مجله علمی- پژوهشی "پدافند الکترونیکی و سایبری"
ویژه‌نامه ترکیبیات، رمزنگاری و محاسبات، ص ۱۰-۷

شاخص بانهاتی وخواص آن

سیده طاهره جلالی[1*]، مسعود قدس[2]
۱- دانشجوی دکتری، ۲- استادیار، دانشگاه سمنان
(دریافت: ۹۷/۰۸/۲۵، پذیرش: ۹۸/۰۷/۰۲)

چکیده

شـاخص‌هـای بانهـاتی در سـال ۲۰۱۶ توسـط کـولی معرفـی شـدند. شـاخص‌هـای بانهـاتی بـه‌صـورت $B_1(G)=\sum_{ue}[d_G(u)+d_G(e)]$ و $B_2(G)=\sum_{ue}d_G(u)d_G(e)$ تعریف شده‌اند به‌طوری‌که ue به معنای راس u و یال e می‌باشد که با هم برخورد دارنـد و $d_G(e)$، درجـه یال e در G می‌باشد. در این مقاله به معرفی شاخص بانهاتی پرداخته و آن را برای بعضی از مشتقات گراف و نانولوله‌ها نظیـر شـش ضـلعی صندلی و زیگزاگ– یالی به‌دست می‌آوریم.

واژه‌های کلیدی: شاخص گرافیکی، شاخص بانهاتی، نانولوله

۱- مقدمه

فرض کنید $G=(V,E)$ یک گراف همبنـد بـا $|V(G)|=n$ راس و $|E(G)|=m$ یال باشد. درجه راس v را با $d_G(v)$ و یـالی کـه رئوس u و v را به هم متصل می‌کند با uv نشـان مـی‌دهـیم. همچنین فرض کنید $d_G(e)$ نماینده درجـه یـال $e=uv$ در G باشد. برای محاسبه درجه یالی بر اساس درجه دو راس متصل به آن داریم: $d_G(e)=d_G(u)+d_G(v)-2$.

در این مقاله گراف‌های در نظر گرفته شده متناهی، غیر جهت‌دار و بدون طوقه و یال چندگانه می‌باشند و نیـز رئـوس و یـال‌هـای گراف به‌عنوان عناصر آن شناخته می‌شوند. برای مطالعات بیشـتر به [۱] مراجعه کنید.

گراف مولکولی، گرافی است که در آن رئوس متناظر بـا اتـم‌هـا و یال‌ها متناظر با پیوندهای مولکولی می‌باشند. شـاخص گرافیکـی عددی حقیقی است که به گراف مولکولی هر ساختار نسـبت داده می‌شود که تحت یکریختی گراف‌ها پایا است. تعداد زیادی از این توصیف‌کننده‌ها در شیمی نظری مورد اسـتفاده قـرار مـی‌گیرنـد. همچنین در مطالعات $QSPR/QSAR$ کاربرد زیادی دارند، [۶] در [۳] کولی اولین و دومین شاخص K- بانهاتی را معرفی کرد. اولین شاخص بانهاتی $B_1(G)$ و دومـین شـاخص بانهـاتی $B_2(G)$ به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$B_1(G)=\sum_{ue}[d_G(u)+d_G(e)]$$

و

$$B_2(G)=\sum_{ue}d_G(u)d_G(e).$$

به همین ترتیب اولین و دومـین ابـر شـاخص بانهـاتی گـراف G به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$HB_1(G)=\sum_{ue}\left[d_G(u)+d_G(e)\right]^2$$

و

$$HB_2(G)=\sum_{ue}\left[d_G(u).d_G(e)\right]^2$$

به‌طوری که ue به‌معنـای راس u و یـال e اسـت کـه بـا هـم برخورد دارند.

