



T.C.
NECMETTİN ERBAKAN
ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**BAZI GRAF PARAMETRELERİNİN
SINIFLANDIRILMASI**

Büşra AYDIN

DOKTORA TEZİ

Matematik Anabilim Dalı

**Haziran-2024
KONYA
Her Hakkı Saklıdır**

TEZ KABUL VE ONAYI

Büşra AYDIN tarafından hazırlanan “BAZI GRAF PARAMETRELERİNİN SINIFLANDIRILMASI” adlı tez çalışması 26/06/2024 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı’nda DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Başkan

Prof. Dr. Emine Gökçen KOÇER

.....

Danışman

Doç. Dr. Nihat AKGÜNEŞ

.....

Üye

Prof. Dr. Ahmet Sinan ÇEVİK

.....

Üye

Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA

.....

Üye

Dr. Öğr. Üyesi Nurten URLU ÖZALAN

.....

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu’nun/.../20.. gün ve sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Şerife Yurdağül KUMCU
FBE Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.

Büşra AYDIN

Tarih: 26.06.2024

ÖZET

DOKTORA TEZİ

BAZI GRAF PARAMETRELERİNİN SINIFLANDIRILMASI

Büşra AYDIN

Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Nihat AKGÜNEŞ

2024, 91 Sayfa

Jüri

Doç. Dr. Nihat AKGÜNEŞ
Prof. Dr. Emine Gökçen KOÇER
Prof. Dr. Ahmet Sinan ÇEVİK
Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA
Dr. Öğr. Üyesi Nurten URLU ÖZALAN

Graf teori yirminci yüzyılın başlarından itibaren yeni bir uygulama alanı olmuş ve disiplinler arası kullanımı ile de oldukça popüler bir alan haline gelmiştir. Graf teorisinin en büyük avantajı sistemli çalışma olanağı ve dolayısıyla daha basit çözümler sağlamasıdır. Graf parametreleri ise Graf teorisinin farklı alanlardaki çeşitli problemlerin çözümlerine aracı olmaktadır. Graf parametrelerinden topolojik indeksler ise sadece matematiksel yapılar ve teorik bilgisayar biliminde değil, aynı zamanda uygulamalı cebir ve kimyasal yapılarda da oldukça önemlidir. Dolayısıyla topolojik indeks konusu önemli bir çalışma alanı oluşturmaktadır.

Bu tez çalışmasının birinci bölümünde Graf teoriye giriş yapılmıştır. Ardından tanımlar ve bazı temel sonuçlar verilmiştir. Üçüncü bölümde son yılların en hızlı gelişen graf parametrelerinden olan topolojik indeksler üzerine geniş bir literatür taraması ile çalışmaların özü açıklanmıştır. Devamında değişmeyen en eski ve çalışma alanı oldukça geniş olan köşe-derece bazlı topolojik indekslerden Zagreb indeksleri ile ilgili şimdiye kadar yapılan çalışmalar verilmiştir. Çalışmanın dördüncü ve beşinci bölümünde yeni topolojik indeksler üstel Zagreb indeksleri ve maksimal Zagreb indeksi tanımlanarak bu topolojik indekslerin analizleri yapılmıştır. Çalışmanın son bölümünde ise sonuç ve önerilere yer verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: graf teori; maksimal Zagreb indeksi; üstel topolojik indeks; üstel Zagreb indeksi; Zagreb indeksi.

ABSTRACT

Ph.D THESIS

THE CLASSIFICATION OF SOME GRAPH PARAMETERES

Büşra AYDIN

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF
NECMETTİN ERBAKAN UNIVERSITY
THE DEGREE OF DOCTOR OF PHILOSOPHY
IN MATHEMATICS

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ

2024, 91 Pages

Jury

Advisor Assoc. Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ

Prof. Dr. Emine Gökçen KOÇER

Prof. Dr. Ahmet Sinan ÇEVİK

Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA

Asst. Prof. Dr. Nurten URLU ÖZALAN

Graph theory has become a new field of application since the beginning of the twentieth century and has become a very popular field with its interdisciplinary use. The biggest advantage of graph theory is the opportunity to work systematically and therefore provide simpler solutions. On the other hand, graph parameters help graph theory to solve various problems in different fields. Topological indices, one of the graph parameters, are very important not only in mathematical structures and theoretical computer science, but also in applied algebra and chemical structures. Therefore, the topic of topological index constitutes an important field of study.

In the first part of this thesis, graph theory was introduced. Then definitions and some basic results are given. In the third chapter, the essence of the studies is explained with an extensive literature review on topological indices, which are one of the fastest developing graph parameters of recent years. In the following, the studies carried out so far on the Zagreb indices, one of the oldest unchanged vertex-degree based topological indices with a very wide field of study, are given. In the fourth and fifth sections of the study, new topological indices, exponential Zagreb indices and maximal Zagreb index were defined and these topological indices were analyzed. In the last part of the study, results and recommendations are given.

Keywords: exponential topological index; exponential Zagreb index; graph theory; maximal Zagreb index; Zagreb index.

ÖNSÖZ

Bu tez, Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Fakültesi Matematik ve Bilgisayar Bilimleri Bölümü Öğretim Üyesi Doç. Dr. Nihat AKGÜNEŞ'in yönetiminde hazırlanarak Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Doktora tezi olarak sunulmuştur.

Yapılan tüm çalışmalarında bilgisini, tecrübesini, yardımını ve samimiyetini esirgemeyen sayın hocam Doç. Dr. Nihat AKGÜNEŞ'e saygı ve teşekkürlerimi sunarım. Necmettin Erbakan Üniversitesi ile tanışmama vesile olan hocam Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA'ya teşekkür ederim. Çalışmalarım sırasında destekleri, rehberlikleri ve verimli tartışmaları için Prof. Dr. Ahmet Sinan ÇEVİK ve Prof. Dr. Emine Gökçen KOÇER hocalarıma en içten teşekkürlerimi sunarım.

Bu süreçte olduğu gibi hayatım boyunca gittiğim yolda beni yüreklendiren ve yanımda olup varlıklarıyla güç veren annem, babam ve abime sevgi ve teşekkürlerimi sunarım. Desteği ve sevgisi ile daima yanımda olan sevgili eşim Tolgahan AYDIN'a teşekkür ederim. En büyük teşekkürüm ise doktora programına başladığımda henüz karnımda olan oğlum Çağan ile bize bu süreçte katılan kızım Ela'ya. Farkında olmasalar da sabırları için, gözlerimin içine masumiyetle bakan gözleri için, sorgulamadan beni kabul ettikleri için yavrularım Çağan ve Ela'ya sonsuz sevgilerimi sunarım.

Son olarak doktora eğitimim boyunca 2211-Yurt İçi Doktora Bursu ile bana destek sağlayıp yükümü hafiflettiği için Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırmalar Kurumu (TÜBİTAK)'na teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Büşra AYDIN
KONYA-2024

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER.....	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
1. GİRİŞ.....	1
2. GRAF TEORİ TEMEL TANIMLAR VE ÖZELLİKLERİ.....	3
2.1. Graf Parametreleri	7
2.2. Graf Çeşitleri	9
2.3. Graf Operatörleri	15
2.4. Graf Dönüşümleri.....	18
3. TOPOLOJİK İNDEKSLER	21
3.1. Topolojik İndeksler Üzerine Kaynak Araştırması.....	23
3.2. Zagreb İndeksleri.....	29
4. ÜSTEL ZAGREB İNDEKSLERİ.....	40
4.1. Üstel Zagreb İndeksleri ile İlgili Genel Sonuçlar.....	46
4.2. Devir İçermeyen ve Tek Devir İçeren Graflar Üzerinde Sonuçlar.....	55
4.3. Graf Operatörleri Üzerinde Sonuçlar.....	58
5. MAKSİMAL ZAGREB İNDEKSİ	66
5.1. Grafların Maksimal Zagreb İndeksini Artıran veya Azaltan Dönüşümler	67
5.2. Maksimal Zagreb İndeksinin Uç Devir Grafları	71
6. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	75
KAYNAKLAR	77

SİMGELER

G	Graf
$E(G)$	G grafinın kenar kümesi
$V(G)$	G grafinın köşe kümesi
m	Grafin kenar sayısı
n	Grafin köşe sayısı
$\langle V' \rangle$	İndüklenmiş alt graf
C_n	Çevre graf
P_n	Yol graf
S_n	Yıldız graf
$S_{x,y}$	Çift yıldız graf
T	Ağaç graf
K_n	Tam graf
$K_{m,n}$	İki parçalı tam graf
W_n	Tekerlek graf
L_n	Ladder grafı
$T(n, n_1, k)$	Bir ağaç graf sınıfı
U_n	Bir ağaç graf sınıfı
$U_{n,k}$	Tek devir içeren graf
$L_{n,k}$	Bir tek devir içeren graf sınıfı
$H_{n,k}$	Bir tek devir içeren graf sınıfı
$P_n^{k,t,m}$	Bir çift devir içeren graf sınıfı
$C_n(p, q)$	Bir çift devir içeren graf sınıfı
$C_n(l, r, t)$	Bir çift devir içeren graf sınıfı
\bar{G}	G grafinın tamamlayıcısı
$d(u, v)$	u ve v köşeleri arası uzaklık
$deg_G(u)$	u köşesinin derecesi
$ecc(u)$	u köşesinin dış merkezliliği
$rad(G)$	G grafinın yarıçapı
$diam(G)$	G grafinın çapı
$gr(G)$	G grafinın çevrimi
$DS(G)$	G grafinın derece dizisi
$i(G)$	G grafinın düzensizlik indeksi
$\delta(G)$	G grafinın minimum derecesi
$\Delta(G)$	G grafinın maksimum derecesi
$c(G)$	G grafinın içerdği devir sayısı
M_1	Birinci Zagreb indeks
M_2	İkinci Zagreb indeks
$\overline{M_1}$	Birinci Zagreb eşindeks
$\overline{M_2}$	İkinci Zagreb eşindeks
π_1	Birinci çarpımsal Zagreb indeks
π_2	İkinci çarpımsal Zagreb indeks
$\overline{\pi_1}$	Birinci çarpımsal Zagreb eşindeks
$\overline{\pi_2}$	İkinci çarpımsal Zagreb eşindeksi
EM_1	Birinci üstel Zagreb indeks
EM_1^*	Birinci üstel Zagreb indeks toplam biçimi
EM_2	İkinci üstel Zagreb indeks

Simgeler (devamı):

\overline{EM}_1

\overline{EM}_2

$E\pi_1$

$E\pi_2$

$\overline{E\pi}_1$

$\overline{E\pi}_2$

MM

$G_1 \times G_2$

$G_1[G_2]$

$G_1 \otimes G_2$

$G_1 + G_2$

$G_1 \oplus G_2$

$G_1 \circ G_2$

Birinci üstel Zagreb eşindeks

İkinci üstel Zagreb eşindeks

Birinci üstel çarpımsal Zagreb indeks

İkinci üstel çarpımsal Zagreb indeks

Birinci üstel çarpımsal Zagreb eşindeks

İkinci üstel çarpımsal Zagreb eşindeks

Maksimal Zagreb indeksi

Kartezyen çarpım grafi

Lexicographical çarpım grafi

Tensör çarpım grafi

Join çarpım grafi

Simetrik fark çarpım grafi

Korona çarpım grafi



ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Könisberg Bölgesi graf gösterimi.....	3
Şekil 2.2. Bir graf örneği.....	4
Şekil 2.3. Yönsüz olan çoklu ve basit graf örneği.....	4
Şekil 2.4. Bir graf ve tamamlayıcı grafı.....	5
Şekil 2.5. Bir graf ve sırası ile indüklenmiş ve indüklenmiş olmayan alt grafları.....	6
Şekil 2.6. İki izomorf graf.....	6
Şekil 2.2.1. Yol graflar.....	9
Şekil 2.2.2. Çevre graflar.....	10
Şekil 2.2.3. Tekerlek graflar.....	10
Şekil 2.2.4. Tam graflar.....	10
Şekil 2.2.5. İki parçalı tam graflar.....	11
Şekil 2.2.6. 3-düzgün graf.....	11
Şekil 2.2.7. Ladder graflar.....	11
Şekil 2.2.8. Ağaç graflar.....	11
Şekil 2.2.9. Yıldız graflar.....	12
Şekil 2.2.10. $S_{5,4}$ çift yıldız grafı.....	12
Şekil 2.2.11. $T(n, n_1, k)$ ve $U_n = T(n, n - 3, 2)$ ağaç grafları.....	13
Şekil 2.2.12. Bazı $U_{n,k}$ grafları.....	13
Şekil 2.2.13. $L_{n,k}$ grafı.....	13
Şekil 2.2.14. Bazı $H_{n,k}$ grafları.....	14
Şekil 2.2.15. Çift devir içeren (bicyclic) graflar.....	14
Şekil 2.2.16. Çift devir içeren graf sınıfları.....	15
Şekil 2.2.17. Bazı moleküller ile graf gösterimleri.....	15
Şekil 2.3.1. P_2 ve P_{n+1} yol grafları ile kartezyen çarpımlarından elde edilen L_n moleküler grafı.....	16
Şekil 2.4.1. Graf dönüşümü 1.....	18
Şekil 2.4.2. Graf dönüşümü 2.....	18
Şekil 2.4.3. Graf dönüşümü 3.....	19
Şekil 2.4.4. Graf dönüşümü 4.....	19
Şekil 2.4.5. Graf dönüşümü 5.....	20
Şekil 3.2.1. S_n^* ve P_n^* grafları.....	36
Şekil 4.1. Özel graflar.....	41
Şekil 4.1.1. 6-köşeli ağaç graflar ile üstel Zagreb indeks değerleri.....	55
Şekil 4.2.1. $n = 7$ mertebeli U_7 ve $T(7, 2, 3)$ ağaç grafları.....	57
Şekil 5.2.1. n mertebeli devir içermeyen graflar için uç graflar.....	72
Şekil 5.2.2. $U_{n,3}$ grafı.....	72
Şekil 5.2.3. S_n^2 , G^1 ve G^2 grafları.....	73

1. GİRİŞ

Gerçek hayatta karşılaşılan pek çok problem matematiksel modellemeler ile çözülmüştür. Bu modellemelerden biri olan graf teori de disiplinler arası kullanımından dolayı oldukça popüler bir çalışma alanıdır. Grafların literatüre kazandırılması oldukça eskiye dayanmaktadır. Graf teorisinin temeli 1736 yılında ve Leonard Euler'in Könisberg Köprüsü probleminin çözümüne dayanmaktadır. Aslında graf teori kendisinden daha eski bir problemin çözümü olarak ortaya çıkmıştır (Euler, 1953). Könisberg Köprüsü problemi, iki ada ve yedi köprüden oluşan Pregel Nehri'nde köprülerin her birinden yalnızca bir kere geçme koşulu ile başlanılan kara parçasına dönmektir. Könisberg Köprüsü problemi basit bir yürüyüş gibi sahneye çıksa da şüphesiz ki, graf teorisinin farklı bilimlerde uygulanabilirliği problemin önemini artırmıştır. Graf teori özünde, soyut olayları somut hale getirmekte ve somut olayları da daha basit bir hale getirerek çözümlerini sağlamaktadır. Graf teorisinin yalnızca Matematik bilminde değil bir çok alanda popüler bir yeri vardır.

Günümüzde ağlar üzerinde graf teorisinin oldukça fazla kullanım alanı vardır. Ağlar; sosyal, teknolojik, bilgi ve biyolojik olarak çeşitlenebilir. Bu ağlar bir graf ile modellenenmektedir. Bilgisayar bilminde yerleşim ve bağlantı biçimi ağları graflar ile temsil edilmektedir. Merkezler grafin tepeleri, bağlantılar grafin ayrıtları olacak şekilde 1970'li yıllardan itibaren grafların zedelenebilirlik değerleri tanımlanmıştır. Ayrıca beyin ağlarını analiz etmek için de beyin, düğüm ve kenarlardan oluşan bir ağ olarak düşünülür ve komşuluk matrisi gibi bazı graf parametreleri kullanılarak beynin bağlantı analizi yapılmaktadır (Mijalkov, 2018). Tüm mühendislik bilimlerinde graf teori kullanılmaktadır. Graf teorisinin avantajı daha basit ve sistemli çalışma olanağı sağlamasıdır. Savunma sisteminde graf teori ilk olarak 3.yy.da olmak üzere yüzyıllardan beri kullanılmaktadır. Covid-19 salgınında da filyasyon ekiplerinin yaptığı pozitif vaka, temaslı kişiler graflar ile modellendiğinde hastalığın ilerlemesi ve hastanelerin yeterlilik durumları öngörülebilmiştir. Ayrıca salgının ilerleme hızının üstel şeklinde olduğuna da dikkat çekmek gerekir. Son zamanlarda oldukça popüler olan sosyal medyada insanların kendi sosyal ağ yapılarını çalışmaya olanak veren ve listelerindeki örüntülerini görmelerini sağlamaktadır. Bunun yanında suç ve terör örgütlerinin yapılarını incelemek için de graf teori yardımıyla sosyal medya analizi yapılmaktadır. Ayrıca, son yıllarda sinir

ağları, genetik algoritmalar ve evrimsel programlamalar ile ilgili QSPR uygulamalarında artış olmuştur. Bu yöntemler denklemlerdeki doğrusal olmayan ilişkileri belirleyerek doğrusal QSPR modellerinin geliştirilmesine yardımcı olabilir ve tamamen yeni QSPR modelleri türetme yeteneğine sahiptir (Katritzky vd., 2000). Teorik Kimya ve Biyolojide ise moleküler yapı tamamlayıcıları moleküller hakkında bilgiyi ölçmek için kullanılmaktadır. Bu da moleküler indeksler kullanılarak kimyasal bileşiklerin fiziko-kimyasal, biyolojik ve diğer özelliklerini karakterize etmekle ilgilidir. Analizler ile kimyasal yapıların etkileri öngörülebilmektedir. Topolojik indeksler moleküler graflarla ilişkilendirilen sayılardır. Organik kimyada topolojik indeksler kimyasal bileşiklerin fiziko kimyasal özellikleri ile ilişkili olmasının yanında ilaç tasarımı, izomer ayrımı ve kimyasal dokümantasyonda da kullanılmaktadır.

