Kharazmi University

Mathematical Researches

Print ISSN: 2588-2546
Online ISSN: 2588-2554

Homepage: https://jemr.khu.ac.ir/

On the characteristic polynomial and the spectrum of Kragujevac trees

Abbas Heydari [1] ✉

1. Arak University of Technology, Arak, Iran. ✉ E-mail: heydari@arakut.ac.ir

Article Info

Article type:
Research Article

Article history:
Received:
3 November 2019
Received in revised form:
23 June 2021
Accepted:
13 September 2021
Published online:
3 December 2023

Keywords:
Kragujevac tree,
Characteristic polynomial,
Spectrum,
Laplacian Spectrum,
Energy graph.
Almost contact structure,
B-metrics,
Natural metric,
Sphere bundle,
Structure tensor.

ABSTRACT

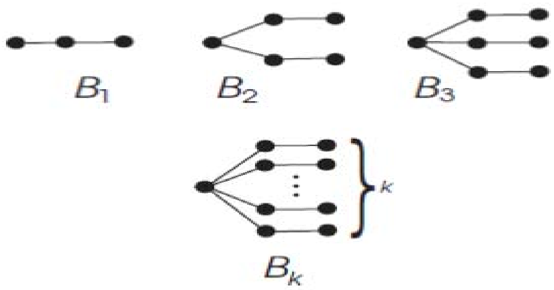
Introduction

Let G be a simple connected graph with vertex set $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. The topological distance between vertices v_i and v_j of G is the length of a shortest path joining v_i and v_j. Let T be tree with k pendant (= vertices of degree one), labelled by $v_1, v_2, \dots, v_k$. The terminal distance matrix of T, is the square matrix of order k whose (i, j) −entry is the topological distance between v_i and v_j.

The class of Kragujevac trees emerged in several studies addressed to solve the problem of characterizing the molecular graphs with respect to some topological indices such as the atom-bond connectivity index.

Definition 1. Let P_3 be the 3-vertex tree, rooted at one of its terminal vertices. For $k = 2,3,\dots$, construct the rooted tree B_k by identifying the roots of k copies of P_3 . The vertex obtained by identifying the roots of P_3-trees is the root of B_k .

Definition 2. Let $d \geq 2$ be an integer. Let $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d$ be rooted trees specified in Definition 1. A Kragujevac tree T is a tree possessing a vertex of degree d, adjacent to the roots of $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d$. This vertex is said to be the central vertex of T, whereas d is the degree of T. The subgraphs $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d$ are the branches of T. If all branches of T are isomorphic, T is called regular Kragujevac tree.



Results and discussion

Let $\Phi_G(\lambda)$ and $P_G(\lambda)$ denote the characteristic polynomial of the adjacency matrix and the Laplacian matrix of G. The following results are obtained in this paper.

Theorem 1. Let $k, d \geq 2$ and $T_{k,d}$ be a regular Kragujevac tree of order k and degree d. Then

$$\Phi_{T_{k,d}}(\lambda) = (\lambda^2-1)^{(k-1)d}[\lambda(\lambda^2-k-1)]^{d-1}(\lambda^4-(k+d+1)\lambda^2+d),$$

$$P_{T_{k,d}}(\lambda) = \lambda(\lambda^2-3\lambda+1)^{d(k-1)}(\lambda^3-(k+4)\lambda^2+(2k+4)\lambda - 1)^{d-1}$$
$$(\lambda^3-(k+d+4)\lambda^2+(kd+2k+3d+4)\lambda-2kd-d-1).$$

Corollary 1. Let T be a Kragujevac tree of degree d, ρ denote the spectral radius and Δ denote the maximum degree of (non-central) vertices of T, then

$$\rho \leq \sqrt{\frac{\Delta+d+1+\sqrt{(\Delta+d+1)^2-4d}}{2}}.$$

Corollary 2. Let T be a Kragujevac tree of degree d and $E(T)$ denote the energy of T, then

$$E(T) \leq \sqrt{2\Delta+2d+2+2\sqrt{\left(\Delta+d+1\right)^2-4\Delta}} + \sqrt{2\Delta+2d+2+2\sqrt{\left(\Delta+d+1\right)^2-4\Delta}} + 2d\left(\Delta-1\right)+2(d-1)\sqrt{\Delta-1}.$$

Corollary 3. Let $k, d \geq 2$ and $T_{k,d}$ be a regular Kragujevac tree of order k and degree d. The Kirshhof index of $T_{k,d}$ is given as follows:

$$Kf\left(T_{k,d}\right) = -d^2(10k^2+7k+1)-4d(k^2+k).$$

Conclusion

● The characteristic polynomial of adjacency and Laplacian matrix of the regular Kragujevac tree of order k and degree d is computed.