۲- معرفی چند شاخص و مشتقات گراف

اولین و دومین شاخص زاگرب بـرای جفـت رئـوس مجـاور هـم، به‌صورت زیر معرفی شده اند:

$$M_1(G)=\sum_{uv\in E(G)}\left[d_G(u)+d_G(v)\right] \quad (۱)$$

و

$$M_2(G)=\sum_{uv\in E(G)}d_G(u)d_G(v) \quad (۲)$$

میلوسویچ و نیکولاس اولین شاخص زاگرب را از حالت راس- درجه به یال- درجه فرمول‌نویسی مجدد کردند و این شاخص را به‌صورت زیر معرفی نمودند [۸]:

* رایانامه نویسنده مسئول: staherehjalali1358@gmail.com

$$EM_1(G) = \sum_{e \in E(G)} d_G(e)^2$$

همچنین شاخص گرافیکی فراموش‌شده F به‌صورت زیر معرفی می‌شود [۱]:

$$F(G) = \sum_{u \in V(G)} d_G(u)^3 = \sum_{uv \in E(G)} \left[d_G(u) + d_G(v)\right]^2 \qquad (۳)$$

در این جا به معرفی چند گراف از مشتقات گراف G پرداخته و شاخص بانهاتی آنها را بر اساس شاخص‌های معرفی‌شده به‌دست می‌آوریم.

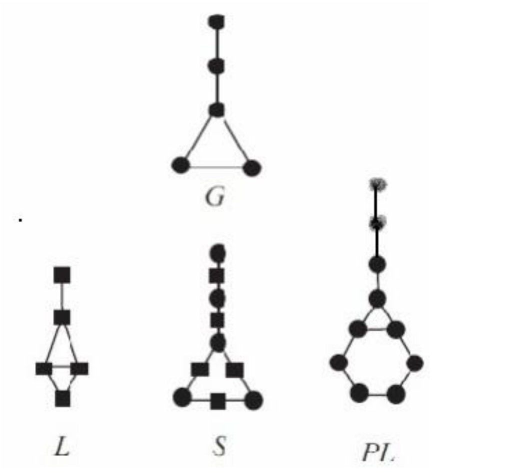
همانند قبل فرض کنید G یک گراف ساده با n راس و m یال باشد به‌طوری که مجموعه رئوس را با $V(G)$ و مجموعه یال را با $E(G)$ نشان می‌دهیم. گراف G را به‌عنوان گراف والد در نظر می‌گیریم، به‌طوری که گراف‌های تعریف‌شده در زیر از گراف G به‌دست می‌آیند.
مشتقات گراف G را به‌صورت زیر معرفی می‌کنیم:

تعریف ۲-۱: گراف خط $L = L(G)$ گرافی است که در آن $V(L) = E(G)$ و دو راس در $L(G)$ مجاورند اگر یال‌های متناظر با آنها در G، با هم مجاور باشند.

تعریف ۲-۲: گراف زیربخشی، $S = S(G)$ گرافی است که در آن $V(S) = V(G) \cup E(G)$. در واقع تعداد رئوس گراف زیربخشی برابر مجموع تعداد رئوس و تعداد یال های گراف G بوده و هر یال uv از گراف G را به‌طور متناوب حذف نموده و راس جدید w و یال‌های جدید uw و wv را به گراف G اضافه می‌کنیم.

تعریف ۲-۳: گراف PL را گراف *Paraline* نامند هرگاه $PL = PL(G)$ یک گراف خط از گراف زیر بخشی $S(G)$ باشد. در واقع تعداد رئوس گراف PL برابر تعداد یال‌های گراف زیربخشی $S(G)$ می‌باشد. همچنین رئوس گراف PL با هم مجاورند اگر یال‌های متناظر با آنها در گراف زیربخشی $S(G)$ با هم مجاور باشند.
مشتقات گراف تعریف‌شده در بالا به غیر از گراف PL دارای رئوسی متناظر با رئوس و یال‌هایی از گراف والد G می‌باشند، که به ترتیب قالب‌های آن را با نماد γ- رئوس (در شکل (۱) به فرم دایره) و با نماد λ- رئوس (در شکل (۱) به فرم مربع) تعریف می‌کنند.