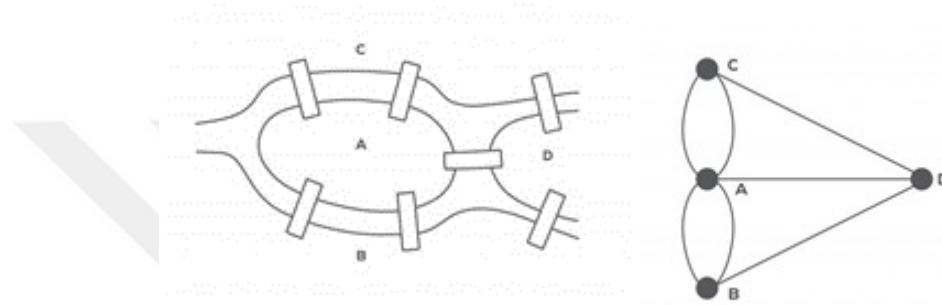
Henüz her tür moleküle uygulanabilir olan, hesaplanması kolay, mümkün olduğu kadar çok özelliği ilişkilendiren bir topolojik indeks olmadığı için, yalnızca ünlü topolojik indekslerin iyileştirilmesine ihtiyaç duyulmuyor aynı zamanda yeni tip indekslerin bulunması gerekiyor. Amacımız atom türlerinin çeşitliliğinin oynadığı noktaya ışık tutmaya çalışmaktır. Farklı atom türleri farklı değerlerle karakterize edildiğinden topolojik indeksleri yeni ve potansiyel olarak faydalı şekillerde birleştirerek çeşitlilikleri yakalamaya çalışacağız.

Üstel topolojik indeks köşe-derece bazlı bir indeksin bir üstel fonksiyonu olarak e^{φ} tanıtıldı (Rada vd., 2019). Ayrıca Randik üstel indeksi belli bir graf kümesi üzerinde incelendi. Dahası üstel topolojik indeks fonksiyonuna benzer bir yaklaşım ile birinci ve ikinci Zagreb indekslerinin uç ağaç grafları belirlendi (Cruz ve Rada, 2019). Daha sonra Akgüneş ve Aydın tarafından çeşitli üstel Zagreb indeksleri farklı bir üstel yaklaşım ile çalışıldı. Tanımlanan çeşitli üstel Zagreb indekslerinin özellikleri elde edildi (Akgüneş ve Aydın, 2021).

Bu tezde özgün olarak en eski köşe derece bazlı topolojik indeks olan Zagreb indeksinin yeni türevleri tanımlanmıştır. Bunlar Zagreb indekslerinin üstelleri ile maksimal Zagreb indeksidir. Üstel Zagreb indekslerin aralarındaki bağıntılar ve graf parametrelerine bağlı olan eşitsizlikleri ve sınırları elde edilmiştir. Ayrıca genel ve devir içermeyen graflar için uç grafları ve bazı devir graf sınıfları içinde karşılaştırmaları elde edilmiştir. Daha sonra üstel Zagreb indeksleri graf operatörleri üzerinde de çalışılmıştır. Tezin bu kısmı bir makale olarak yayınlanmıştır (Akgüneş ve Aydın, 2021). Maksimal Zagreb indeksinin ise genel ve devir graflar üzerinde uç grafları elde edilmiştir (Aydın ve Akgüneş, 2024).

2. GRAF TEORİ TEMEL TANIMLAR VE ÖZELLİKLERİ

Graflar bir dizi köşeden ve kenardan oluşan matematiksel yapılardır. Belirli bir koleksiyondaki nesnel arasındaki ilişkileri modellemek için kullanılır. Olguya göre graf parametreleri ve olgunun elemanları eşleştirilerek bir graf oluşturulur. Könisberg Bölgesi nehir, kara parçaları ve köprülerin nasıl bir graf ile temsil edildiği aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.

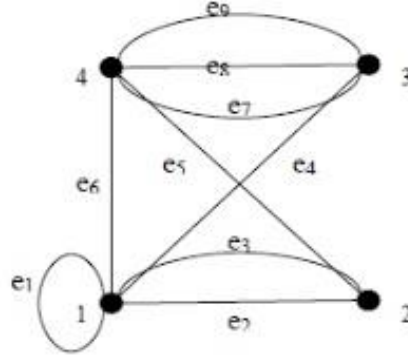


Şekil 2.1. Könisberg Bölgesi graf gösterimi

Bu kısımdaki temel tanımlar “Handbook of Graph Theory” isimli kitaptan alınmıştır (Gross ve Yellen, 2004).

Tanım 2.1. V boştan farklı küme ve elemanları köşeler olarak adlandırılan; E , V kümesinin bir ya da iki elemanlı alt kümelerinden oluşan ve elemanları kenarlar olarak adlandırılan kümeler olmak üzere; (V, E) ikilisinden oluşan yapıya **graf** denir ve G ile gösterilir. Bir grafın köşe ve kenar kümesi sonlu sayıda elemana sahipse bu grafa **sonlu graf** denir. Sonlu bir grafta köşe kümesi $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ dolayısıyla $|V(G)| = n$ ve kenar kümesi $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$, $|E(G)| = m$ olmak üzere n sayısı grafın **mertebesi (order)**, m sayısı ise grafın **boyutu (size)** olarak adlandırılır. Kısaca n köşeli ve m kenarlı bir graf $G(n, m)$ graf olarak isimlendirilir.

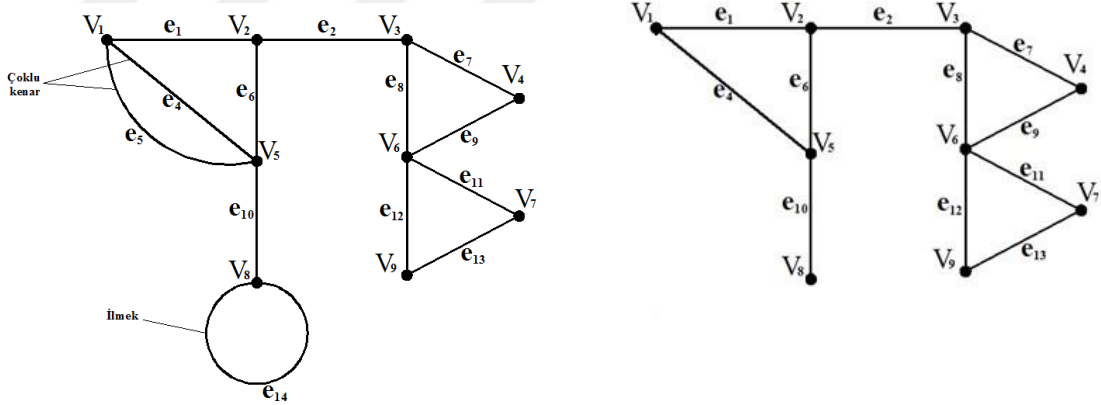
Örnek 2.1. Aşağıda köşe kümesi $V(G) = \{1, 2, 3, 4\}$ ve kenar kümesi $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_9\}$ olmak üzere $n=4$ mertebeli ve $m=9$ boyutlu bir graf örneğini verebiliriz.



Şekil 2.2. Bir graf örneği

Tanım 2.2. Bir grafın her bir kenarı bir ya da iki köşe ile bağlantılıdır. Bu köşe ya da köşeler kenarın **bitiş noktası** olarak adlandırılır. Tek bitiş noktası ile kendine bağlanan kenara **ilmek** denir. Aynı bitiş noktalarına sahip iki ya da daha fazla kenar **çoklu kenar** olarak adlandırılır.

Tanım 2.3. Bir graf ilmek ve çoklu kenar içermiyor ise bu grafa **basit graf** denir. Aksi durumda ise **çoklu graf** olarak adlandırılır. Ayrıca bir grafın tüm kenarları yönsüz ise **yönsüz graf** denir.



Şekil 2.3. Yönsüz olan çoklu ve basit graf örneği

Bu tezde yönsüz ve çoklu olmayan basit graflar üzerinde çalışılacaktır.

Tanım 2.4. Bir grafta v_{j-1} ve v_j köşeleri e_j kenarının bitiş noktaları ($j = 1, 2, \dots, n$) olmak üzere $W = v_0 e_1 v_1 e_2 \dots e_{n-1} v_n$ alternatif dizisine bir **yürüyüş (walk)** denir, v_0 ve v_n sırası ile **başlangıç (initial)** ve **bitiş (final)** köşeleri olarak adlandırılır. Ne başlangıç ne bitiş olan diğer köşelere ise **iç (internal)** köşe denir. Başlangıç ve bitiş köşeleri aynı olan yürüyüş ise **kapalı yürüyüş (closed walk)** olarak adlandırılır.

Tanım 2.5. Bir yürüyüşte hiçbir kenardan birden fazla geçilmiyor ise **iz (trail)** denir. Yine bir yürüyüşte her kenardan yalnızca bir kere geçilen yürüyüşe **Euler izi (Euler trail)** denir.

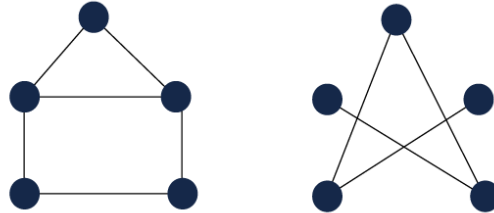
Tanım 2.6. Bir grafta hiçbir iç noktanın tekrar edilmediği ize **yol (path)** denir. Tüm kenarları ile köşelerinden başlangıç ve bitiş köşeleri hariç diğer tüm köşeleri farklı olan yürüme **devir (cycle)** olarak adlandırılır.

Tanım 2.7. Bir grafın köşe kümesinden alınan herhangi iki köşe için aralarında bir yürüyüş var ise bu graf **bağlantılı (connected) graf** olarak adlandırılır. Diğer durumlarda ise bağlantısız (disconnected) graf denir.

Tanım 2.8. Bir G grafının u ve v köşeleri bir kenarla bağlanıyor ise bu köşeler **komşu köşeler** olarak adlandırılır $u \sim v$ ya da $uv \in E(G)$ şeklinde ifade edilir.

Tanım 2.9. Bir G grafi ile aynı köşe kümesine ve komşu olmayan kenarlardan oluşan kenar kümesine sahip olan graf G grafının **tamamlayıcısı (complement)** olarak adlandırılır ve \bar{G} ile ifade edilir.

Örnek 2.2. Aşağıda bir G grafi ve G grafının tamamlayıcı grafi \bar{G} verilmiştir.



Şekil 2.4. Bir graf ve tamamlayıcı grafi

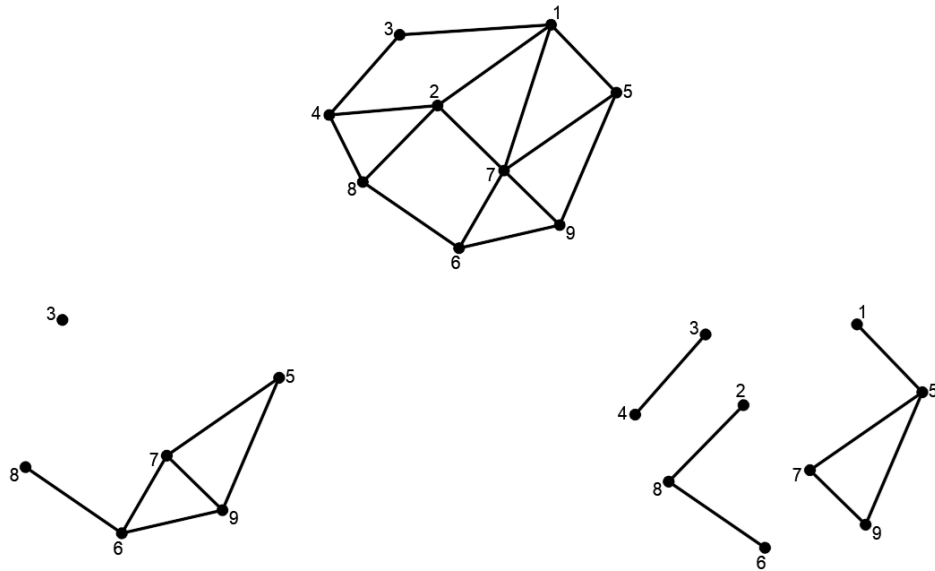
Tanım 2.10. İki graf $G_1 = (V_1, E_1)$ ve $G_2 = (V_2, E_2)$ için $V_1 \subseteq V_2$ ve $E_1 \subseteq E_2$ koşulları sağlanırsa G_1 grafına G_2 grafının bir **alt grafi (subgraph)** denir.

Tanım 2.11. Bir G grafının H alt grafi bir tam graf ise H alt grafına G grafının **tam alt grafi** denir.

Tanım 2.12. Bir G grafının V köşe kümesinin boştan farklı bir alt kümesi V' olsun. Köşe kümesi V' ve kenar kümesi de G grafının V' kümesindeki köşeler ile komşu olan tüm kenarlardan oluşan alt grafa G grafının **indüklenmiş alt grafi (induced subgraph)** denir.

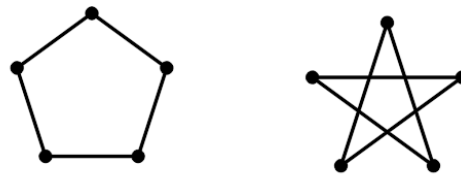
ve $\langle V' \rangle$ ile gösterilir. Başka bir ifade ile $G'(V', E')$; $G(V, E)$ grafının indüklenmiş alt grafi olmak üzere köşe ve kenar kümeleri sırası ile $V' \subseteq V$ ve $E' = \{uv \in E; uv \in V'\}$ 'dir.

Örnek 2.3. Mertebesi $n=9$ ve boyutu $m=14$ olan bir grafın indüklenmiş ve indüklenmiş olmayan alt grafları aşağıdaki gibi gösterilebilir.



Şekil 2.5. Bir graf ve sırası ile indüklenmiş ve indüklenmiş olmayan alt grafları

Tanım 2.13. G_1 ve G_2 iki graf olsun. Eğer bir $f: V(G_1) \rightarrow V(G_2)$ fonksiyonu birebir, örten ve her $u, v \in V(G_1)$ için $uv \in E(G_1)$ ancak ve ancak $f(u)f(v) \in E(G_2)$ koşulunu sağlıyorsa f dönüşümü G_1 ve G_2 grafları arasında bir graf izomorfizması olarak adlandırılır. Ayrıca, herhangi iki graf arasında en az bir graf izomorfizması tanımlı ise graflar izomorf graflar olarak adlandırılır ve $G_1 \cong G_2$ ile gösterilir.



Şekil 2.6. İki izomorf graf

2.1. Graf Parametreleri

Bu kısımdaki graf parametrelerinin tanımları Buckley ve Harary'nin *Distance in Graphs* isimli kitabından aktarılmıştır (Buckley ve Harary, 1990).

Tanım 2.1.1. Bir grafın herhangi iki köşesi u ve v olmak üzere aralarındaki en kısa yolun uzunluğuna iki köşe arasındaki **uzaklık (distance)** denir ve $d(u, v)$ ile ifade edilir.