● An upper bound for the spectral radius and the energy of the Kragujevac trees is obtained.

● The Kirshhof index of Kragujejac tree of order k and degree d is computed.

How to cite: Heydari, Abbas,, (2023). On the characteristic polynomial and the spectrum of Kragujevac trees. *Mathematical Researches*, 9 (2), 63 - 74.

شاپا چاپی: ۲۵۴۶-۲۵۸۸
شاپا الکترونیکی: ۲۵۵۴-۲۵۸۸

پژوهش‌های ریاضی

Homepage: https://mmr.khu.ac.ir/

چندجمله‌ای مشخصه و طیف درخت کراگوجواچ

عباس حیدری[۱] ✉

۱. گروه علوم پایه، دانشگاه صنعتی اراک، اراک، ایران. ✉ رایانامه: heydari@arakut.ac.ir

اطلاعات مقاله

نوع مقاله: مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۸/۱۲
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۴/۲
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۶/۲۲
تاریخ انتشار: ۱۴۰۲/۹/۱۲

واژه‌های کلیدی:
درخت کراگوجواچ،
چندجمله‌ای مشخصه،
طیف،
طیف لاپلاسی،
انرژی گراف.

چکیده

درخت کراگوجواچ نوعی خاص از درخت‌های مورد استفاده در نمایش گراف‌های مولکولی است که در چند سال گذشته مورد توجه محققین در نظریه گراف قرار گرفته است. در این مقاله چندجمله‌ای مشخصه و طیف ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی درخت کراگوجواچ منتظم محاسبه می‌شود. به‌عنوان کاربردی از نتایج بدست آمده، یک کران بالا برای شعاع طیفی، انرژی و شاخص کیرشهوف درخت‌های کراگوجواچ محاسبه خواهد شد.

استناد: حیدری، عباس؛ (۱۴۰۲). چندجمله‌ای مشخصه و طیف درخت کراگوجواچ. *پژوهش‌های ریاضی*، ۹ (۲)، ۶۳ - ۷۴.

ناشر: دانشگاه خوارزمی

مقدمه

فرض می‌کنیم G یک گراف همبند ساده با مجموعه رئوس $V(G) = \{v_1, v_2, v_3, \dots, v_n\}$ و مجموعه یال‌های $E(G)$ باشد. دو رأس u و v از این گراف را مجاور می‌نامیم (با نماد $u \sim v$)، هرگاه توسط یک یال از گراف به یکدیگر متصل شده باشند. درجه رأس v از این گراف با نماد $\deg(v)$ برابر تعداد یال‌های متصل به آن رأس می‌باشد. ماتریس مجاورت گراف G، با نماد $A = (a_{ij})$، ماتریسی مربعی از مرتبه n است که در آن $a_{ij} = 1$ با شرط $v_i \sim v_j$، در غیر این صورت $a_{ij} = 0$. در سراسر این مقاله از نماد $\Phi(\lambda) = \det(\lambda I - A(G))$ برای نمایش چندجمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت گراف G استفاده خواهیم کرد. ماتریس لاپلاسی گراف G، با نماد $L(G) = (l_{ij})$ نیز یک ماتریس مربعی از مرتبه n می‌باشد که به صورت زیر تعریف می شود:

$$l_{ij} = \begin{cases} \deg(v_i), & \text{اگر } i = j \\ -a_{ij}, & \text{اگر } i \neq j. \end{cases}$$

چندجمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی گراف G را با نماد $P(G) = \det(\lambda I - L(G))$ نشان خواهیم داد. مجموعه مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف G را طیف گراف و مجموعه مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسی را طیف لاپلاسی گراف G می‌نامیم. از مشهورترین توصیف‌گرهای عددی گراف‌ها (گراف‌های مولکولی) می‌توان به انرژی و شعاع طیفی گراف اشاره کرد. مجموع قدرمطلق مقادیر ویژه ماتریس مجاورت G، انرژی گراف نامیده و با نماد $\varepsilon(G)$ نشان داده می‌شود. همچنین بزرگترین مقدار ویژه این ماتریس را شعاع طیفی G نامیده و با نماد $\rho(G)$ نشان می‌دهیم.