در ادامه M_1 و M_2 و F به ترتیب نماینده اولین شاخص زاگرب، دومین شاخص زاگرب و شاخص فراموش‌شده از گراف والد G می‌باشند.



شکل (۱): گراف G و مشتقات گراف

۳- شاخص بانهاتی مشتقات گراف G

قضیه ۳-۱ فرض کنید L گراف خط از گراف G باشد. آنگاه:

$$B_1(L) = F - B_1 - M_1 + M_2 \qquad (۴)$$

اثبات.

$$\begin{aligned} B_1(L) &= \sum_{ue}\left[d_G(u) + d_G(e)\right] \\ &=3 \sum_{uv \in E(G)} \left[d_G(u) + d_G(v) - 2\right]^2 - 4m \\ &=3 \sum_{uv \in E(G)} \left[d_G(u)^2 + d_G(v)^2\right] + 6 \sum_{uv \in E(G)} \left[d_G(u) d_G(v)\right] - 4m \\ &=-12 \sum_{uv \in E(G)} \left[d_G(u) + d_G(v)\right] + 3 \sum_{uv \in E(G)} 2^2 - 4m. \end{aligned}$$

با در نظر گرفتن معادله های (۱)، (۲) و (۳) تساوی (۴) به‌دست می‌آید.
قضیه۳-۲: فرض کنید S، گراف زیربخشی از گراف G باشد. آنگاه:

$$B_1(S) = B_1 + \quad m$$

اثبات: در گراف زیربخشی $S(G)$، تمام γرئوس دارای درجه‌ای مشابه با رئوس در گراف والد G هستند. همچنین تمام λ رئوس از $S(G)$دارای درجه 2 می باشند. بنابراین:

$$B_1(S)=3\sum_{v\in V(G)} d_G(v)^2+3\sum_{uv\in E(G)}2^2-4m$$

تساوی (۵) نتیجه می‌شود.

قضیه ۳-۳: فرض کنید PL گراف *Paraline* از گراف G باشد. آن گاه:

$$B_1\left(PL\right)= F- m \qquad (۶)$$

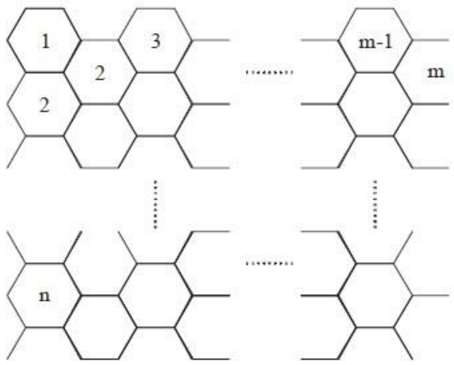
اثبات: گراف $PL(G)$ از گراف G دارای $2m$ راس می‌باشد. $d_G(u)$ دارای درجه مشابه با درجه راس u از گراف والد G می‌باشد. با در نظر گرفتن این موضوع داریم:

$$\begin{aligned} B_1(PL) &= 3\sum_{x\in V(PL)} d_{PL}(x)^2-4m \\ &= 3\sum_{u\in V(G)} d_G(u)[d_G(u)]^2-4m \\ &= 3\sum_{u\in V(G)} d_G(u)^3-4m \\ &= 3F-4m. \end{aligned}$$

۴- محاسبه شاخص بانهاتی برخی از نانولوله‌ها

در این بخش قصد داریم به محاسبه شاخص بانهاتی برای برخی از نانولوله‌ها بپردازیم. برای مطالعه بیشتر به[۴ و ۵] مراجعه کنید.

نانولوله شش وجهی صندلی *armchair polyhex nanotubes* با نماد $TUAC_6[m,n]$ نام‌گذاری می‌شود که در آن m تعداد شش ضلعی‌ها در اولین سطر و n تعداد آنها در اولین ستون می‌باشد. این گراف را در شکل (**۲**) ببینید.