Tanım 2.1.2. Bir G grafının herhangi u köşesinin en uzak olduğu köşeye olan uzaklığına u köşesinin **dışmerkezliliği (eccentricity)** denir ve

$$ecc(u) = \max\{d(u, x) : x \in V(G)\}$$

şeklinde ifade edilir. Bağlantılı bir G grafın köşeleri arasında bulunan en büyük dışmerkezlilik değeri grafın **çapı (diameter)** olarak adlandırılır ve

$$diam(G) = \max\{ecc(v) : v \in V(G)\}$$

şeklinde ifade edilir. Bağlantılı bir G grafın köşeleri arasında bulunan en küçük dışmerkezlilik değeri grafın **yarıçapı (radius)** olarak adlandırılır ve

$$rad(G) = \min\{ecc(v) : v \in V(G)\}$$

şeklinde ifade edilir.

Teorem 2.1.1. Bağlantılı G grafi için grafın uzaklığı grafın yalnızca yarıçapına bağlı olarak aşağıdaki gibi sınırlandırılabilir (Ostrand, 1973).

$$rad(G) \leq diam(G) \leq 2rad(G)$$

Tanım 2.1.3. Bir grafın içerdiği en kısa devire **çevrim (girth)** denir ve gr ile gösterilir.

Tanım 2.1.4. Bağlantılı, m boyutlu ve n mertebeli graflar için **devir sayısı (cyclomatic number)**; graftaki bağımsız devirlerin sayısı $c(G) = m - n + 1$ şeklindedir. Grafların devir sayısı $c = 0, 1, 2$ olmak üzere sırası ile devir içermeyen (acyclic), tek devir içeren (unicyclic) ve çift devir içeren (bicyclic) graflar olarak adlandırılır. Genel olarak G grafın devir sayısı $c(G) = k$ ise k -devir (k -cyclic) graf olarak adlandırılır.

Bu tanımın doğal sonucu olarak aşağıdaki sonuç verilebilir.

Sonuç 2.1.1. Bağlantılı n köşeli ve m kenarlı devir (cyclic) graflar için

- (i) Devir içermeyen grafta $m=n-1$
- (ii) Tek devir içeren grafta $m=n$
- (iii) Çift devir içeren grafta $m=n+1$

dir.

Tanım 2.1.5. Bir G grafinin köşe kümesinden alınan $v \in V(G)$ köşesine komşu olan köşelerin sayısı **derece (degree)** olarak adlandırılır ve $deg_G(v)$ ya da kısaca $d(v)$ ile ifade edilir.

Teorem 2.1.2. (Euler Teoremi) Bir $G=(V,E)$ sonlu grafi m boyut ve $V(G)$ kenar kümesi ile

$$\sum_{v_i \in V(G)} deg_G(v_i) = 2m$$

eşitliği geçerlidir. Diğer bir ifade ile bir grafin tüm köşelerinin dereceleri toplamı grafin boyutunun iki katına eşittir (Gross ve Yellen, 2004).

Sonuç 2.1.2. Herhangi bir G grafinin tüm köşelerinin dereceleri toplamı çifttir. Dolayısıyla herhangi bir G grafin tek dereceli köşelerinin sayısı bir çift sayıdır (Gross ve Yellen, 2004).

Sonuç 2.1.3. Bağlantılı bir G grafi n köşe ve m kenara sahip olsun. G grafinin tamamlayıcı grafi \bar{G} 'nin boyutu \bar{m} olmak üzere

$$|E(\bar{G})| = \bar{m} = \frac{n}{2} - m$$

ve

$$deg_{\bar{G}}(u) = n - 1 - deg_G(u)$$

dir (Gross ve Yellen, 2004).

Tanım 2.1.6. Bir G grafinin en az dereceye sahip köşesi ve en çok dereceye sahip köşesi sırası ile minimum ve maksimum dereceli köşe olarak adlandırılır. Ayrıca en küçük dereceye sahip köşenin derece sayısına grafin **minimum derecesi** denir ve $\sigma(G)$ ile

gösterilir. Benzer şekilde maksimum dereceli köşenin derecesinin sayısına grafın **maksimum derecesi** denir ve $\Delta(G)$ ile ifade edilir.

Teorem 2.1.3. Herhangi bir n köşeye sahip bir G grafının grafın en büyük derecesi

$$\Delta(G) \leq n - \text{diam}(G) + 1$$

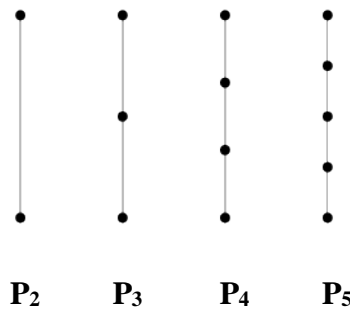
şeklinde üstten sınırlıdır (Buckley ve Harary, 1990).

Tanım 2.1.7. Bir G grafında tüm köşelerin derecelerinin yazılması ile elde edilen diziye **derece dizisi (degree sequence)** denir ve $DS(G)$ ile ifade edilir. Bir grafın derece dizisindeki farklı elemanlarının sayısı **düzensizlik indeksi (irregularity index)** olarak isimlendirilir ve $t(G)$ ile gösterilir.

2.2. Graf Çeşitleri

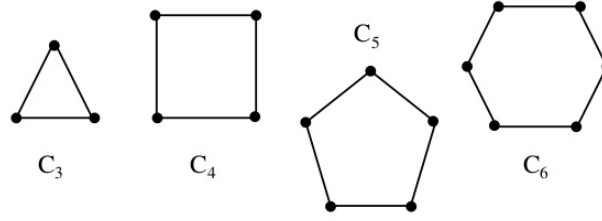
Bu kısımda verilen özel olarak adlandırılan grafların tanımları Harary (Harary, 1994) ve Gross ve Yellen (Gross ve Yellen, 2004)'nin kitaplarından aktarılmıştır.

Tanım 2.2.1. Bir grafta yalnızca başlangıç ve bitiş köşelerinin derecesi 1, diğer bütün köşelerinin derecesi 2 ise bu graf **yol (path) graf** olarak adlandırılır ve n köşeli yol graf P_n şeklinde ifade edilir.



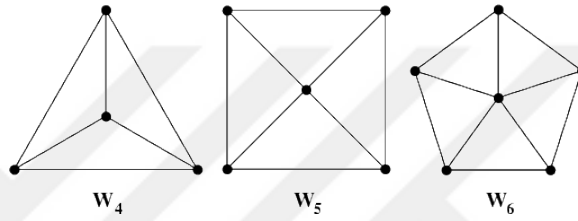
Şekil 2.2.1. Yol graflar

Tanım 2.2.2. Bir grafın yalnızca başlangıç ve bitiş noktalarının aynı olduğu ve bütün köşe derecelerinin sayısının 2 olduğu grafa **çevre (cycle) graf** denir ve köşe sayısı n olan çevre graf C_n şeklinde ifade edilir.



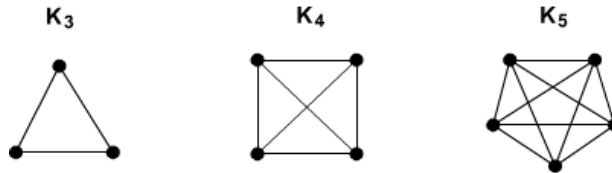
Şekil 2.2.2. Çevre graflar

Tanım 2.2.3. Bir çevre grafına tüm köşeleri ile komşu olacak şekilde yeni bir köşe eklenmesi ile oluşan graf **tekerlek (wheel) graf** olarak adlandırılır ve W_n şeklinde ifade edilir.



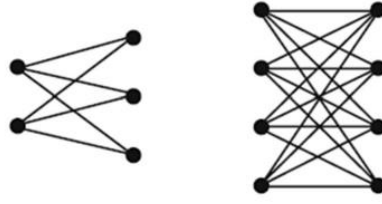
Şekil 2.2.3. Tekerek graflar

Tanım 2.2.4. Bir grafın bütün köşeleri diğer köşelerin tümü ile komşu ise **tam (complete) graf** olarak adlandırılır ve köşe sayısı n olan tam graf K_n şeklinde ifade edilir.



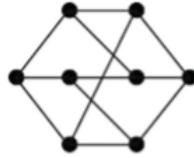
Şekil 2.2.4. Tam graflar

Tanım 2.2.5. Bir grafın köşe kümesi iki adet en büyük köşe sayılarına sahip olacak şekilde hem bağımsız hem de ayrık kümeler ayrılabilir ise **iki parçalı (bipartite) graf** olarak adlandırılır. Bağımsız ve ayrık kümeler ayrılan bu köşe kümeleri V_1 ve V_2 olmak üzere eğer ayrılan bütün köşeler birbirlerine komşu oluyor ise **iki parçalı tam (bipartite complete) graf** olarak adlandırılır. İki parçalı grafın köşe kümelerinin sayıları $|V_1|=m$ ve $|V_2|=n$ olmak üzere iki parçalı tam graf $K_{m,n}$ ile ifade edilir.



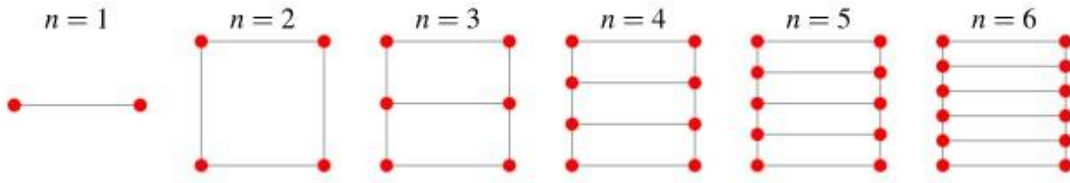
Şekil 2.2.5. İki parçalı tam graflar

Tanım 2.2.6. Bütün köşeleri eşit sayıda komşuluğa sahip olan graflar **düzgün (regular) graf** olarak adlandırılır. Köşe dereceleri r olan düzgün graf **r -düzgün (r -regular) graf** olarak adlandırılır.



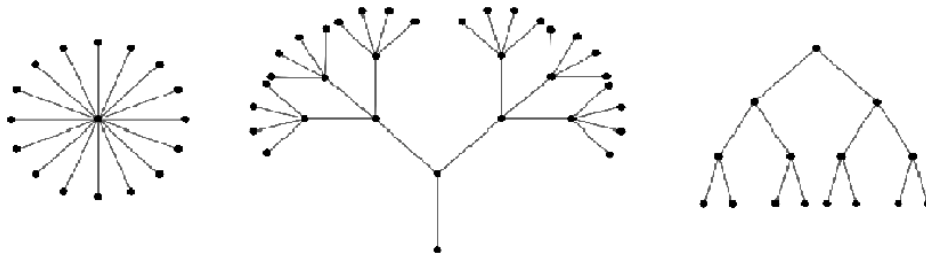
Şekil 2.2.6. 3-düzgün graf

Tanım 2.2.7. Mertebesi $2n$ ve boyutu $3n-2$ olan düzlemsel ve yönsüz graf **Ladder graf** olarak adlandırılır ve L_n şeklinde gösterilir.



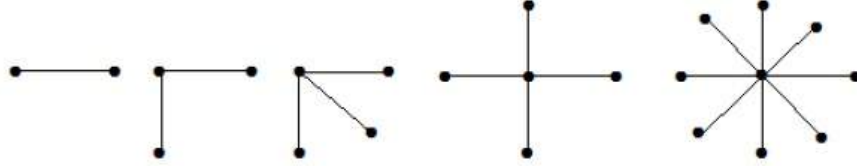
Şekil 2.2.7. Ladder graflar

Tanım 2.2.8. Bağlantılı bir graf devir içermiyorsa **ağaç graf** olarak adlandırılır ve T şeklinde ifade edilir.



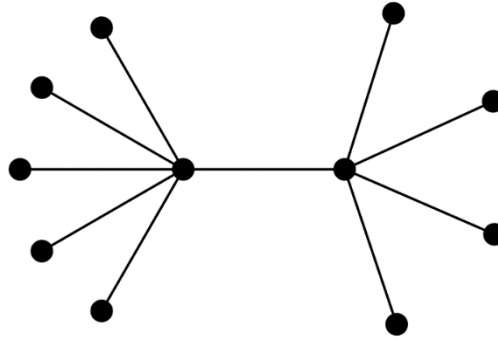
Şekil 2.2.8. Ağaç graflar

Tanım 2.2.9. Mertebesi n olan ağaç grafta, bir köşenin derecesi $n-1$; diğer bütün köşelerin dereceleri 1 ise **yıldız (star) graf** olarak adlandırılır ve S_n şeklinde ifade edilir. Yıldız graflar $K_{1,n-1}$ şeklinde tam iki parçalı graf olarak da adlandırılırlar.



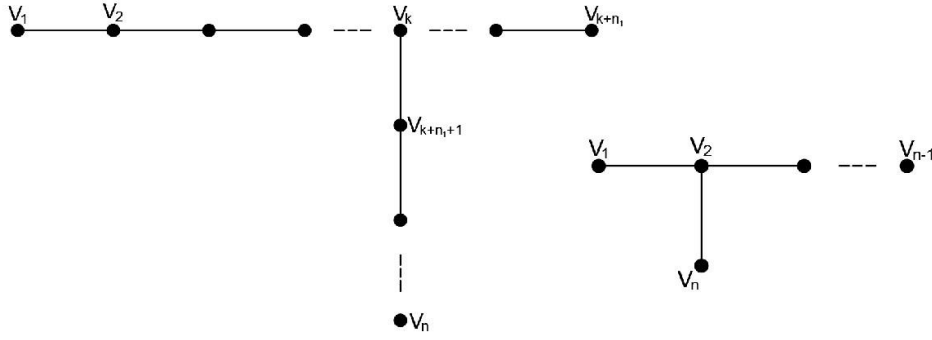
Şekil 2.2.9. Yıldız graflar

Tanım 2.2.10. $K_{1,n}$ ve $K_{1,m}$ adlı iki yıldız grafın merkezlerinin birleşmesinden oluşan graf **çift yıldız (double star) graf** olarak adlandırılır. Bir çift yıldız grafının köşe derecesi serisi $\{x + 1, y + 1, 1, 1, \dots, 1\}$ olmak üzere çift yıldız graf $S_{x,y}$ şeklinde gösterilir. Bir $S_{x,y}$ çift yıldız grafının köşe sayısı (mertebesi) $n = x + y + 2$ ve kenar sayısı (boyutu) $m = x + y + 1$ 'dir.



Şekil 2.2.10. $S_{5,4}$ çift yıldız grafi

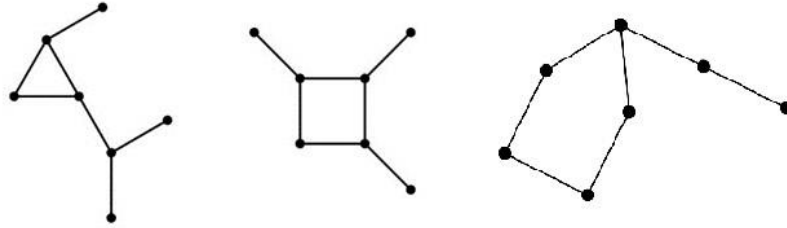
Tanım 2.2.11. $n_1 \geq 1$, $2 \leq k \leq n - n_1 - 1$ olmak üzere köşe kümesi $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ olan n mertebeli $T(n, n_1, k)$ ağaç grafi; $v_1 v_2 \dots v_{k+n_1}$ yolunun $v_{k+n_1+1} v_{k+n_1+2} \dots v_{n-1} v_n$ yoluna v_k köşesi ile eklenmesiyle oluşur. Ayrıca U_n şeklinde adlandırılan ağaç graf sınıfı $T(n, n - 3, 2)$ şeklindedir.



Şekil 2.2.11. $T(n, n_1, k)$ ve $U_n = T(n, n - 3, 2)$ ağaç grafları

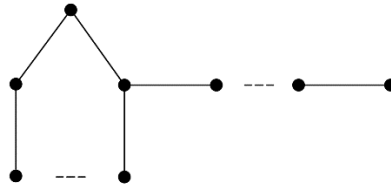
Tanım 2.2.12. Bir bağlantılı graf tek devir içeriyorsa o grafa **tek devir içeren (unicyclic) graf** denir. $n, k \geq 3$ olmak üzere n mertebeli ve k devir uzunluklu tüm tek devir içeren graflar $U_{n,k}$ ile gösterilir.

Örnek 2.2.1. Aşağıda $n = 7$ mertebe, $k = 3, 4, 5$ devir uzunluklu bazı $U_{n,k}$ tek devir içeren graflar veilmiştir.