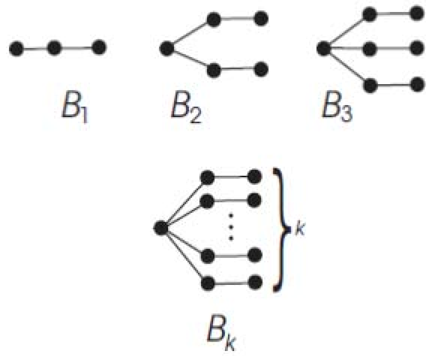
یک گراف همبند بدون دور، درخت نامیده می‌شود. اگر یک رأس از گراف به عنوان رأس ریشه‌ای مشخص شده باشد، درخت را ریشه‌دار[1] می‌نامند. درخت کراگوجواچ به دلیل کاربرد آن در شاخص‌های توپولوژیک گراف‌های مولکولی در سالیان اخیر مورد مطالعه محققین قرار گرفته است [1-3]. در ادامه این درخت معرفی می شود.

تعریف ۱. فرض می‌کنیم P_3 درخت سه رأسی ریشه‌دار باشد که رأس ریشه‌ای آن یکی از رئوس انتهایی آن است. به‌ازای $k = 2,3,4, \dots$ فرض می‌کنیم B_k نشان دهنده یک درخت ریشه‌دار باشد که از یکی گرفتن[2] رئوس ریشه‌ای k تکرار از درخت P_3 بدست آمده باشد (شکل ۱). آن رأس از B_k را که از یکی گرفتن رئوس ریشه‌ای درخت‌های P_3 بدست آمده، رأس ریشه‌ای B_k می‌نامیم.

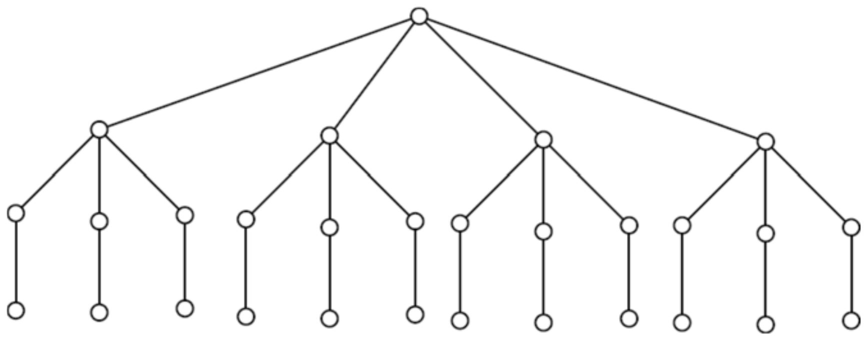
تعریف ۲. فرض می‌کنیم $d \geq 2$ عددی صحیح و β_1، β_2، ...، β_d درخت‌هایی ریشه‌دار از درخت‌های معرفی شده در تعریف ۱ باشند. یک *درخت کراگوجواچ*[3] درختی است شامل یک رأس درجه d که با هر یک از رئوس ریشه‌ای درخت‌های β_1، β_2، ...، β_d مجاور شده باشد. این رأس را *رأس مرکزی درخت* کراگوجواچ می‌نامیم. هر یک از درخت‌های β_1، β_2، ...، β_d نیز یک شاخه از این درخت نامیده می‌شوند. ممکن است برخی از شاخه‌های این درخت یکسان باشند. در صورتی که تمام شاخه‌های درخت کراگوجواچ یکسان باشند، این درخت را *درخت کراگوجواچ منتظم* می‌نامیم. یک درخت

[1] Rooted tree
[2] Identifying
[3] Kragujevac tree

کراگوجواچ منتظم را که درجه رأس مرکزی آن برابر d و هریک از شاخه‌های آن گراف B_k باشد، با نماد $T_{k,d}$ نشان می‌دهیم (شکل ۲).



