırılmalarını da ele alacağız.

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, 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.
4. 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.
5. O.Sinanoğlu, A Principal of Linear Covariance for Quantum Mechanics and Its Consequences Taking one Beyond Symmetry, Z. Naturforsch. ,52a, 46-48, 1997.
6. O.Sinanoğlu, Sonlu Yöney Uzayları Üzerine Kurulan Cebirsel Yapılar, Hermit İşlerleri ve Onları Temsil Eden Çizitlerin Cebirsel, Topolojik Sınıflara Ayrılması, Sınıf Değişmezleri; Yeni Değişim İlkesi; Nicem Fizik ve Kimyasına Uygulamalar, I.Türk Dünyası Kurultayı, Fırat Üniversitesi, Elazığ, 1999.
7. K.H.Rosen, Discrete Mathematics and its Applications, McGraw-Hill,Inc. (NewYork):a)285, b)339-341, c)337, 1995.
8. E.T.Tarım, Yapısal Değiştirim İlkesinde En Üst ve En Alt Özdeğerlerin Bulunması, Örüt Kuramı ve Nicem Kimyasında Uygulamalar, Doktora tezi, YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, 1999.