Şekil 2.2.12. Bazı $U_{n,k}$ grafları

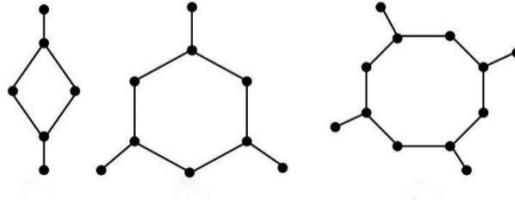
Tanım 2.2.13. $L_{n,k}$, n mertebeli ve k devir uzunluklu olan $U_{n,k}$ tek devir içeren graf sınıfının alt kümesi olsun. $L_{n,k}$ tek devir içeren alt graf sınıfı C_k ve P_{n-k+1} graflarının birleşiminden oluşur. Yani $L_{n,k} = C_k \cup P_{n-k+1}$ 'dir.



Şekil 2.2.13. $L_{n,k}$ grafi

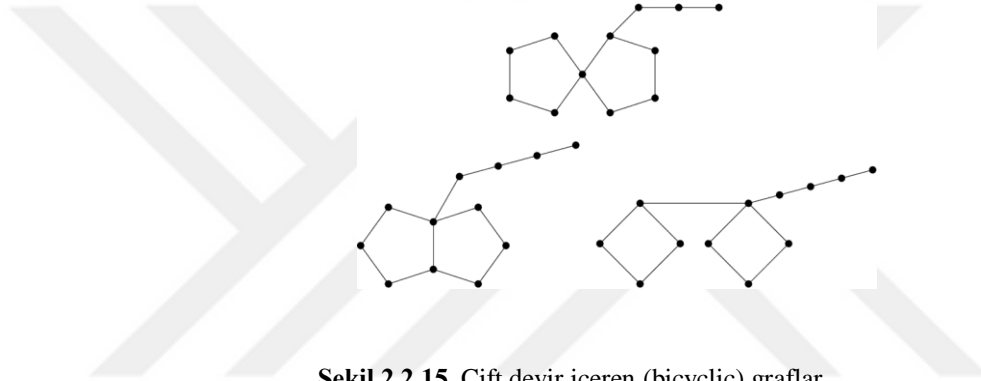
Tanım 2.2.14. $H_{n,k}$ tek devir içeren alt graf sınıfı ise C_k çevrimine $(n - k)$ tane uç köşe eklenmesiyle elde edilir.

Örnek 2.2.2. Aşağıda $n = 6, k = 4; n = 9, k = 6$ ve $n = 12, k = 8$ için $H_{n,k}$ grafları verilmiştir.



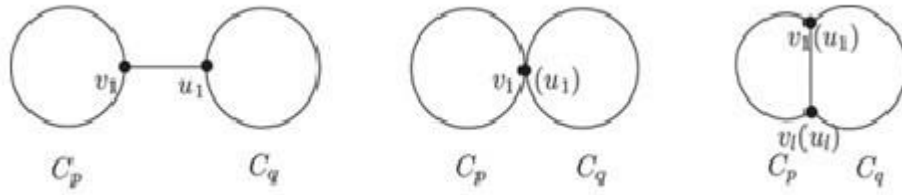
Şekil 2.2.14. Bazı $H_{n,k}$ grafları

Tanım 2.2.15. Bir bağlantılı graf iki tane devir içeriyorsa o grafa **çift devir içeren (bicyclic) graf** denir.



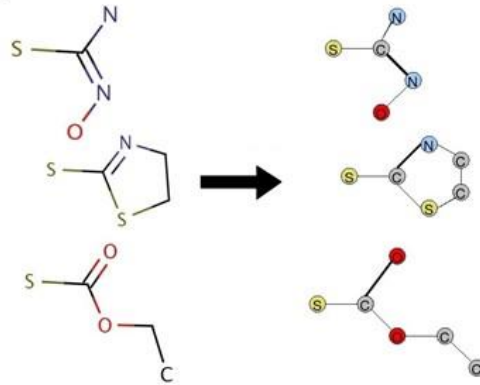
Şekil 2.2.15. Çift devir içeren (bicyclic) graflar

Tanım 2.2.16. B_n grafi C_p ve C_q çevrim graflarına sahip n .mertebeden tüm çift devir içeren grafların ailesi olsun. Çift devir içeren bağlantılı grafların ailesi B_n 'in bazı özel sınıflarını tanıtalım. $P_n^{k,t,m}$ çift devir içeren graf sınıfları C_k ve C_m çevrimlerinin P_t yolu ile bağlanmasıyla elde edilir. Buna göre $P_n^{k,t,m}$ grafının mertebesi $n = k + m + t - 2$ şeklindedir. $C_n(p, q)$ çift devir içeren graf sınıfı ise C_p ve C_q çevrimlerinin ortak bir köşe ile birleşmesinden oluşur. Buna göre $C_n(p, q)$ grafının mertebesi $n = p + q - 1$ şeklindedir. $C_n(l, r, t)$ çift devir içeren graf sınıfı üç yol P_l , P_r ve P_t 'nin iki asılı köşelerinin iki köşeye birleştirilmesiyle elde edilir. Buna göre $C_n(l, r, t)$ grafının mertebesi $n = l + r + t - 4$ şeklindedir.



Şekil 2.2.16. Çift devir içeren graf sınıfları

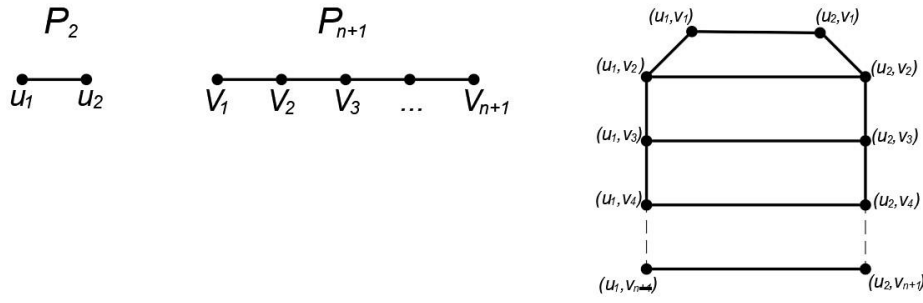
Tanım 2.2.17. Kimyasal graflarda atomlar köşeleri bağlar da kenarlarını oluşturur. Ayrıca moleküller bileşenleri ile aralarında en fazla 4 bağ bulundurulur. Bağlantılı bir grafın tüm köşelerinin derecesi 4'ten küçük veya eşit ise o grafa **kimyasal (chemical) graf** denir. Diğer bir ifade ile G bağlantılı bir graf $\forall u \in V(G)$ için $deg_G(u) \leq 4$ ise G grafi kimyasal bir graftır.



Şekil 2.2.17. Bazı moleküller ile kimyasal graf gösterimleri

2.3. Graf Operatörleri

Graf operatörlerinin graf teoride önemli bir yeri vardır. Genel ya da özel graflara uygulanan graf operatörleri yardımı ile bazı önemli ve farklı graflar elde edilebilir. Örneğin P_2 ve P_{n+1} yol graflarının kartezyen çarpımından L_n moleküler grafi elde edilir.



Şekil 2.3.1. P_2 ve P_{n+1} yol grafları ile kartezyen çarpımlarından elde edilen L_n moleküler grafi

Bu kısımda verilen graf operatörlerinin tanımları Klavzar (Klavzar, 2000) ve Harary (Harary, 1994)'nin çalışmalarından aktarılmıştır.

Tanım 2.3.1. (G_1, V_1) ve (G_2, V_2) iki basit ve bağlantılı graf olsun. $V = V_1 \times V_2$ kartezyen kümesinden alınan $u = (u_1, u_2)$ ve $v = (v_1, v_2)$ köşeleri için $u_1 = v_1$ ve $(u_2, v_2) \in E(G_2)$ ya da $(u_1, v_1) \in E(G_1)$ ve $u_2 = v_2$ şartını sağlayan u ve v komşu köşelerinden oluşan grafa G_1 ile G_2 grafının **kartezyen çarpım grafi (cartesian product graph)** denir ve $G_1 \times G_2$ ile gösterilir.

Tanım 2.3.2. (G_1, V_1) ve (G_2, V_2) iki basit ve bağlantılı graf olsun. $V = V_1 \times V_2$ kartezyen kümesinden alınan $u = (u_1, u_2)$ ve $v = (v_1, v_2)$ köşeleri için $(u_1, v_1) \in E(G_1)$ ya da $u_1 = v_1$ ve $(u_2, v_2) \in E(G_2)$ şartını sağlayan u ve v komşu köşelerinden oluşan grafa G_1 ile G_2 grafının **bileşim (composition) çarpım grafi (lexicographical graph)** denir ve $G_1[G_2]$ ile gösterilir.

Tanım 2.3.3. (G_1, V_1) ve (G_2, V_2) iki basit ve bağlantılı graf olsun. $V = V_1 \times V_2$ kartezyen kümesinden alınan $u = (u_1, u_2)$ ve $v = (v_1, v_2)$ köşeleri için $(u_1, v_1) \in E(G_1)$ ve $(u_2, v_2) \in E(G_2)$ şartını sağlayan u ve v komşu köşelerinden oluşan grafa G_1 ile G_2 grafının **tensor çarpım grafi** denir ve $G_1 \otimes G_2$ ile gösterilir.

Tanım 2.3.4. (G_1, V_1) ve (G_2, V_2) iki basit ve bağlantılı graf olsun. $V = V_1 \cup V_2$ köşe kümesi ve $E = E_1 \cup E_2 \cup \{uv : u \in V_1, v \in V_2\}$ kenar kümesi ile oluşan grafa G_1 ile G_2 grafının **birleşim çarpım grafi (join product graph)** denir ve $G_1 + G_2$ veya $G_1 \vee G_2$ ile gösterilir.

Tanım 2.3.5. (G_1, V_1) ve (G_2, V_2) iki basit ve bağlantılı graf olsun. $V = V_1 \times V_2$ kartezyen kümesinden alınan $u = (u_1, u_2)$ ve $v = (v_1, v_2)$ köşeleri için $(u_1, v_1) \in E(G_1)$ ya da $(u_2, v_2) \in E(G_2)$ şartını (her ikisi birden değil) sağlayan u ve v komşu köşelerinden oluşan grafa G_1 ile G_2 grafının **simetrik farkı çarpım grafi (symmetric difference product graph)** denir ve $G_1 \oplus G_2$ ile gösterilir.

Tanım 2.3.6. (G_1, V_1) ve (G_2, V_2) iki basit ve bağlantılı graf olsun. $|V_1| = n_1$ ve $|V_2| = n_2$ olmak üzere G_1 grafının bir kopyası ile G_2 grafının n_1 kopyası alınır. Daha sonra $i \in \{1, 2, \dots, n_1\}$ olmak üzere G_1 grafının her bir i . köşesini G_2 grafının i . kopyasındaki her bir köşeye katarak oluşan grafa G_1 ile G_2 grafının **corona çarpım grafi** denir ve $G_1 \circ G_2$ ile gösterilir.

Lemma 2.3.1. Herhangi iki G ve H grafları için

- i. $|V(G \times H)| = |V(G \oplus H)| = |V(G \otimes H)| = |V(G[H])| = |V(G)||V(H)|$
- ii. $|E(G \times H)| = |E(G)||V(H)| + |V(G)||E(H)|$
- iii. $|E(G + H)| = |E(G)| + |E(H)| + |V(G)||V(H)|$
- iv. $|E(G[H])| = |E(G)||V(H)|^2 + |V(G)||E(H)|$
- v. $|E(G \oplus H)| = |E(G)||V(H)|^2 + |V(G)|^2|E(H)| - 4|E(G)||E(H)|$

dir (Klavzar, 2000).

Lemma 2.3.2. G ve H grafları için çarpım graflarının köşelerinin dereceleri

- i. $(a, b) \in V(G \times H)$ ise $deg_{G \times H}(a, b) = deg_G a + deg_H b$
- ii. $(a, b) \in V(G[H])$ ise $deg_{G[H]}(a, b) = |V(H)|deg_G a + deg_H b$
- iii. $(a, b) \in V(G \oplus H)$ ise

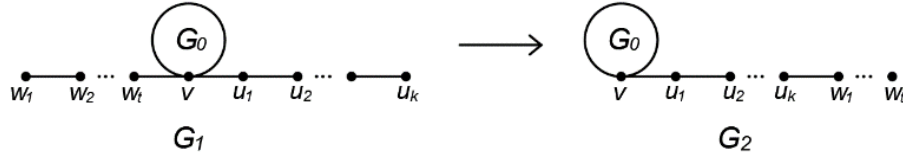
$$deg_{G \oplus H}(a, b) = |V(H)|deg_G a + |V(G)|deg_H b - 2deg_G a deg_H b$$
- iv. $a \in V(G + H)$ ise $deg_{G+H} a = \begin{cases} deg_G a + |V(H)| & a \in V(G) \\ deg_H a + |V(G)| & a \in V(H) \end{cases}$

dir (Khalifeh vd., 2008).

2.4. Graf Dönüşümleri

$E' \subseteq E(G \cup \bar{G})$ olmak üzere $G \pm E'$ grafına, G grafının kenar kümesine E' kümesinin silinmesiyle veya eklenmesiyle oluşan bir altgrafıdır denir. Benzer şekilde $V' \subseteq V(G \cup \bar{G})$ olmak üzere $G \pm V'$ grafına, G grafının köşe kümesine V' kümesi ve bağlı kenarlarının silinmesiyle veya eklenmesiyle oluşan bir altgrafıdır denir. Diğer tanımlanmayan terim ve gösterimler için (Bondy ve Murty, 2008) kaynağına bakılabilir.

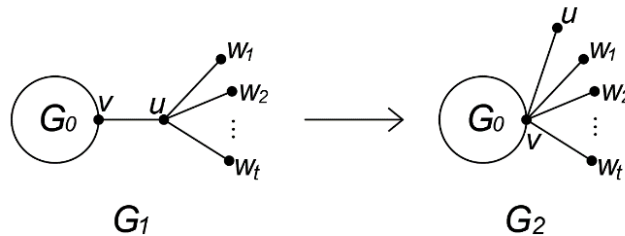
Tanım 2.4.1. G_0 boştan farklı bağlantılı bir graf ve v herhangi bir köşesi olmak üzere; G_1 , k ve t uzunluklu P_k ve P_t yollarının ortak köşesi olan v köşesi ile G_0 grafından elde edilen graf olsun. Eğer, $G_2 = G_1 - vw_t + u_k w_1$ ise; G_2 grafi G_1 grafından **Graf Dönüşümü 1** ile elde edilmiştir denir.



Şekil 2.4.1. Graf Dönüşümü 1

Uyarı 2.4.1. Dönüşüm 1'i tekrarlı uygulamak herhangi bir ağaç grafi bir yol grafına dönüştürür.

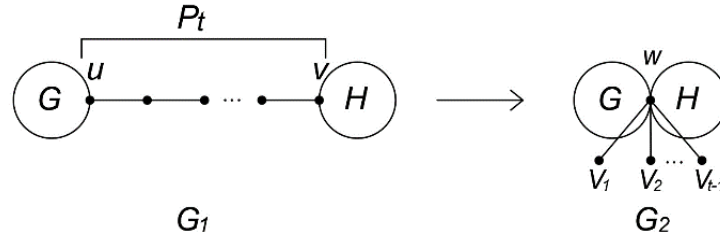
Tanım 2.4.2. G_0 boştan farklı bağlantılı bir graf ve uv kenarı G_1 bağlantılı grafının $deg_{G_1}(v) \geq 2$ olan bir kenarı olsun. Ayrıca $\{w_1, w_2, \dots, w_t\}$ uç köşeler ve $\{v, w_1, w_2, \dots, w_t\}$ kümesi u köşesinin tüm komşulukları olsun. Eğer $G_2 = G_1 - \{uw_1, uw_2, \dots, uw_t\} + \{vw_1, vw_2, \dots, vw_t\}$ ise; G_2 grafi G_1 grafından **Graf Dönüşümü 2** ile elde edilmiştir denir.



Şekil 2.4.2. Graf dönüşümü 2

Uyarı 2.4.2. Graf dönüşümü 2'yi tekrarlı uygulamak herhangi bir ağaç grafi yıldız grafına dönüştürür. Ayrıca tek devir içeren herhangi bir grafi çevrim üzerinde olmayan tüm kenarların uç kenar olmadığı tek ya da çift devir içeren grafa dönüştürür.

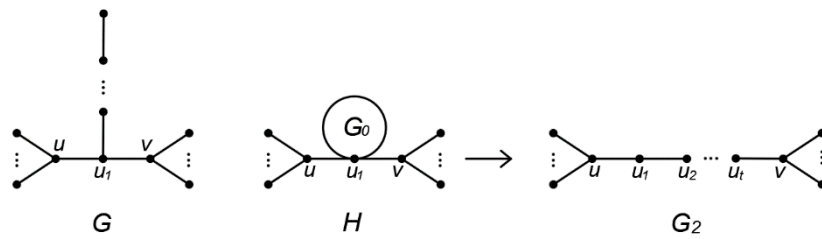
Tanım 2.4.3. G_1 grafi G ve H graflarını birleştiren t uzunluğa sahip bir $P_t = (u =)v_1v_2 \dots v_t(=v)uv$ yoluna sahip boştan farklı bağlantılı bir graf olsun. Eğer $G_2 = G_1 - \{v_1v_2, v_2v_3, \dots, v_{t-1}v_t\} + \{(u+v=w)v_1, wv_2, \dots, wv_{t-1}\}$ ise; G_2 grafi G_1 grafindan **Graf Dönüşümü 3** ile elde edilmiştir denir.