شکل ۱. درخت ساخته شده در تعریف ۱



شکل ۲. درخت کراگوجواچ منتظم $T_{3,4}$

فرض می‌کنیم H یک گراف ساده مرتبه n و $G=\{G_1, G_2, G_3, \dots, G_n\}$ یک دنباله از گراف‌های ساده ریشه‌دار و به ازای هر $1 \le \mathrm{i} \le n$، x_i رأس ریشه‌ای از گراف G_i باشد. گراف حاصل از یکی در نظر گرفتن رأس ریشه‌ای گراف G_i با رأس i-ام گراف H، به ازای هر $1 \le \mathrm{i} \le n$، حاصل‌ضرب ریشه‌ای[1] گراف H توسط دنباله G نامیده و با نماد $H(G)$ نشان داده می‌شود. با استفاده از این عملگر می‌توان گراف‌های با ساختار پیچیده‌تر را از گراف‌هایی ساده‌تر ساخت. بنابراین محاسبه برخی مفاهیم نظریه گراف مانند چندجمله‌ای مشخصه و طیف برای گراف‌های پیچیده‌تر را می‌توان با استفاده از آن مفاهیم برای گراف‌های ساده‌تر انجام داد. با استفاده از این روش، مفاهیم مذکور را برای درخت کراگوجواچ منتظم بر حسب اعداد صحیح k و d محاسبه خواهیم کرد. ابتدا یک قضیه اساسی در ارتباط با محاسبه چندجمله‌ای مشخصه ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی حاصل‌ضرب ریشه‌ای گراف‌ها بیان می‌کنیم.

[1] Rooted product

اگر G یک گراف ریشه‌دار و x رأس ریشه‌ای آن باشد، آن‌گاه گراف حاصل از حذف رأس x را با نماد G' نشان می‌دهیم. در صورتی که G گراف تک رأسی باشد، قرار می‌دهیم $\Phi_{G'}(\lambda)=1$. همچنین اگر $\overline{L}(G)$ ماتریس حاصل از حذف اولین سطر و اولین ستون از ماتریس لاپلاسی G باشد، آن‌گاه قرار می‌دهیم:

$$\overline{\mathrm{P}_G}(\lambda)=\det\left(\lambda I-\overline{L}(G)\right).$$

توجه شود اگر G گراف تک رأسی باشد، قرار می‌دهیم $\overline{\mathrm{P}_G}(\lambda)=1$.

قضیه ۱.*[4]* فرض می‌کنیم H یک گراف ساده مرتبه n، $A(H)$ ماتریس مجاورت H و $G=\{G_1,G_2,G_3,\dots,G_n\}$ یک دنباله از گراف‌های ساده ریشه‌دار باشد. در این صورت $\Phi_{H(G)}(\lambda)=(-1)^n\det(M)$ که ماتریس M با تعریف زیر مشخص می‌شود:

$$M_{ij}=\begin{cases}-\Phi_{G_i}(\lambda), & i=j \ \text{اگر}\\ \Phi_{G_i'}(\lambda), & i\neq j, A(H)_{ij}=1 \ \text{اگر}\\ 0, & i\neq j, A(H)_{ij}=0 \ \text{اگر}\end{cases}$$

همچنین $P_{H(G)}(\lambda)=\det(N)$ که در آن

$$N_{ij}=\begin{cases}P_{G_i}(\lambda), & i=j \ \text{اگر}\\ \overline{P}_{G_i'}(\lambda), & i\neq j, A(H)_{ij}=1 \ \text{اگر}\\ 0, & i\neq j, A(H)_{ij}=0 \ \text{اگر}.\end{cases}$$

۱. نتایج اصلی

در این بخش ابتدا درخت کراگوجواچ را با استفاده از حاصل‌ضرب ریشه‌ای گراف‌های ساده‌تر بیان و در ادامه چندجمله‌ای مشخصه و طیف ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی این درخت را با توجه به قضیه ۱ محاسبه خواهیم کرد.

اگر $G=\{P_2,P_2,\dots,P_2\}$ یک دنباله k-تایی شامل مسیرهایی از مرتبه ۲ (شامل دو رأس و یک یال) و S_{k+1} گراف ستاره مرتبه $k+1$ باشد، در این صورت گراف B_k را که در تعریف ۱ معرفی شد، می‌توان با استفاده از حاصل‌ضرب ریشه‌ای S_{k+1} توسط دنباله G به صورت زیر ساخت:

$$B_k=S_{k+1}(P_1,P_2,P_2,\dots,P_2).$$

لازم به ذکر است که در تساوی بالا گراف تک رأسی P_1 به دلیل این‌که در ساخت B_k، رأس مرکزی S_{k+1} تغییری نمی‌کند در نظرگرفته شده است.