شکل (۲): نانولوله armchair

بر اساس روش‌های جبری داریم:

$$|V(TUAC_6[m,n])|=2m(n+1)$$

و

$$|E(TUAC_6[m,n])|=3mn+2m$$

و همچنین $G=TUAC_6[m,n]$ در نظر می‌گیریم.

همچنین بر اساس محاسبات جبری، سه افراز یالی از $\left(TUAC_6[m,n]\right)$ بر اساس مجموعی از درجات رئوس انتهایی به‌صورت زیر خواهد بود:

$$E_4=\{uv\in E(G)\,|\,d_G(u)=d_G(v)=2\}, \qquad |E_4|=m$$
$$E_5=\{uv\in E(G)\,|\,d_G(u)=2,d_G(v)=3\}, \qquad |E_5|=2m$$
$$E_6=\{uv\in E(G)\,|\,d_G(u)=d_G(v)=3\}, \qquad |E_6|=3mn-m$$

در قضیه زیر، اولین و دومین شاخص بانهاتی از نانولوله $TUAC_6\left[m,n\right]$ را به‌دست می‌آوریم.

قضیه۴-۱ اولین و دومین شاخص بانهاتی از نانولوله $TUAC_6[m,n]$ به‌صورت زیر است:

$$i)B_1\left(TUAC_6\left[m,n\right]\right)=42mn+14m$$
$$ii)B_2\left(TUAC_6\left[m,n\right]\right)=72mn+14$$

اثبات: فرض کنید $G=TUAC_6\left[m,n\right]$ باشد. گراف G دارای $2m(n+1)$راس و دارای $3mn+2m$ یال می باشد. بنا بر تعریف اولین شاخص بانهاتی و با استفاده از عدد اصلی از افراز یالی G، داریم:

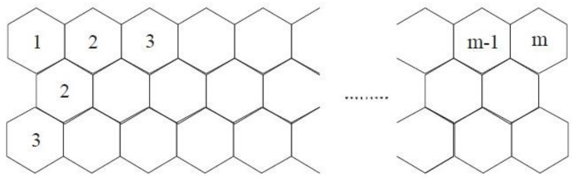
قسمت i:

$$\begin{aligned} B_1(G) &= \sum_{ue}\left[d_G(u)+d_G(e)\right] \\ &= \sum_{uv\in E(G)}(3\left[d_G(u)+d_G(e)\right]-4) \\ &= \left[3m(2+2)-4m\right]+\left[3\times 2m(2+3)-4(2m)\right] \\ &\quad +\left[3(3mn-m)(3+3)-4(3mn-m)\right] \\ &= 42mn+14m. \end{aligned}$$

قسمت ii:

$$\begin{aligned} B_2(G) &= \sum_{ue} d_G(u)d_G(e) \\ &= \sum_{uv\in E(G)}([d_G(u)+d_G(v)]^2-2[d_G(u)+d_G(v)]) \\ &= m((2+2)^2-2(2+2))+2m((2+3)^2-2(2+3)) \\ &\quad +(3mn-m)((3+3)^2-2(3+3)) \\ &= 72mn+14m. \end{aligned}$$

نانو لوله‌های شش‌گانه زیگزاکی با نماد $TUZC_6\left[m,n\right]$ نام‌گذاری شده‌اند که در آنها m تعداد شش ضلعی‌ها در سطر اول و n تعداد آنها در ستون اول می‌باشد. گراف $TUZC_6\left[m,n\right]$ در شکل (**۳**) ببینید.