Şekil 2.4.3. Graf Dönüşümü 3

Uyarı 2.4.3. Graf dönüşümü 3'ü tekrarlı uygulanamak uç köşelerine iki graf eklenmiş herhangi bir yol grafi, çevrimde olmayan tüm kenarların uç kenar olduğu tek ya da çift devir içeren grafa dönüştürür.

Tanım 2.4.4. G_0 , t mertebeli boştan farklı devir içermeyen bir graf olsun. Ayrıca G_0 grafi $deg_{G_1}(u) = x$ ve $deg_{G_1}(v) = y$ olan u ve v komşu köşelerinden farklı u_1 köşesi ile G_1 grafına bağlı olsun. Eğer $G_2 = G_1 - (G_0 - u_1) + u_1u_2 + u_3u_3 + \dots + u_tv$ şeklinde ise; G_2 grafi G_1 grafindan **Graf Dönüşümü 4** ile elde edilmiştir denir.



Şekil 2.4.4. Graf Dönüşümü 4

Uyarı 2.4.4. Graf dönüşümü 4'ü tekrarlı uygulanamak herhangi bir ağaç grafi, yoldaki tüm kenarları uç kenar olmadığı bir yol grafına dönüştürür.

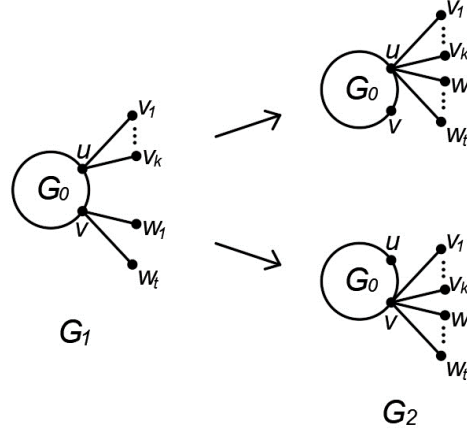
Tanım 2.4.5. G_1 u ve v köşelerine sahip bağlantılı bir graf olsun. $\{v_i\}_{i=1}^k$ ve $\{w_i\}_{i=1}^t$ köşeleri sırası ile u ve v köşelerine komşu uç köşeler olmak üzere

$$G_2 = G_1 - \{vw_1, vw_2, \dots, vw_t\} + \{uw_1, vw_2, \dots, uw_t\}$$

ve

$$G_2' = G_1 - \{uv_1, uv_2, \dots, uv_k\} + \{vv_1, vv_2, \dots, vv_t\}$$

şeklinde ise; G_2 ve G_2' grafları G_1 grafından **Graf Dönüşümü 5** ile elde edilmiştir denir.



Şekil 2.4.5. Graf Dönüşümü 5

Uyarı 2.4.5. Graf dönüşümü 5'i tekrarlı uygulamak tek ya da çift devir içeren herhangi bir grafi, tüm uç köşelerinin aynı köşeye eklenmiş olduğu tek ya da çift devir içeren bir grafa dönüştürür.

3. TOPOLOJİK İNDEKSLER

Topolojik indeks kavramının ilk olarak ortaya çıkışı Harry Wiener tarafından 1947 yılında parafinlerin kaynama noktası üzerinde çalışılırken bulundu. Moleküler bileşenlerin farklı fiziko-kimyasal özellikleri ile moleküler grafının Wiener indeksi arasında iyi bir ilişki olduğu gösterildi (Wiener, 1947; 1948). Topolojik indeksler ilk başta matematikçilerin ilgisini çekmese de 1998 yılında Matematikçi Erdős bir topolojik indeks olan Randik indekste gizlenen ve öngörülen fakat zor olan Randik indeksin alt sınırını grafın mertebesi cinsinden bulması ile topolojik indeksler matematiksel yöntemler ile iyileştirilmeye başlandı (Bollabas ve Erdős 1998).

Literatürde topolojik indeksler graf parametrelerinden derece, uzaklık veya eksantrik bazlı olmak üzere üçe ayrılırlar ve her bir grupta düzinelerce graf değişmezleri (topolojik indeks) vardır. Aşağıda derece, uzaklık ve eksantrik bazlı olmak üzere bazı topolojik indeksler ile bulunuş yılları verilmiştir.

TOPOLOJİK İNDEKSLER

<u>Derece Bazlı</u>	<u>Uzaklık Bazlı</u>	<u>Eksantrik Bazlı</u>
• Zagreb (1972)	• Wiener (1947)	• Eksantrik Bağlantılılık (1997)
• Randik (1975)	• Harary (1992)	• Geometrik-Aritmetik (2010)
• Harmonik (1980)	• Hyper-Wiener (1993)	• Zagreb Eksantriklik (2012)
• Toplam bağlantılılık (2009)	• Szeged (1994)	• Toplam eksantrik (2015)
• Forgotten (2015)	• Mostar (2018)	• Eksantrik Harmonik (2017)

Tablo 3.1. Topolojik indekslerin sınıflandırılması

Topolojik indeksler grafin çeşitli parametrelerine bağlı olabilir. Bir moleküldeki atomların en önemli yönü bağlı olduğu atomlar olması açısından daha kullanışlı değişmezlerin bir çoğunun dereceler cinsinden tanımlanması şartıdır. Bu türden en iyi bilinen indekslerden bazıları Tablo 3.2.'de verilmiştir. Bu türlerden tanımlanan bir çok indeks de oldukça ilgi görmüştür (Das vd., 2021).

Bu tezde üzerinde çalıştığımız topolojik indeksler köşe-derece-bazlı olacaktır. F fonksiyonu $F(x, y) = F(y, x)$ sağlayan bir fonksiyonu olmak üzere bir G grafinin komşu köşeler üzerinde tanımlanan köşe-derece bazlı topolojik indeksleri için genel formülü;

$$TI(G) = \sum_{v_i v_j \in E(G)} F(d(v_i), d(v_j))$$

şeklinde verilebilir (Gutman, 2021).

x ile y grafin komşu olan u ve v köşelerinin dereceleri $d(u)$ ile $d(v)$ olmak üzere çeşitli köşe-derece-bazlı topolojik indeksleri aşağıdaki tablodaki gibi gösterilebilir.

<u>Köşe-derece-bazlı topolojik indeksler</u>	<u>$F(x,y)$ fonksiyonları</u>	<u>Gösterimleri</u>
Birinci Zagreb indeksi	$x+y$	M_1
İkinci Zagreb indeksi	xy	M_2
Birinci Hyper-Zagreb indeksi	$(x + y)^2$	HM_1
İkinci Hyper-Zagreb indeksi	$(xy)^2$	HM_2
Randik indeksi	$1/\sqrt{xy}$	R
Toplam-Bağlantılılık indeksi	$1/\sqrt{x + y}$	SCI
Harmonik indeks	$2/x + y$	H
ABC indeksi	$\sqrt{(x + y - 2)/(xy)}$	ABC
Sombor indeksi	$\sqrt{x^2 + y^2}$	SO
Unutulmuş (forgotten) indeks	$x^2 + y^2$ ya da x^3	F

Tablo 3.2 Köşe-derece bazlı topolojik indekslerin F fonksiyonları ve gösterimleri

3.1. Topolojik İndeksler Üzerine Kaynak Araştırması

Aşağıda verilen topolojik indeksler üzerine yapılan graf parametreleri ve çarpımlarının da dahil olduğu tezde kullanılan tüm kaynakların araştırması gelişimlerinin gözlenmesi açısından yıllara göre sıralanarak sunulmuştur.

Wiener (1947), “*Structural Determination of Paraffin Boiling Points*” isimli çalışmada topolojik indeks kavramı ortaya çıkmıştır. Parafinlerin kaynama noktası üzerinde çalışılırken bulunan bu topolojik indeks önce yol numarası daha sonra Wiener indeks olarak adlandırılmıştır.

Wiener (1948), “*Relation of the Physical Properties of the Isomeric Alkanes to Molecular Structure*” isimli çalışmada da molekül grafının Wiener indeksi ile bileşenlerinin farklı fiziko-kimyasal özellikleri arasında iyi bir ilişki olduğu gösterilmiştir.

Euler (1953), “*Leonard Euler and the Königsberg bridges*” isimli çalışmada graf teorii Matematik biliminin yeni bir alanı olarak ortaya çıkaran problem yayınlanmıştır.

Gutman ve Trinajstic (1972), “*Graph theory and molecular orbitals. Total π -electron energy of alternant hydrocarbons*” isimli çalışmada moleküler yapının toplam π -elektron enerjisinin bağıllığını incelerken yeni bir derece bazlı topolojik indeks olan Zagreb indeksi tanımlanmıştır.

Ostrand (1973), “*Graph with specified radius and diameter*” isimli çalışmada grafın yarıçapı ile uzaklığı arasında var olan eşitsizliğin bu parametreler üzerindeki tek kısıtlama olduğu gösterilmiştir.

Gutman vd. (1975), “*Graph theory and molecular orbitals. XII. Acyclic polyenes*” isimli çalışmada daha önce tanımlanan Zagreb indeks ile ilgili bir formül üretilmiş ve yapı-özellik modellerinde kullanılmıştır.

Buckley ve Harary (1990), “*Distance in Graphs*” isimli çalışmada graf teorisinin önemli parametresi olan uzaklık ile ilgili çalışmalar yapılmıştır.

Harary (1994), “*Graph Theory*” isimli çalışmada temel graf teori tanımları ile graf çarpımlarından lexicographic çarpım grafi tanımı, ayrıca tek devir içeren graf tanımı verilmiştir.

Bollabas ve Erdös (1998), “*Graphs of extremal weights*” isimli çalışmada grafın mertebesi cinsinden Randik indeksin alt sınırı bulunmuştur. Bu çalışmadan sonra topolojik indeksler matematikçilerin ilgisini çekmeye başlamıştır.

Hardy vd. (1998), “*Inequalities*” isimli çalışmada eşitsizlikler detaylı bir şekilde ele alınmıştır.

Klavzar (2000), “*Product Graphs: Structure and Recognition*” isimli çalışmada çarpım graflarının yapısı, köşe ve kenar kümeleri üzerinde geçerli olan eşitlik ve eşitsizlikler verilmiştir.

Katritzky vd. (2000), “*Structurally diverse quantitative structure-property relationship correlations of technologically relevant physical properties*” isimli çalışmada QSPR\QSAR teknikleri ile ilgili detaylı inceleme, karşılaştırma ve öngörülerde bulunulmuştur.

Nikolic vd. (2003), “*The Zagreb indices 30 years after*” isimli çalışmada Zagreb indekslerinin orijinal formülleri sunulmuş ve bazı diğer topolojik indeksler ile karşılaştırılmıştır. Literatürde bulunan en iyi beş tanımlayıcı modelin ikinci Zagreb indeksini içerdiği gösterilmiştir.

Gross ve Yellen (2004), “*Handbook of Graph Theory*” isimli çalışmada graf teorisinin en temel bilgileri verilmiştir.

Das ve Gutman (2004), “*Some Properties of the Second Zagreb Index*” isimli çalışmada ikinci Zagreb indeksi ile ilgili eşitsizlikler ve grafın tamamlayıcısı ile olan ilişkileri incelenmiştir.

Gutman ve Das (2004), “*The First Zagreb Index 30 Years After*” isimli çalışmada birinci Zagreb indeksin kimyasal graf teori ile bir çok alanda ilgili olduğu gösterilmiş ve bazı genel matematiksel özelliklere değinilmiştir. Özellikle uç graflar ve birkaç alt ve üst sınırlardan bahsedilmiştir.

Hansen ve Vukucevic (2007), “*Comparing the Zagreb index*” isimli çalışmada birinci ve ikinci Zagreb indeksleri arasında bulunan bir eşitsizliğin yalnızca kimyasal graflarda geçerli olduğu gösterilmiş ve tüm genel graflarda geçerli olmadığının ters örnekleri verilmiştir.

Deng (2007), “*A unified approach to the extremal Zagreb indices for trees, unicyclic graphs and bicyclic graphs*” isimli çalışmada devir içeren ya da içermeyen moleküler graflar için Zagreb indekslerinin uç değerleri şimdiye kadar kullanılmayan farklı bir yaklaşımla elde edilmiştir.

Yan vd. (2007), “*Sharp bounds for the second Zagreb index of unicyclic graphs*” isimli çalışmada tek döngü içeren graflar için ikinci Zagreb indeksinin alt ve üst sınırları elde edilmiş ve bu sınırları sağlayan tek döngülü graflar belirlenmiştir.

Bondy ve Murty (2008), “*Graph Theory*” isimli çalışmada graf teorisinin temel tanımları detaylı bir şekilde ele alınmıştır.

Doslic (2008), “*Vertex-weighted Wiener polynomials for composite graphs*” isimli çalışmada köşe ağırlıklı Wiener polinomları için bileşik graf sınıflarının formülleri verilmiş ve Zagreb indekslerinin eşindeksleri tanımlanmıştır.

Khalifeh vd. (2008), “*The hyper-Wiener index of graph operations*” isimli çalışmada bazı graf çarpımlarının hyper-Wiener indeksi hesaplanmış ayrıca bazı moleküler graflar üzerinde de uygulamaları verilmiştir.

Khalifeh vd. (2009), “*The first and second Zagreb indices of some graph operations*” isimli çalışmada birinci ve ikinci Zagreb indeksleri için graf operatörlerinden kartezyen, birleşim, lexico, disjunction ve simetrik fark çarpımları sunulmuştur. Ayrıca bu graf çarpımlarının bazı moleküler graflar üzerinde uygulamalarına yer verilmiştir.

Todeschini ve Consonni (2010), “*Molecular descriptors*” isimli çalışmada Narumi-Katayama indeksine benzer olarak Zagreb indekslerinin çarpımları ortaya konmuştur.

Ashrafi vd., (2010), “*The Zagreb coindices of graph operations*” isimli çalışmada Zagreb eşindekslerinin temel özellikleri ve bazı graf operatörleri (çarpımları) üzerinde açık formülleri sunulmuştur.

Gutman (2011), “*Multiplicative Zagreb Indices of Trees*” isimli çalışmada ağaç grafların çarpımsal Zagreb indekslerinin uç grafları incelenmiştir.

Ashrafi vd. (2011), “*Extremal graphs with respect to the Zagreb coindices*” isimli çalışmada bazı özel graf sınıflarının Zagreb eşindeks değerlerinin yanında Zagreb eşindekslerinin uç grafları verilmiştir.

Ilic ve Stevanovic (2011), “*On comparing Zagreb indices*” isimli çalışmada birinci ve ikinci Zagreb indekslerinin net alt sınırları bulunmuştur.

Eliasi vd. (2012), “*Multiplicative versions of first Zagreb index*” isimli çalışmada daha önce Narumi-Katayama indeksine benzer olarak tanımlanan Zagreb indekslerinin çarpımsalları; birinci, ikinci ve modifiye edilmiş birinci çarpımsal Zagreb indeksleri olarak yeniden isimlendirilmiştir.

Xu ve Das (2012), “*Trees unicyclic and bicyclic graphs extremal with respect to multiplicative sum Zagreb index*” isimli çalışmada yeni bir çarpımsal indeksi çarpımsal toplam Zagreb indeksi olarak adlandırılmış ardından devir içermeyen, tek ve çift devir içeren graflar için uç grafları daha önce yapılan çalışmadan daha kısa ve farklı olarak elde edilmiştir.

Xu ve Hua (2012), “*A unified approach to extremal multiplicative Zagreb indices for trees, unicyclic and bicyclic graphs*” isimli çalışmada çarpımsal Zagreb indekslerinin moleküler graflar üzerindeki uç grafları farklı bir yaklaşımla ele alınmıştır. Çeşitli graf dönüşümleri tanımlanarak indekslerin graf dönüşümlerinde hareketlerinin incelenmesi ile elde edilmiştir.

Reti ve Gutman (2012), “*Relations between ordinary and multiplicative Zagreb indices*” isimli çalışmada birinci ve ikinci çarpımsal Zagreb indeksler için bir alternatif bir formül ile bu indekslerin sınırları bulunmuş, üstelik birinci ve ikinci Zagreb indeksler ile karşılaştırılmıştır.