لم۱. اگر x و y دو متغیر دلخواه باشند، آن‌گاه فرمولی صریح برای محاسبه دترمینان ماتریس مربعی مرتبه $n+1$ زیر بدست می‌آید:

$$\begin{vmatrix} x & -1 & \dots & -1 \\ -1 & y & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & 0 & y \end{vmatrix} = y^{n-1}(xy-n).$$

اثبات. با استفاده از استقراء روی عدد طبیعی n به آسانی قابل استنتاج است. ■

نتیجه ۱. چندجمله‌ای مشخصه ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی گراف B_k با فرمول‌های صریح زیر محاسبه می‌شوند:

$$\Phi_{B_k}(\lambda) = \lambda(\lambda^2 - k - 1)(\lambda^2 - 1)^{k-1},$$

$$P_{B_k}(\lambda) = \lambda(\lambda^2 - (k+3)\lambda + 2k + 1)(\lambda^2 - 3\lambda + 1)^{k-1}.$$

اثبات. می‌دانیم $\Phi_{P_2}(\lambda) = \lambda^2 - 1$ و $\Phi_{P_1}(\lambda) = \lambda$. با توجه به این‌که $\Phi_{P_2'}(\lambda) = \lambda$، $\Phi_{P_1'}(\lambda) = 1$ و $B_k = S_{k+1}(P_1, P_2, P_2, \dots, P_2)$، با جای‌گذاری این دو چندجمله‌ای در ماتریس معرفی شده در قضیه ۱، سپس استفاده از لم ۱ داریم:

$$\Phi_{B_k}(\lambda) = (-1)^{k+1} \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ \lambda & -\lambda^2+1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \lambda & 0 & -\lambda^2+1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \lambda & 0 & 0 & \dots & -\lambda^2+1 & 0 \\ \lambda & 0 & 0 & \dots & 0 & -\lambda^2+1 \end{vmatrix}$$

$$= \lambda^k \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ -1 & (\lambda^2-1)/\lambda & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & (\lambda^2-1)/\lambda & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & 0 & 0 & \dots & (\lambda^2-1)/\lambda & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & (\lambda^2-1)/\lambda \end{vmatrix}$$

$$= \lambda^k \left(\frac{\lambda^2-1}{\lambda}\right)^{k-1} \left(\lambda\frac{\lambda^2-1}{\lambda} - k\right) = \lambda(\lambda^2-1)^{k-1}(\lambda^2-k-1).$$

از طرفی درجه رأس وسط در مسیرهای آویخته گراف B_k برابر ۲ می‌باشد در حالی‌که درجه این رئوس در P_2 برابر ۱ است، بنابراین لازم است که در محاسبه $P_{B_k}(\lambda)$ عبارت $\lambda^2 - 3\lambda + 1$ به‌جای $P_{P_2}(\lambda)$ و عبارت $\lambda - 1$ به‌جای $\bar{P}_{P_2}(\lambda)$ جای‌گذاری شوند. چون $\overline{P_{P_1}}(\lambda) = 1$، با استفاده از قضیه ۱ و لم ۱ داریم:

$$P_{B_k}(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda-k & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ \lambda-1 & \lambda^2-3\lambda+1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \lambda-1 & 0 & \lambda^2-3\lambda+1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \lambda-1 & 0 & 0 & \dots & \lambda^2-3\lambda+1 & 0 \\ \lambda-1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda^2-3\lambda+1 \end{vmatrix}$$

$$= (\lambda-1)^k \begin{vmatrix} \lambda-k & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & \frac{\lambda^2-3\lambda+1}{\lambda-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{\lambda^2-3\lambda+1}{\lambda-1} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & \frac{\lambda^2-3\lambda+1}{\lambda-1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\lambda^2-3\lambda+1}{\lambda-1} \end{vmatrix}$$

$$= (\lambda-1)^k \left(\frac{\lambda^2-3\lambda+1}{\lambda-1}\right)^{k-1} \left((\lambda-k)\frac{\lambda^2-3\lambda+1}{\lambda-1} - k\right)$$

$$= \lambda(\lambda^2-(k+3)\lambda+2k+1)(\lambda^2-3\lambda+1)^{k-1}.$$

بنابراین اثبات کامل می‌شود. ■

در ادامه با استفاده از نتیجه ۱ و حاصل‌ضرب ریشه‌ای گراف‌ها، چندجمله‌ای مشخصه ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی درخت کراگوجواچ منتظم را محاسبه خواهیم کرد.