شکل (۳): نانولوله زیگزاگی

بر اساس روش‌های جبری داریم:

$$|V(TUZC_6[m,n])| = 2m(n+1)$$

و

$$|E(TUZC_6[m,n])| = 3mn + 2m$$

و همچنین $H = TUZC_6[m\ \ n]$ در نظر می‌گیریم.
بر اساس محاسبات جبری دو افراز یالی از $TUZC_6[m,n]$ بر اساس مجموعی از درجات رئوس انتهایی به‌صورت زیر را داریم:

$$E_5 = \{uv \in E(H) \mid d_H(u) = 2, d_H(v) = 3\}, \qquad |E_5| = 4m$$
$$E_6 = \{uv \in E(H) \mid d_H(u) = d_H(v) = 3\}, \quad |E_6| = 3mn - 2m$$

قضیه ۴-۲ اولین و دومین شاخص بانهاتی از نانولوله $TUZC_6[m,n]$ به‌صورت زیر است:

$$i) B_1\left(TUZC_6[m\ \ n]\right) = \quad mn + \ 6m$$
$$ii) B_2\left(TUZC_6[m,n]\right) = 72mn + 12m$$

اثبات: فرض کنید $H = TUZC_6[m,n]$ باشد. گراف H دارای $2m(n+1)$راس و دارای $3mn+2m$ یال می‌باشد. بنا بر تعریف، اولین شاخص بانهاتی و با استفاده از عدد اصلی از افراز یالی H، داریم:
قسمت i:

$$\begin{aligned}
B_1(H) &= \sum_{ue}\left[d_H(u) + d_H(e)\right] \\
&= \sum_{uv\in E(G)} (3\left[d_H(u) + d_H(v)\right] - 4) \\
&= \left[3\times 4m(2+3) - 4(4m)\right] \\
&+ \left[3\times(3mn-2m)(3+3) - 4(3mn-2m)\right] \\
&= 42mn+16m.
\end{aligned}$$

قسمت ii:

$$\begin{aligned}
B_2(H) &= \sum_{ue} d_H(u) d_H(e) \\
&= \sum_{uv\in E(H)} ([d_H(u) + d_H(v)]^2 - 2[d_H(u) + d_H(v)]) \\
&= 4m((2+3)^2 - 2(2+3)) + (3mn-2m)((3+3)^2 - 2(3+3)) \\
&= 72mn + 12m.
\end{aligned}$$

۵- نتایج

در این مقاله شاخص بانهاتی را برای بعضی از مشتقات گراف نظیر گراف خط، گراف زیربخشی و گراف Paraline به‌دست آوردیم. همچنین به محاسبه شاخص‌های بانهاتی برای بعضی از نانولوله‌ها پر داختیم.

۶- نتیجه‌گیری

در این مقاله شاخص بانهاتی را معرفی نموده و آن را برای بعضی از مشتقات گراف و نانولوله‌ها نظیر شش ضلعی صندلی و زیگزاگ- یالی به‌دست آوردیم. به خوانندگان پیشنهاد می شود به محاسبه سایر شاخص‌های گرافیکی نظیر شاخص های راندیک، شاخص سیگما،... برای این مشتقات گراف بپردازند.

۵- مراجع

[1] B. Furtula and I. Gutman, "A Forgotten Topological index ," J. math. chem., vol .53, pp. 1184-1190, 2015.

[2] V. R. Kulli, "College Graph Theory," Vishwa Int. Publ. Gullbarga, 2012.

[3] V. R. Kulli, "On K Banhatti indices of graphs", J. Compt. Math. Sci., vol. 7, pp. 213-218, 2016.

[4] V. R. Kulli, "The Gourava indices and coindices of graphs," Annals of Pure and Applied Mathematics, vol . 14.1, pp. 33-38, 2017.

[5] V. R. Kulli, "Multiplicative connectivity indices of certain nanotubes," Annals of Pure and Applied Mathematics, vol . 12.2, pp. 169-176, 2016.

[6] I. Gutman, "Degree based topological indices," Croat. chem. Acta., vol. 86, pp. 351-361, 2013.

[7] I. Gutman, B. Ruscic, N. Trinajistic, and C. F. Wilcox, "Graph Theory and molecular orbitals, XII. Acyclic Polyenes," J. Chem. Phys., vol .62, pp. 3399-3405, 1975.

[8] A. Milicevic, S. Nikolic, and N. Trinajstic, "On Reformulated Zagreb indices," Mol. Divers., vol. 8, pp. 393-399, 2004.