Liu ve Zhang (2012), “*Sharp upper bounds for multiplicative Zagreb indices*” isimli çalışmada çarpımsal Zagreb indekslerin net üst sınırları bulunmuştur.

Das vd. (2013), “*The multiplicative Zagreb indices of graph operations*” isimli çalışmada bazı graf operatörlerinin çarpımsal Zagreb indekslere göre üst sınırları hesaplanmıştır.

Eliasi ve Vukucevic (2013), “*Comparing the Multiplicative Zagreb Indices*” isimli çalışmada birinci ve ikinci çarpımsal Zagreb indeksler karşılaştırılmıştır.

Xu vd. (2013), “*On the Multiplicative Zagreb Coindex of Graphs*” isimli çalışmada toplamsal Zagreb eşindekslerine benzer olarak çarpımsal Zagreb indekslerinin eşindeksleri tanıtılmıştır. Ayrıca moleküler graflar üzerinde sınırları elde edilmiştir.

Nezhad vd. (2014), “*Comparing the second multiplicative Zagreb coindex with some graph invariants*” isimli çalışmada ikinci çarpımsal Zagreb eşindeksinin Zagreb indekslerinin yanında bazı topolojik indeksler ile olan karşılaştırmalarına yer verilmiştir.

Gutman vd. (2015), “*On Zagreb Indices and Coindices*” isimli çalışmada bir grafın tümleyeninin birinci ve ikinci Zagreb indekslerinin grafın birinci ve ikinci Zagreb eşindeksleri arasında dikkat çekici ilişkiler bulunmuştur.

Azari ve Iranmanesh (2015), “*Some inequalities for the multiplicative sum Zagreb index of graph operations*” isimli çalışmada bazı graf operatörleri üzerinde çarpımsal toplam Zagreb indeksi ile çarpımsal Zagreb indekslerinin sınırları elde edilmiştir.

Basavanagoud ve Patil (2016), “*A note on hyper-Zagreb index of graph operations*” isimli çalışmada corona, kartezyen ve bileşim (composition) graf operatörlerinin hyper-Zagreb indeksleri hesaplanmıştır.

Bindusree vd. (2016), “*Zagreb polynomials of three graph operators*” isimli çalışmada graf operatörleri üzerinde Zagreb indekslerinden üretilmiş olan Zagreb polinomları çalışılmıştır.

Das vd. (2016), “*On the first Zagreb index and multiplicative Zagreb coindices of graphs*” isimli çalışmada graf parametrelerine bağlı olarak birinci Zagreb indeksinin sınırları verilmiştir. Yine benzer şekilde birinci ve ikinci Zagreb eşindekslerinin de sınırları verilmiştir. Ayrıca bu indeksler için uç graflar belirlenmiştir. Son olarak da bazı topolojik indeksler ile aralarındaki ilişkiler incelenmiştir.

De vd. (2016), “*The F-coindex of some graph operations*” isimli çalışmada yeni bir eşindeks olan F -eşindeksi tanımlanmıştır. Ayrıca F -eşindeksinin graf operatörlerinde davranışları incelenerek özellikleri elde edilmiştir.

Boravicanin vd. (2017), “*Bounds for Zagreb indices*” isimli çalışmada Zagreb indeksleri için yeni sınırlar elde edilmiştir. Ayrıca 2016 yılı sonuna kadar mevcut literatürü kapsamaya çalışarak, bu türden en önemli tahminlerin bir araştırması sunulmuştur.

Gao vd. (2017), “*Sharp Bounds of the Hyper-Zagreb Index on Acyclic, Unicyclic, and Bicyclic Graphs*” isimli çalışmada devir (cyclic) graflar için hyper-Zagreb indeksin net sınırları elde edilmiştir.

Mijalkov (2018), “*Graph theory to study complex networks in the brain*” isimli tez çalışmasında beyin ağları graf teori ile ifade edilerek çalışılmıştır.

Rada (2019), “*Exponential vertex-degree-based topological indices and discrimination*” isimli çalışmada köşe-derece bazlı topolojik indekslerin graflar üzerindeki farkları incelenmiştir. Köşe-derece bazlı topolojik indekslerden Randik indeksinin graflar üzerinde üsteli çalışılmıştır.

Cruz ve Rada (2019), “*The path and the star as extremal values of vertex-degree-based topological indices among trees*” isimli çalışmada ağaç grafların topolojik indekslerinin bir sunumu bulunmuş ve bu sunumun bir fonksiyonu elde edilmiştir. Uygulama olarak köşe-derece bazlı üstel topolojik indekslerin uç grafları verilmiştir.

Buyantogtokh vd. (2020), “*On reduced second Zagreb index*” isimli çalışmada tüm tek devir içeren graflar üzerinde indirgenmiş ikinci Zagreb indeksinin uç grafları analiz edilmiştir.

Zeng ve Deng (2020), “*The maximal tree with respect to the exponential of the second Zagreb index*” isimli çalışmada ikinci üstel Zagreb indeksinin en büyük grafının dengeli yıldız graf olduğu gösterilmiştir.

Loksha vd. (2020), “*New results on the F-index of graphs based on corona-type products of graphs*” isimli çalışmada Corona tip graf operatörüne topolojik indekslerden unutulmuş indeks ile ilgili sonuçlar elde edilmiştir.

Das vd. (2021), “*On Sombor index*” isimli çalışmada Sombor indeksinin yeni alt ve üst sınırları elde edilmiştir. Ayrıca, Zagreb indeksleri ile olan ilişkileri incelenmiştir.

Akgüneş ve Aydın (2021), “*Introducing New Exponential Zagreb Indices for Graphs*” isimli çalışmada Zagreb indeksin yeni türevleri olan üstel Zagreb indeksler tanımlanmıştır. Genel ve devir graflar için sonuçlar elde edilmiştir. Ayrıca üstel Zagreb indeksleri graf operatörleri üzerinde de çalışılmıştır.

Gutman (2021), “*Geometric Approach to Degree-Based Topological Indices: Sombor Indices*” isimli çalışmada yeni bir köşe-derece bazlı topolojik indeks Sombor indeksi tanımlanmıştır. Ayrıca Sombor indeksinin temel özellikleri elde edilmiştir.

Cruz vd. (2021), “*Sombor Index of Chemical Graphs*” isimli çalışmada Sombor indeksinin kimyasal graflar üzerinde uç grafları çalışılmıştır.

Kirmani vd. (2022), “*Topological coindices and quantitative structure-property analysis of antiviral drugs investigated in the treatment of COVID-19*” isimli çalışmada COVID-19 salgınında kullanılabilecek çeşitli ilaçların topolojik eşindeksleri elde edilmiş ve ilaçların fiziko-kimyasal özellikleri ile eşindeksleri arasında iyi bir ilişki gözlemlenmiştir.

3.2. Zagreb İndeksleri

Zagreb indeksleri en eski köşe-derece bazlı graf değişmezleridir. Kimyasal olarak karbon atom iskeletinin dallanma derecesidir. Gutman ve Trinajstić moleküler yapının toplam π -elektron enerjisinin bağıllığını incelerken Zagreb indeksini tanıtmışlardır (Gutman ve Trinajstić 1972). Buradan bir formül üretmişler ve daha sonra yapı-özellik modellerinde kullanmışlardır (Gutman vd. 1975). Zagreb indeksleri kimyasal bir yapının π -elektron enerjisini matematiksel metotlarla elde etmek ya da en azından yaklaşık değerini bulmak için oluşturulmuş değişmez bir gerçektir. Zagreb indeksleri hem köşe hem de kenar kümeleri üzerinde tanımlandığından hemen hemen tüm konularla ilişkilendirilebilirler. Bir grafin birinci ve ikinci Zagreb indeksi en çok çalışılan topolojik indeksler arasındadır. Ayrıca en iyi beş tanımlayıcı model ikinci Zagreb indeksini içermektedir (Nikolic vd., 2003).

Bu kısımda öncelikle Zagreb indekslerinin tanımları verilecek ardından Zagreb indekslerinin sınırları, uç grafları ile kendi aralarında ve diğer topolojik indeksler ile olan karşılaştırmalarını içeren bazı teorem ve sonuçlara değinilecektir.

Tanım 3.2.1. Bir grafın birinci ve ikinci Zagreb indeksi M_1 ve M_2 sırası ile köşe kümesi üzerinde köşe derecelerinin kareleri toplamı ve kenar kümesi üzerinde komşu köşe derecelerinin çarpımlarının toplamı olarak tanımlanır. Yani

$$M_1(G) = \sum_{v \in V(G)} deg_G^2(v)$$

ve

$$M_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} deg_G(u) \cdot deg_G(v)$$

dır (Gutman ve Trinajstic, 1972; Gutman vd., 1975).

Tanım 3.2.2. Birinci Zagreb indeksi alternatif olarak kenar kümesi üzerinde

$$M_1(G) = \sum_{uv \in E(G)} (deg_G(u) + deg_G(v))$$

şeklinde tanımlanmıştır (Nikolic vd., 2003).

Lemma 3.2.1. Yukarıda tanımlanan birinci Zagreb indeksleri birbirine eşittir. Diğer bir ifade ile;

$$\sum_{v \in V(G)} deg_G^2(v) = \sum_{uv \in E(G)} (deg_G(u) + deg_G(v))$$

dir (Nikolic vd., 2003).

Zagreb indekslerin çarpımsal ifadeleri yakın zamanda aşağıdaki gibi Todeschini ve Consonni tarafından verilmiş fakat Gutman tarafından adlandırılmıştır.

Tanım 3.2.3. Bir grafın birinci ve ikinci çarpımsal Zagreb indeksleri

$$\pi_1(G) = \prod_{u \in V(G)} deg_G^2(u)$$

ve

$$\pi_2(G) = \prod_{uv \in E(G)} \text{deg}_G(u) \cdot \text{deg}_G(v)$$

dir (Todeschini ve Consonni, 2010; Gutman, 2011).

Çarpımsal Zagreb indeksinin bir türevi olan modifiye edilmiş birinci çarpımsal Zagreb indeksi de tanımlanmıştır.

Tanım 3.2.4. Bir G grafının birinci Zagreb indeksinin modifiye edilmiş çarpımsal indeksi;

$$\pi_1^*(G) = \prod_{uv \in E(G)} [\text{deg}_G(u) + \text{deg}_G(v)]$$

şeklinde tanımlanır (Eliasi vd., 2012).

Daha sonra bu indeks çarpımsal toplam Zagreb indeksi olarak adlandırılmıştır (Xu ve Das, 2012).

Topolojik eşindeksler ilk olarak Zagreb indekslerin eşindeksleri olarak 2008 yılında literatüre giriş yapmıştır. Eşindeksler de tıpkı topolojik indeksler gibi moleküllere uygulanan ve anlamlı sonuçlar elde edilen topolojik indekslerdendir. Bir çok topolojik indeksin eşindeksleri tanımlanmış ve çalışmalar yapılmıştır (Ashrafi vd., 2010; 2011, Das vd., 2016). Başka bir eşindeks olan F-eşindeksi ise bazı moleküllerin F-eşindeks değeri ile moleküllerin özellikleri arasında oldukça yüksek çıkan korelasyon katsayısı sonucunda önemli bir eşindeks olarak çalışılmıştır (De vd., 2016).

Topolojik eşindekslerden birinci ve ikinci Zagreb eşindeksleri Doslic tarafından belirli bileşik grafların ağırlıklı Wiener polinomlarını hesaplarken bulunmuştur (Doslic, 2008).

Tanım 3.2.5. Bir grafın birinci ve ikinci Zagreb eşindeksleri (coindices)

$$\overline{M_1(G)} = \sum_{uv \notin E(G)} (\text{deg}_G(u) + \text{deg}_G(v))$$

ve

$$\overline{M_2(G)} = \sum_{uv \in E(G)} (deg_G(u) \cdot deg_G(v))$$

dir (Doslic, 2008).

Tanım 3.2.6. Bir grafın birinci ve ikinci çarpımsal Zagreb eşindeksleri

$$\overline{\pi_1(G)} = \prod_{uv \in E(G)} (deg_G(u) + deg_G(v))$$

ve

$$\overline{\pi_2(G)} = \prod_{uv \in E(G)} (deg_G(u) \cdot deg_G(v))$$

dir (Xu vd., 2013).

Bir grafın Zagreb indekslerinin eşindeksleri ise grafın komşu olmayan köşeleri arasında tanımlanmasından dolayı aslında bu grafın tamamlayıcısının Zagreb indekslerini andırabilir fakat tam anlamıyla değildir.

Zagreb indeksleri tanımların fazlalığından da anlaşılacağı üzere oldukça fazla kullanılan ve popüler olan bir köşe-derece bazlı topolojik indekstir. Dikkat edileceği üzere tüm Zagreb indeksler bir anda değil farklı zamanlarda ortaya konmuş, çalışmaları ise halen sürmektedir. Şimdi Zagreb indeksleri ile ilgili teorem ve sonuçlara değinilecektir. Aşağıda verilen ilk sonuç, bir grafın birinci Zagreb indeksinin tanımından farklı bir şekilde eşitini vermektedir.

Sonuç 3.2.1. Herhangi bir G grafının köşelerinin derecesi k olan köşe sayısı n_k ile ifade edilsin. Buna göre G grafının birinci Zagreb indeksi

$$M_1(G) = \sum_{k \geq 0} k^2 n_k$$

dir (Xu vd., 2013).

Zagreb indeksleri ile ilgili bir çok çalışma yapılmıştır. Bunların içinde Zagreb indekslerinin kendi aralarında karşılaştırmaları ve eşitsizlikleri de elde edilmiştir. Aşağıda verilen eşitsizlik önce tüm graflar için söylenmiştir. Fakat daha sonra yalnızca kimyasal graflarda geçerli olduğu, tüm graflarda eşitsizliğin sağlanmadığı ters örnekler verilerek elde edilmiştir.

İddia 3.2.1. Basit ve bağlantılı bir G grafi için

$$\frac{M_1(G)}{n} \leq \frac{M_2(G)}{m}$$

eşitsizliği tüm kimyasal graflar için geçerli olduğu fakat genel grafların tümü için geçerli olmadığı ters örnekler bulunarak gösterilmiştir (Hansen ve Vukucevic, 2007).

Tüm topolojik indekslerde sınırlar elde etmek kullanımı açısından oldukça önemli çalışmaları oluşturmaktadır. Birinci Zagreb indeksi de grafin yalnızca merteye ve boyutuna bağlı olarak alttan sınırlandırılabilir.

Teorem 3.2.1. Herhangi bir n köşeli ve m kenarlı bir G grafinin birinci Zagreb indeksi için

$$M_1(G) \geq \frac{4m^2}{n}$$

eşitsizliği geçerlidir. Ayrıca G grafinin düzgün graf olması halinde eşitlik gerçekleşir (Ilic ve Stevanovic, 2011).

Aşağıda verilen Lemma bir sonraki teoremde ikinci Zagreb indeksinin grafin yalnızca merteye ve boyutuna bağlı olan alt sınırının elde edilmesinde kullanılmıştır.

Lemma 3.2.2. $i = 1, 2, \dots, n$ olmak üzere $x_i \in \mathbb{R}^+$ için

$$\sum x_i \ln x_i \geq \sum x_i \ln \frac{\sum x_i}{n}$$

dir (Hardy vd., 1998).

Teorem 3.2.2. Herhangi bir n köşeli ve m kenarlı bir G grafinin ikinci Zagreb indeksi için

$$M_2(G) \geq \frac{4m^3}{n^2}$$

dir. Ayrıca eşitlik G grafinin düzgün olması halinde gerçekleşir (Ilic ve Stevanovic, 2011).

Kimyasal graflar için geçerli olan birinci ve ikinci Zagreb indeksleri arasındaki eşitsizlik tüm genel graflar için aşağıdaki gibi elde edilmiştir.

Teorem 3.2.3 m kenar sayısı ve Δ en büyük dereceye sahip bir G grafi için;

$$M_2(G) \leq \frac{\Delta}{2} M_1(G)$$

dir. Ayrıca G grafinin düzgün olması halinde eşitlik gerçekleşir (Ilic ve Stevanovic, 2011).

Teorem 3.2.4. Basit ve bağlantılı m kenarlı bir G grafi için;

$$M_1(G) + 2M_2(G) \leq 4m^2$$

eşitsizliği vardır ve eşitlik G grafinin tam graf olması durumunda gerçekleşir (Das ve Gutman, 2004).

Birinci ve ikinci çarpımsal Zagreb indeksleri için de grafin yalnızca mertebe ve boyutuna bağlı olan sınırları vardır. Ayrıca birinci ve ikinci çarpımsal Zagreb indeksleri arasında da eşitsizlikler bulunmuştur.