قضیه ۲. فرض می‌کنیم n و $d \geq 2$ اعدادی صحیح مثبت باشند. در این صورت چندجمله‌ای مشخصه ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی درخت کراگوجواچ منتظم $T_{k,d}$ به ترتیب زیر محاسبه می‌شود:

$$\Phi_{T_{k,d}}(\lambda) = (\lambda^2-1)^{(k-1)d}[\lambda(\lambda^2-k-1)]^{d-1}(\lambda^4-(k+d+1)\lambda^2+d),$$

$$P_{T_{k,d}}(\lambda) = \lambda(\lambda^2-3\lambda+1)^{d(k-1)}(\lambda^3-(k+4)\lambda^2+(2k+4)\lambda-1)^{d-1}$$
$$(\lambda^3-(k+d+4)\lambda^2+(kd+2k+3d+4)\lambda-2kd-d-1).$$

اثبات. اگر B_k یکی از شاخه‌های درخت $T_{k,d}$ و S_{d+1} گراف ستاره مرتبه $d+1$ باشد، آن‌گاه

$$T_{k,d} = S_{d+1}(P_1, B_k, B_k, \ldots, B_k).$$

بنابراین با استفاده از قضیه ۱ داریم:

$$\Phi_{T_{k,d}}(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & \cdots & -1 & -1 \\ -\Phi_{B_k'}(\lambda) & \Phi_{B_k}(\lambda) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\Phi_{B_k'}(\lambda) & 0 & \Phi_{B_k}(\lambda) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\Phi_{B_k'}(\lambda) & 0 & 0 & \cdots & \Phi_{B_k}(\lambda) & 0 \\ -\Phi_{B_k'}(\lambda) & 0 & 0 & \cdots & 0 & \Phi_{B_k}(\lambda) \end{vmatrix}$$

$$= \left(\Phi_{B_k'}(\lambda)\right)^d \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & \cdots & -1 & -1 \\ -1 & \frac{\Phi_{B_k}(\lambda)}{\Phi_{B_k'}(\lambda)} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \frac{\Phi_{B_k}(\lambda)}{\Phi_{B_k'}(\lambda)} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & 0 & 0 & \cdots & \frac{\Phi_{B_k}(\lambda)}{\Phi_{B_k'}(\lambda)} & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\Phi_{B_k}(\lambda)}{\Phi_{B_k'}(\lambda)} \end{vmatrix}$$

$$= \left(\Phi_{B_k'}(\lambda)\right)^d \left(\frac{\Phi_{B_k}(\lambda)}{\Phi_{B_k'}(\lambda)}\right)^{d-1} \left(\lambda \frac{\Phi_{B_k}(\lambda)}{\Phi_{B_k'}(\lambda)} - d\right). \qquad (1)$$

نظر به این‌که B_k' شامل k تکرار از مسیر مرتبه ۲ می‌باشد، $\Phi_{B_k'}(\lambda) = (\lambda^2-1)^k$. با جای‌گذاری مقدار $\Phi_{B_k'}(\lambda)$ و مقدار $\Phi_{B_k}(\lambda)$ که در نتیجه ۱ حاصل شد، در فرمول (1) داریم:

$$\Phi_{T_{k,d}}(\lambda) = (\lambda^2-1)^{(k-1)d}[\lambda(\lambda^2-k-1)]^{d-1}(\lambda^4-(k+d+1)\lambda^2+d).$$

برای محاسبه چندجمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی $T_{k,d}$، توجه می‌کنیم $T_{k,d} = S_{d+1}(P_1, B_k, B_k, \dots, B_k)$. بنابراین

با استفاده از قضیه ۱ داریم:

$$P_{T_{k,d}}(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda-d & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ \overline{P}_{B_k}(\lambda) & P_{B_k}(\lambda) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \overline{P}_{B_k}(\lambda) & 0 & P_{B_k}(\lambda) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \overline{P}_{B_k}(\lambda) & 0 & 0 & 0 & P_{B_k}(\lambda) & 0 \\ \overline{P}_{B_k}(\lambda) & 0 & 0 & \cdots & 0 & P_{B_k}(\lambda) \end{vmatrix}$$

$$= \left(\overline{P}_{B_k}(\lambda)\right)^d \begin{vmatrix} \lambda-d & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & \frac{P_{B_k}(\lambda)}{\overline{P}_{B_k}(\lambda)} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{P_{B_k}(\lambda)}{\overline{P}_{B_k}(\lambda)} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & \frac{P_{B_k}(\lambda)}{\overline{P}_{B_k}(\lambda)} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{P_{B_k}(\lambda)}{\overline{P}_{B_k}(\lambda)} \end{vmatrix}$$

$$= \left(\overline{P}_{B_k}(\lambda)\right)^d \left(\frac{P_{B_k}(\lambda)}{\overline{P}_{B_k}(\lambda)}\right)^{d-1} \left((\lambda - d)\frac{P_{B_k}(\lambda)}{\overline{P}_{B_k}(\lambda)} - d\right). \qquad (2)$$

از طرفی در ماتریس لاپلاسی $T_{k,d}$ درجه رأس مرکزی B_k برابر $k+1$ است. بنابراین در ادامه محاسبات لازم است که چندجمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی B_k که در نتیجه۱ حاصل شد، به‌گونه‌ای اصلاح شود که در آن به‌جای k عدد $k+1$ جای‌گذاری شود. در این‌صورت داریم:

$$P_{B_k}(\lambda) = \lambda(\lambda^2 - 3\lambda + 1)^{k-1}(\lambda^3 - (k+4)\lambda^2 + (2k+4)\lambda - 1),$$

$$\overline{P}_{B_k}(\lambda) = (\lambda^2 - 3\lambda + 1)^k.$$

با جای‌گذاری روابط بالا در رابطه (2)، داریم:

$$P_{T_{k,d}}(\lambda) = \lambda(\lambda^2 - 3\lambda + 1)^{d(k-1)}(\lambda^3 - (k+4)\lambda^2 + (2k+4)\lambda - 1)^{d-1}$$
$$(\lambda^3 - (k+d+4)\lambda^2 + (kd+2k+3d+4)\lambda - 2kd - d - 1).$$

بنابراین اثبات کامل می‌شود. ■

۲. چند کاربرد از نتایج اصلی

در این بخش با استفاده از نتایج بدست آمده در بخش قبل ابتدا کرانی بالا برای شعاع طیفی و انرژی ماتریس مجاورت درخت‌های کراگوجواچ که بزرگترین درجه رئوس (به غیر از رأس مرکزی) آنها Δ باشد محاسبه کرده، سپس شاخص کیرشهوف درخت کرگوجواچ منتظم که با استفاده از ضرایب چندجمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی آن قابل محاسبه است را بدست خواهیم آورد.

نتیجه ۲. فرض می‌کنیم بیشترین درجه رئوس غیر مرکزی درخت کراگوجواچ برابر Δ و ρ شعاع طیفی آن باشد. در این صورت

$$\rho \leq \sqrt{\frac{\Delta + d + 1 + \sqrt{(\Delta + d + 1)^2 - 4d}}{2}}.$$

اثبات. اگر بیشترین درجه رئوس (به غیر از رأس مرکزی) یک درخت کراگوجواچ برابر Δ باشد، با توجه به قضیه در هم بافنده[1] شعاع طیفی آن از شعاع طیفی $T_{\Delta,d}$ کمتر است. از طرفی با استفاده از قضیه ۲، بزرگترین مقدار ویژه ماتریس مجاورت $T_{\Delta,d}$ برابر بزرگترین ریشه‌ی معادله زیر است:

$$\lambda^4 - (\Delta + d + 1)\lambda^2 + d = 0.$$

[1] Interlacing theorem

در نتیجه بزرگترین مقدار ویژه ماتریس مجاورت $T_{\Delta,d}$ برابر مقدار $\sqrt{\frac{\Delta+d+1+\sqrt{(\Delta+d+1)^2-4d}}{2}}$ است. بنابراین اثبات کامل می‌شود. ■