Teorem 3.2.5. Bağlantılı bir G grafi için

$$\pi_1(G) \leq \left(\frac{2m}{n}\right)^{2n}$$

dir. Ayrıca eşitliğin geçerli olması için gerek ve yeter koşul $G \cong K_n$ olmasıdır. Ayrıca, grafin ikinci çarpımsal Zagreb indeksinin

$$\pi_2(G) \geq \left(\frac{2m}{n}\right)^{2m}$$

şeklinde bir alt sınırı vardır. Eşitliğin geçerli olması için ise gerek ve yeter koşul G grafinin düzgün bir grafa izomorf olmasıdır (Reti ve Gutman, 2012).

Teorem 3.2.6. Herhangi bir bağlantılı grafin birinci çarpımsal Zagreb indeksi için farklı bir üst sınır

$$\pi_1(G) \leq \left(\frac{2m}{n}\right)^2$$

dır. Eşitliğin geçerli olması için G grafının $\frac{2m}{n}$ -düzgün grafa izomorf olması ile mümkündür (Reti ve Gutman, 2012).

Teorem 3.2.7. $n \geq 3$ mertebeye sahip bağlantılı bir G grafi için

$$\pi_1(G) \leq \pi_2(G)$$

dir. Ayrıca eşitliğin geçerli olması için gerek ve yeter şart ise G grafının yol ya da çevrim graflarından birine izomorf olmasıdır (Reti ve Gutman, 2012).

Teorem 3.2.8. Bağlantılı bir G grafi için köşe ve kenar sayısı sırası ile n ve m olmak üzere;

$$\sqrt[n]{\pi_1(G)} \leq \sqrt[m]{\pi_2(G)}$$

dir. Eşitliğin geçerli olması için gerek ve yeter şart G grafının düzgün grafa izomorf olmasıdır (Eliasi ve Vukucevic, 2013).

İkinci çarpımsal Zagreb indeksinin tanımından farklı bir ifadesi de elde edilmiştir.

Teorem 3.2.9. Bir grafın ikinci çarpımsal Zagreb indeksinin yalnızca köşe derecelerine bağlı olan eşiti

$$\pi_2(G) = \prod_{v \in V(G)} deg_G(v)^{deg_G(v)}$$

dir (Xu vd., 2013).

Çarpımsal Zagreb indekslerinin toplamsal Zagreb indeksleri ile olan karşılaştırmalarından bazılarına değinilecektir.

Teorem 3.2.10. Bağlantılı bir G grafi için köşe sayısı n olmak üzere birinci çarpımsal Zagreb indeksinin birinci Zagreb indekse bağlı bir üst sınırı

$$\pi_1(G) \leq \left(\frac{M_1(G)}{n} \right)^n$$

dır. Eşitliğin geçerli olması için ise gerek ve yeter şart G grafının düzgün grafa izomorf olmasıdır (Reti ve Gutman, 2012).

Teorem 3.2.11. Bağlantılı bir G grafi için kenar sayısı m olmak üzere ikinci çarpımsal Zagreb indeksinin birinci Zagreb indeksine bağlı bir üst sınırı

$$\pi_2(G) \leq \left(\frac{M_1(G)}{2m} \right)^{2m}$$

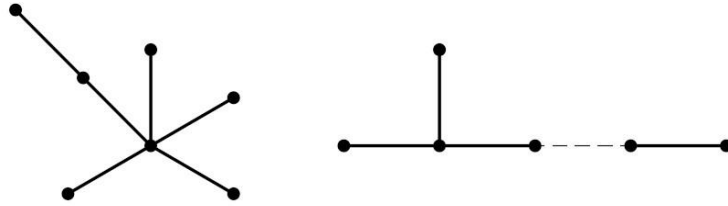
dır. Eşitliğin geçerli olması için gerek ve yeter şart G grafinin $\frac{2m}{n}$ –düzgün grafa izomorf olmasıdır (Liu ve Zhang, 2012).

Teorem 3.2.12. Bağlantılı bir G grafi için kenar sayısı m olmak üzere ikinci çarpımsal Zagreb indeksinin ikinci Zagreb indeksine bağlı bir üst sınırı

$$\pi_2(G) \leq \left(\frac{M_2(G)}{m} \right)^m$$

dır. Eşitliğin geçerli olması için gerek ve yeter şart G grafinin düzgün grafa izomorf olmasıdır (Reti ve Gutman, 2012).

Şimdi çarpımsal Zagreb indekslerinin ağaç graflar içinde uç graflarına yer verilecektir. Burada S_n^* grafi S_{n-1} yıldız grafinin herhangi bir uç köşesine yeni bir köşe ve kenarı eklenmesiyle oluşan bir graftır. P_n^* grafi ise 3 tane uç köşeye sahip olan bir ağaç grafi temsil etmektedir. S_n^* ve P_n^* graflarının birer örneği aşağıda verilmiştir.



Şekil 3.2.1. S_n^* ve P_n^* grafları

Teorem 3.2.13. Köşe sayısı $n \geq 5$ olan T_n ağaç grafi, yol ve yıldız graftan farklı olmak üzere;

$$\pi_1(S_n) < \pi_1(T_n) < \pi_1(P_n)$$

ve

$$\pi_2(S_n) < \pi_2(T_n) < \pi_2(P_n)$$

dir. Köşe sayısı $n \geq 6$ ise

$$\pi_1(S_n^*) < \pi_1(T_n) < \pi_1(P_n^*)$$

$$\pi_2(S_n^*) < \pi_2(T_n) < \pi_2(P_n^*)$$

dir. Diğer bir ifade ile $n \geq 5$ ise

$$(n-1)^2 < \pi_1(T_n) < 2(n-2)$$

$$(n-1)^{(n-1)} < \pi_2(T_n) < 2^{2(n-2)}$$

$n \geq 6$ ise

$$[2(n-2)]^2 < \pi_1(T_n) < 9 \cdot 2^{2(n-4)}$$

$$2^2(n-2)^{(n-2)} < \pi_2(T_n) < 3^3 \cdot 2^{(n-3)}$$

dir (Gutman, 2011).

Çarpımsal toplam Zagreb indeksinin uç grafları ile sınırları elde edilmiştir. Ayrıca ağaç graflar arasında köşe sayısına bağlı değeri ile ağaç graf sınıflarında en büyük grafi bulunmuştur.

Sonuç 3.2.2. Basit ve bağlantılı bir G grafının n köşesi ve m kenarı olsun. Buna göre

$$3^{2n-2m} 4^{3m-2n} \leq \pi_1^*(G) \leq (2n-2)^m$$

dir. Ayrıca eşitsizliğin sol tarafı $G \cong P_n$ iken ve sağ tarafı $G \cong K_n$ iken eşitlik sağlanır (Eliasi vd., 2012).

Ayrıca ağaç graflar içinde en büyük grafi elde edilmiştir. Fakat daha sonra daha kısa ve farklı yoldan da en büyük ve en küçük grafları elde edilmiştir. Bahsedilen daha kısa ve farklı olan yol graf dönüşümleri yardımı ile olmuştur (Xu ve Das, 2012).

Çarpımsal Zagreb eşindeksleri ile de çalışmalar oldukça kullanışlı ve fazladır. Benzer şekillerde sınırları, en büyük ya da en küçük grafları ya da diğer bazı topolojik

indeksler ile olan karşılaştırılmaları mevcuttur. İkinci çarpımsal Zagreb eşindeksinin de tanımından farklı bir ifadesi elde edilmiştir.

Lemma 3.2.2. Bağlantılı bir G grafi n köşeye sahip olsun. O halde

$$\overline{\pi_2(G)} = \prod_{v \in V(G)} \text{deg}_G(v)^{n-1-\text{deg}_G(v)}$$

dir (Xu vd., 2013).

Teorem 3.2.14. Bağlantılı ve n köşeli bir G grafi için

$$\pi_2(G) \cdot \overline{\pi_2(G)} = \pi_1(G)^{n-1/2}$$

dir (Xu vd., 2013)

Teorem 3.2.15. Bağlantılı bir G grafinin köşe sayısı n ve en büyük derecesi Δ olmak üzere

$$\overline{\pi_2(G)} \geq \pi_1(G)^{\frac{n-1-\Delta}{2}}$$

dir (Falahati Nezhad vd., 2014).

Eşindeksler grafin tamamlayıcısının indeksi gibi görünse de tam olarak öyle değildir. Fakat yine de aralarında bağıntılar vardır.

Önerme 3.2.1. Bağlantılı ve n köşe ve m kenara sahip bir G grafi için

$$M_1(\bar{G}) = M_1(G) + 2(n-1)(\bar{m} - m)$$

dir (Ashrafi vd., 2010).

Önerme 3.2.2. Bir G grafinin köşe ve kenar sayısı n ve m olmak üzere

$$\overline{M_1(G)} = 2m(n-1) - M_1(G)$$

dir (Ashrafi vd., 2010).

Bir grafin kendisi ile tamamlayıcısının birinci Zagreb eşindekslerinin birbirine eşit olduğu elde edilmiştir.

Sonuç 3.2.3. Bir G grafi n köşe ve m kenar sayısına sahip olsun. \bar{G} grafi G grafının tamamlayıcı grafi olmak üzere G ve \bar{G} graflarının birinci Zagreb eşindeksleri birbirine eşittir (Gutman vd., 2015).

$$\overline{M}_1(\bar{G}) = \overline{M}_1(G)$$

Ayrıca, Önerme 3.2.2.'den

$$\overline{M}_1(\bar{G}) = \overline{M}_1(G) = 2m(n-1) - M_1(G)$$

dir.

Önerme 3.2.3. Bir grafın ikinci Zagreb eşindeksinin o grafın tümleyeninin ikinci Zagreb eşindeksi arasında aşağıdaki gibi bir bağlantı vardır (Ashrafi vd., 2010).

$$\overline{M}_2(G) = M_2(\bar{G}) - (n-1)M_1(\bar{G}) + \bar{m}(n-1)^2$$

4. ÜSTEL ZAGREB İNDEKSLERİ

Bu bölümde, öncelikle üstel Zagreb indekslerinin tanımları verilecektir. Daha sonra üstel Zagreb indekslerinin karşılaştırmaları ve sınırları elde edilecektir. Ayrıca, üstel Zagreb indekslerinin bazı moleküler graf sınıflarında karşılaştırmaları da elde edilecektir. Son olarak üstel Zagreb indekslerinin genel graflarda graf operatörleri üzerinde sonuçları verilecektir.

Tanım 4.1. Bağlantılı bir G grafı için

i. Birinci üstel Zagreb indeksi

$$EM_1(G) = \sum_{v \in V(G)} e^{d(v)^2}$$

ii. İkinci üstel Zagreb indeksi

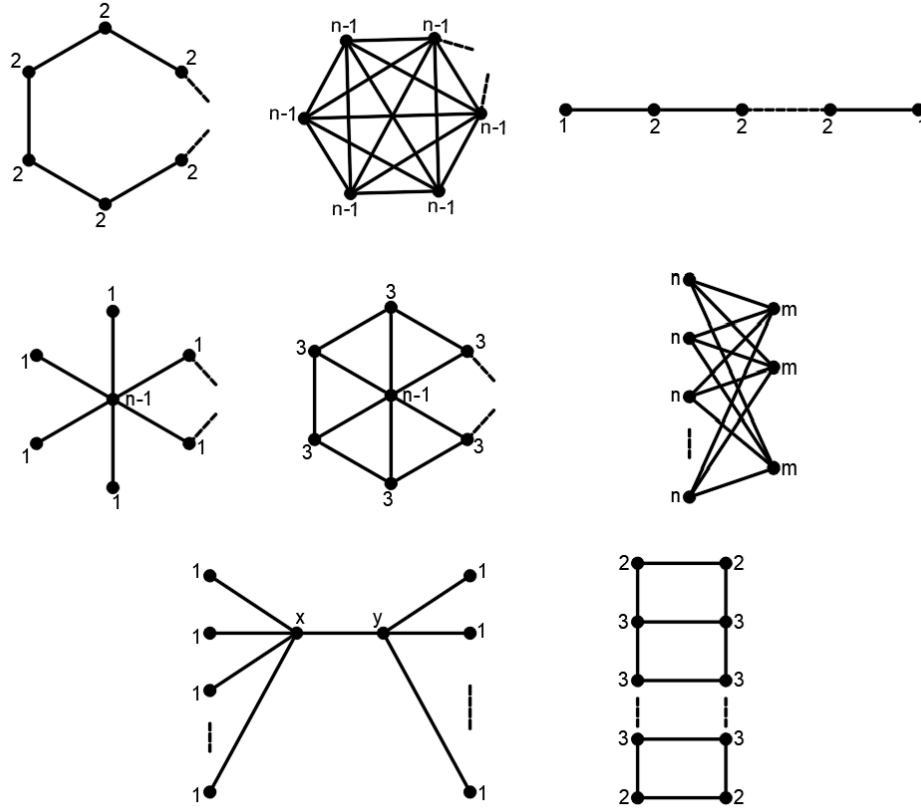
$$EM_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} e^{d(u)d(v)}$$

iii. Birinci üstel Zagreb indeksinin toplam biçimi

$$EM_1^*(G) = \sum_{uv \in E(G)} e^{d(u)+d(v)}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

Aşağıda bahsedilen özel graflar; n mertebeli çevrim graf C_n , tam graf K_n , yol graf P_n , yıldız graf S_n ve tekerlek graf W_n , $m + n$ mertebeli iki parçalı tam graf $K_{m,n}$, $x + y + 2$ mertebeli çift yıldız graf $S_{x,y}$ ve $2n$ mertebeli ladder graf L_n sırası ile aşağıdaki şekilde köşelerinin dereceleri ile birlikte verilmiştir.



Şekil 4.1. Özel graflar

Teorem 4.1. Bazı özel grafların birinci üstel Zagreb indeks değerleri

$$EM_1(G) = \begin{cases} ne^4 & G = C_n & n \geq 3 \\ ne^{(n-1)^2} & G = K_n & n \geq 3 \\ 2e + (n-2)e^4 & G = P_n & n \geq 2 \\ (n-1)e + e^{(n-1)^2} & G = S_n & n \geq 2 \\ (n-1)e^9 + e^{(n-1)^2} & G = W_n & n \geq 4 \\ me^{n^2} + ne^{m^2} & G = K_{m,n} & m, n \geq 1 \\ (x+y)e + e^{(x+1)^2} + e^{(y+1)^2} & G = S_{x,y} & x, y \geq 1 \\ 4e^4 + 2(n-2)e^9 & G = L_n & n \geq 2 \end{cases}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. n mertebeli C_n çevrim grafinin boyutu n ve tüm köşelerinin dereceleri 2 olduğundan $EM_1(C_n) = ne^4$ elde edilir. Temel grafların derece dizileri ve tanımları göz önüne alındığında diğer graf çeşitlerinin de birinci üstel Zagreb indeks değerleri benzer şekilde elde edilir. ■

Aşağıda özel graflar için verilen teoremler, yukarıdaki teoremin ispatında olduğu gibi elde edilir.

Teorem 4.2. Bazı özel grafların ikinci üstel Zagreb indeks değerleri

$$EM_2(G) = \begin{cases} ne^4 & G = C_n & n \geq 3 \\ \frac{1}{2}(n-1)ne^{(n-1)^2} & G = K_n & n \geq 3 \\ 2e^2 + (n-3)e^4 & G = P_n & n \geq 2 \\ (n-1)e^{(n-1)} & G = S_n & n \geq 2 \\ (n-1)e^9 + (n-1)e^{3(n-1)} & G = W_n & n \geq 4 \\ mne^{mn} & G = K_{m,n} & m, n \geq 1 \\ xe^{x+1} + ye^{y+1} + e^{(x+1)(y+1)} & G = S_{x,y} & x, y \geq 1 \\ 2e^4 + 4e^6 + (3n-8)e^9 & G = L_n & n \geq 3 \end{cases}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

Teorem 4.3. Bazı özel grafların birinci üstel Zagreb indeksinin toplam biçiminin değerleri

$$EM_1^*(G) = \begin{cases} ne^4 & G = C_n & n \geq 3 \\ \frac{1}{2}(n-1)ne^{2(n-1)} & G = K_n & n \geq 3 \\ 2e^3 + (n-3)e^4 & G = P_n & n \geq 2 \\ (n-1)e^n & G = S_n & n \geq 2 \\ (n-1)e^6 + (n-1)e^{(n+2)} & G = W_n & n \geq 4 \\ mne^{m+n} & G = K_{m,n} & m, n \geq 1 \\ xe^{x+2} + ye^{y+2} + e^{x+y+2} & G = S_{x,y} & x, y \geq 1 \\ 2e^4 + 4e^5 + (3n-8)e^6 & G = L_n & n \geq 3 \end{cases}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

Organik kimyada topolojik indeksler zaman tasarrufu ve ilgili alanın gelişimine katkı sağlamaktadır. Özel olarak çarpımsal Zagreb indeksleri de hidrokarbonların oluşum entalpisini tahmin etmekte önemli bir yere sahiptir. Şimdi çarpımsal Zagreb indekslerinin üstel biçimlerini tanımlayalım.