قضیه ۳ [5]. اگر e یک یال دلخواه از درخت T باشد و $T-e$ درخت حاصل از حذف یال e از T باشد، آن‌گاه

$$\varepsilon(T-e) < \varepsilon(T).$$

نتیجه ۳. فرض می‌کنیم بیشترین درجه رئوس (به غیر از رأس مرکزی) درخت کراگوجواچ T برابر Δ و درجه رأس مرکزی آن برابر d باشد. در این صورت داریم:

$$E(T) \le \sqrt{2\Delta+2d+2+2\sqrt{(\Delta+d+1)^2-4\Delta}} + \sqrt{2\Delta+2d+2+2\sqrt{(\Delta+d+1)^2-4\Delta}+2d(\Delta-1)+2(d-1)\sqrt{\Delta-1}}.$$

اثبات. با استفاده از قضیه ۲، طیف ماتریس مجاورت درخت منتظم $T_{\Delta,\mathrm{d}}$ شامل± 1 با تعداد تکرار $d(\Delta-1)$، $\pm\sqrt{\Delta-1}$ با تعداد تکرار $d-1$ و اعداد حقیقی $\pm\sqrt{\frac{\Delta+d+1\pm\sqrt{(\Delta+d+1)^2-4\Delta}}{2}}$ است. نتیجه با استفاده از قضیه ۴ ثابت می‌شود. ■

از کاربردهای چندجمله‌ای مشخصه یک گراف می‌توان به محاسبه شاخص‌های توپولوژیک آن گراف اشاره کرد. به عنوان مثال با استفاده از ضرایب چندجمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی یک گراف همبند می‌توان شاخص کیرشهوف آن گراف که یکی از شاخص‌های توپولوژیک پرکاربرد در گراف‌های مولکولی می‌باشد را محاسبه کرد. در ادامه به عنوان کاربردی دیگر از قضیه ۲، شاخص کیرشهوف درخت کراگوجواچ منتظم را محاسبه می‌کنیم.

قضیه ۴ [6]. اگر G یک گراف همبند مرتبه $n \ge 2$ و $P_G(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + \cdots + a_{n-1}\lambda$ چندجمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی آن باشد، آن‌گاه شاخص کیرشهوف G با فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$Kf(G) = \frac{-na_{n-2}}{a_{n-1}}.$$

نتیجه ۴. شاخص کیرشهوف درخت کراگوجواچ منتظم از فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$Kf(T_{k,d}) = -d^2(10k^2+7k+1) - 4d(k^2+k).$$

اثبات. اگر $n = 2kd + d + 1$ تعداد رئوس گراف باشد، آن‌گاه با استفاده از قضیه۲، در چند جمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی $T_{k,d}$ داریم:

$$a_{n-1} = (-1)^d n,$$

$$a_{n-2} = (-1)^d(-3d(k-1)n - n(2k+4)(d-1) - kd - 2k - 3d - 4)$$
$$= (-1)^d d^2(10k^2 + 7k + 1) - 4d(k^2 + k).$$

بنابراین اثبات با استفاده از قضیه ۴ کامل می‌شود. ■

References

1. S. A. Hosseini, M. B. Ahmadi and I. Gutman, Kragujevac Trees with Minimal Atom-Bond Connectivity Index, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **71** (2014), 5-20.

2. R. Cruz, I. Gutman and J. Rada, Topological indices of Kragujevac trees, Proyecciones Journal of Mathematics, **33** (2014), 471-482.

3. H. Lin, On the Wiener Index of Trees with Given Number of Branching Vertices, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **72** (2014), 310-314.

4. A. Heydari and B. Taeri, On the characteristic polynomial of a special class of graphs and spectra of balanced trees, Lin. Algebra. Appl. **429** (2008), 1744-1757.

5. I. Gutman, X. Li and J. Zhang,in, Graph Energy, ed. by M. Dehmer, F. Emmert-Streib. Analysis of Complex Networks. From Biology to Linguistics (Wiley-VCH, Wein-heim) 2009.

6. X. Gao, Y. Luo and W. Liu, Kirchhoff index in line, subdivision and total graphs of a regular graph, Discrete Appl. Math. **160** (2012), 560-565.