Tanım 4.2. Bir G grafi için birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri sırası ile;

$$E\pi_1(G) = \prod_{v \in V(G)} e^{d(v)^2}$$

$$E\pi_2(G) = \prod_{uv \in E(G)} e^{d(u)d(v)}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

Benzer şekilde birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indekslerinin özel graflar için değerleri aşağıdaki teorem ile ispatsız verilecektir.

Teorem 4.4. Bazı özel grafların birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeks değerleri sırasıyla

$$E\pi_1(G) = \begin{cases} e^{4n} & G = C_n & n \geq 3 \\ e^{n(n-1)^2} & G = K_n & n \geq 3 \\ e^{4n-6} & G = P_n & n \geq 2 \\ e^{n(n-1)} & G = S_n & n \geq 2 \\ e^{(n-1)(n+8)} & G = W_n & n \geq 4 \\ e^{mn(m+n)} & G = K_{m,n} & m, n \geq 1 \\ e^{x^2+y^2+3(x+y)+2} & G = S_{x,y} & x, y \geq 1 \\ e^{2(9n-10)} & G = L_n & n \geq 2 \end{cases}$$

ve

$$E\pi_2(G) = \begin{cases} e^{4n} & G = C_n & n \geq 3 \\ e^{\frac{1}{2}n(n-1)^3} & G = K_n & n \geq 3 \\ e^{4n-8} & G = P_n & n \geq 2 \\ e^{(n-1)^2} & G = S_n & n \geq 2 \\ e^{3(n-1)(n+2)} & G = W_n & n \geq 4 \\ e^{(mn)^2} & G = K_{m,n} & m, n \geq 1 \\ e^{(x+y)(x+y+2)-xy+1} & G = S_{x,y} & x, y \geq 1 \\ e^{27n-40} & G = L_n & n \geq 3 \end{cases}$$

dır (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Teorem 4.1.'in ispatında olduğu gibi benzer şekilde elde edilir. ■

Topolojik eşindeksler ile ilgili yapılan çalışmalar gösteriyor ki topolojik eşindeksler de en az topolojik indeksler kadar etkindir. Topolojik eşindeksler ilaçların özelliklerini tahmin edebilmektedir. Bu nedenle topolojik eşindeksler QSPR için antiviral tedavide yararlı bir araç olabilir (Kirmani vd., 2022).

Topolojik eşindeksler bir grafın tamamlayıcısının indeksi gibi gözükse de kısmen farklı bir topolojik indekstir. Eşindeksler grafın komşu olmayan köşeleri arasında ele alınır. Fakat köşe dereceleri grafın kendisindeki derecelerdir. Bu noktada grafın tamamlayıcısının topolojik indeksinden farkı oluşmaktadır.

Bağlantılı ve basit bir G grafının köşe kümesi $V(G)$ ve kenar kümesi köşe kümesinden alınan köşe çiftlerinden oluşan $E(G)$ ile gösterilir. Bu grafın tamamlayıcı grafı \bar{G} ise aynı şekilde $V(G)$ köşe kümesine sahip fakat kenar kümesi G grafında komşu olmayan köşelerin oluşturduğu $E(\bar{G})$ kümesidir.

Üstel Zagreb indekslerinin eşindeksleri, üstel Zagreb indeksler tanımlarının komşu olmayan köşeleri arasında olacak şekildedir.

Tanım 4.3. Bir G grafının üstel Zagreb eşindeksleri;

- i. Birinci üstel Zagreb eşindeksi

$$\overline{EM}_1(G) = \sum_{uv \notin E(G)} e^{deg_G(u) + deg_G(v)}$$

- ii. İkinci üstel Zagreb eşindeksi

$$\overline{EM}_2(G) = \sum_{uv \notin E(G)} e^{deg_G(u) deg_G(v)}$$

- iii. Birinci üstel çarpımsal Zagreb eşindeksi

$$\overline{E\pi}_1(G) = \prod_{uv \notin E(G)} e^{deg_G(u) + deg_G(v)}$$

iv. İkinci üstel çarpımsal Zagreb eşindeksi

$$\overline{E\pi_2}(G) = \prod_{uv \in E(G)} e^{\deg_G(u)\deg_G(v)}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

Örnek 2.2.'de bahsedilen Şekil 2.3.'de verilen graf ve tamamlayıcı grafi için ikinci üstel Zagreb indeks ve eşindeks değerleri;

$$EM_2(G) = e^4(1 + 2e^2 + e^9)$$

$$\overline{EM_2}(G) = 2e^4(1 + e^2)$$

$$EM_2(\bar{G}) = 2e^2(1 + e^2)$$

$$\overline{EM_2}(\bar{G}) = e(1 + 4e + e^3)$$

dir ve her birinin farklı değerlerde oldukları görülür.

Teorem 4.5. Bazı özel grafların üstel Zagreb eşindekslerinin değerleri

$$\overline{EM_1}(G) = \begin{cases} \frac{(n-3)n}{2}e^4 & G = C_n \quad n \geq 3 \\ 0 & G = K_n \quad n \geq 3 \\ e^2 + 2(n-3)e^3 + \frac{(n-4)(n-3)}{2}e^4 & G = P_n \quad n \geq 2 \\ \frac{(n-2)(n-1)}{2}e^2 & G = S_n \quad n \geq 2 \\ \frac{(n-4)(n-1)}{2}e^6 & G = W_n \quad n \geq 4 \\ \frac{(m-1)m}{2}e^{2n} + \frac{(n-1)n}{2}e^{2m} & G = K_{m,n} \quad m, n \geq 1 \end{cases}$$

$$\overline{EM}_2(G) = \begin{cases} \frac{(n-3)n}{2} e^4 & G = C_n \quad n \geq 3 \\ 0 & G = K_n \quad n \geq 3 \\ e + 2(n-3)e^3 + \frac{(n-4)(n-3)}{2} e^4 & G = P_n \quad n \geq 2 \\ \frac{(n-2)(n-1)}{2} e & G = S_n \quad n \geq 2 \\ \frac{(n-4)(n-1)}{2} e^9 & G = W_n \quad n \geq 4 \\ \frac{(m-1)m}{2} e^{n^2} + \frac{(n-1)n}{2} e^{m^2} & G = K_{m,n} \quad m, n \geq 1 \end{cases}$$

ve

$$\overline{E\pi}_1(G) = \begin{cases} e^{2(n-3)n} & G = C_n \quad n \geq 3 \\ 0 & G = K_n \quad n \geq 3 \\ e^{6n+2(n-4)(n-3)-16} & G = P_n \quad n \geq 2 \\ e^{(n-2)(n-1)} & G = S_n \quad n \geq 2 \\ e^{3(n-4)(n-1)} & G = W_n \quad n \geq 4 \\ e^{(m+n-2)mn} & G = K_{m,n} \quad m, n \geq 1 \end{cases}$$

$$\overline{E\pi}_2(G) = \begin{cases} e^{2(n-3)n} & G = C_n \quad n \geq 3 \\ 0 & G = K_n \quad n \geq 3 \\ e^{4n+2(n-4)(n-3)-11} & G = P_n \quad n \geq 2 \\ e^{\frac{(n-2)(n-1)}{2}} & G = S_n \quad n \geq 2 \\ e^{\frac{9}{2}(n-4)(n-1)} & G = W_n \quad n \geq 4 \\ e^{\frac{mn}{2}[(m-1)n+(n-1)m]} & G = K_{m,n} \quad m, n \geq 1 \end{cases}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Teorem 4.1.'in ispatında olduğu gibi benzer şekilde elde edilir. ■

4.1. Üstel Zagreb İndeksleri ile İlgili Genel Sonuçlar

Bu kısımda, üstel Zagreb indekslerinin diğer topolojik indeksler ve kendi aralarında karşılaştırmaları yapılacaktır. Ayrıca üstel Zagreb indekslerinin sınırları da elde edilecektir. Daha sonra üstel Zagreb indekslerinin genel ve bazı devir graflar için sınırları elde edilecektir.

Öncelikle teoremlerin ispatlarında kullanacağımız aşağıdaki lemmaları verelim.

Lemma 4.1.1. Üstel Zagreb indekslerin her birinin Zagreb indekslerden büyük olduğu her $i > 0$ için $e^i > i$ olduğundan açıktır. Diğer bir ifade ile $i = 1, 2$ olmak üzere

$$M_i(G) \leq EM_i(G)$$

$$\pi_i(G) \leq E\pi_i(G)$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

Lemma 4.1.2. (Aritmetik-Geometrik Ortalama Eşitsizliği) x_1, x_2, \dots, x_n negatif olmayan n tane reel sayı olmak üzere

$$\frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} \geq \sqrt[n]{x_1 x_2 \dots x_n}$$

dir. Burada eşitlik durumu $x_1 = x_2 = \dots = x_n$ olması halinde gerçekleşir.

Lemma 4.1.3. (Cauchy-Schwarz Eşitsizliği) $i = 1, 2, \dots, n$ olmak üzere x_i ve y_i reel sayıları için

$$|x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n| \leq \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} \cdot \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_n^2}$$

dir. Burada eşitlik

$$\frac{x_1}{y_1} = \frac{x_2}{y_2} = \dots = \frac{x_n}{y_n}$$

olması durumunda geçerli olur.

Yukarıda verilen ön bilgilerden sonra ilk sınırını belirleyeceğimiz üstel Zagreb indeksi birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi olacaktır. Birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksinin alt sınırı grafin mertebeye ve boyutuna bağlıdır.

Teorem 4.1.1. Bir G grafi n köşe ve m kenar sayısına sahip olmak üzere

$$E\pi_1(G) \geq e^{\frac{4m^2}{n}}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi tanımı ile Cauchy-Schwarz eşitsizliğinden

$$\begin{aligned} E\pi_1(G) &= \prod_{v \in V(G)} e^{d(v)^2} = e^{d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_n^2} = e^{\frac{1}{n}(d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_n^2)(1^2 + 1^2 + \dots + 1^2)} \\ &\geq e^{\frac{1}{n}(d_1 + d_2 + \dots + d_n)^2} = e^{\frac{1}{n}(2m)^2} = e^{\frac{4m^2}{n}} \end{aligned}$$

elde edilir. ■

Bazı özel graflar için birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksinin alt sınırları aşağıdaki tablodaki gib gösterilebilir.

G	$m(G)$	$n(G)$	$e^{\frac{4m^2}{n}}$	$E\pi_1(G)$
P_5	4	5	$e^{12,8}$	e^{14}
C_3	3	3	e^{12}	e^{12}
S_4	3	4	e^9	e^{12}
$T_{4,1}$	5	5	e^{20}	e^{22}

Tablo 4.1.1. Bazı grafların boyut ve mertebesi ile birinci çarpımsal üstel Zagreb indekslerin alt sınırları

İkinci üstel çarpımsal Zagreb indeksinin de birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksine benzer şekilde grafin mertebe ve boyut sayısına bağlı olan bir alt sınırı vardır.

Teorem 4.1.2. Herhangi bir G grafi için köşe sayısı n ve kenar sayısı m olmak üzere;

$$E\pi_2(G) \geq e^{\left(\frac{2m}{n}\right)^{2m}}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Öncelikle ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi tanımını göz önüne alırsak;

$$E\pi_2(G) = e^{\sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)}$$

şekindedir. Ardından Aritmetik-Geometrik Ortalama Eşitsizliğini ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksinin yeni eşitliğine uygularsak;

$$E\pi_2(G) = e^{\sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)} = e^{m \cdot \frac{\sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)}{m}} \geq e^{m \cdot \sqrt{\prod_{uv \in E(G)} d(u)d(v)}}$$

elde edilir. Daha sonra ikinci çarpımsal Zagreb indeksinin tanımından farklı bir ifadesi olan Teorem 3.2.9. ve ikinci Zagreb indeksinin ikinci çarpımsal Zagreb indeksi ile aralarındaki eşitsizlik olan Teorem 3.2.12. uygulanırsa;

$$\begin{aligned} E\pi_2(G) &= e^{\sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)} = e^{m \cdot \frac{\sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)}{m}} \geq e^{m \cdot \sqrt{\prod_{uv \in E(G)} d(u)d(v)}} \\ &= e^{m \cdot \sqrt{\prod_{v \in V(G)} d(v)^{d(v)}}} \end{aligned}$$

elde edilir. Aritmetik-Geometrik Ortalama Eşitsizliğine *doğal logaritma* uygulanırsa;

$$\begin{aligned} e^{m \cdot \ln\left(\frac{\sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)}{m}\right)} &\geq e^{m \cdot \ln \sqrt{\prod_{v \in V(G)} d(v)^{d(v)}}} = e^{m \cdot \frac{1}{m} \sum_{i=1}^n d_i \cdot \ln d_i} \geq e^{\sum_{i=1}^n d_i \cdot \ln \frac{d_i}{n}} \\ &= e^{\sum_{i=1}^n d_i \cdot \ln \frac{2m}{n}} = e^{2m \cdot \ln \frac{2m}{n}} = \left(\frac{2m}{n}\right)^{2m} \end{aligned}$$

şeklinde eşitsizlik elde edilir. Burada d_i her $v_i \in V(G)$ için $d_i = d(v_i)$ olarak köşe derecesini ifade etmektedir ($1 \leq i \leq n$).

Yukarıdaki son iki eşitsizlik birlikte düşünüldüğünde;

$$\left(\sum_{uv \in E(G)} \frac{d(u)d(v)}{m} \right)^m \geq \left(\frac{2m}{n}\right)^{2m}$$

ve

$$e^{\frac{1}{m} \sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)} \geq e^{\left(\frac{2m}{n}\right)^2}$$

olur. Dolayısıyla,

$$e^{\sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)} = E\pi_2(G) \geq e^{\left(\frac{2m}{n}\right)^{2m}}$$

eşitsizliği elde edilir. ■

Teorem 4.1.3. Herhangi bir G grafinin n köşe sayısı ve Δ en büyük derecesi olmak üzere;

$$(E\pi_2(G))^2 \leq (E\pi_1(G))^\Delta$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indekslerinin birinci ve ikinci Zagreb indeksine bağlı olarak ifadesi

$$E\pi_1(G) = e^{M_1(G)}$$

ve

$$E\pi_2(G) = e^{M_2(G)}$$

dir. Daha sonra $j \leq i$ olacak şekilde $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ sayıları için d_i , her $v_i \in V(G)$ köşesinin $d_i = d(v_i)$ olacak şekilde köşe derecesini ifade etsin. O halde

$$d_i^2 + d_j^2 \leq d_i \cdot d_i^2$$

olur. Dolayısıyla,

$$\begin{aligned} (E\pi_2(G))^2 &= e^{2M_2(G)} = e^{2\sum d_i d_j} = e^{\sum 2d_i d_j} \leq e^{\sum (d_i^2 + d_j^2)} \leq e^{\sum d_i \cdot d_i^2} \leq e^{\sum \Delta \cdot d_i^2} \\ &= e^{\Delta \sum d_i^2} = e^{\Delta \cdot M_1(G)} = (E\pi_1(G))^\Delta \end{aligned}$$

elde edilir. ■

Yukarıdaki teoremin uygulaması bazı graflar için aşağıdaki tabloda görülebilir.

G	$\Delta(G)$	$E\pi_1(G)$	$E\pi_2(G)$	$(E\pi_1(G))^\Delta$	$(E\pi_2(G))^2$
P_n	2	e^{4n-6}	e^{4n-8}	e^{8n-12}	e^{8n-16}
C_n	2	e^{4n}	e^{4n}	e^{8n}	e^{8n}
S_n	n-1	$e^{n(n-1)}$	$e^{(n-1)^2}$	$e^{n(n-1)^2}$	$e^{2(n-1)^2}$
W_n	n-1	$e^{(n-1)(n+8)}$	$e^{3(n-1)(n+2)}$	$e^{(n-1)^2(n+8)}$	$e^{6(n-1)(n+2)}$

Tablo 4.1.2. Bazı grafların birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indekslerinin karşılaştırması

Tanımlanan yeni üstel Zagreb indekslerinden ikinci üstel Zagreb indeks ile ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi arasında da bir ilişki bulunmaktadır.

Teorem 4.1.4. Herhangi bir G grafinin kenar sayısı m olmak üzere,

$$\frac{EM_2(G)}{m} \geq \sqrt[m]{E\pi_2(G)}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. $d_i = \text{deg}(v_i)$ şeklinde grafın köşe kümesindeki herhangi bir v_i köşesinin derecesini ve $i \sim j$ ise grafın iki köşesi v_i ile v_j köşeleri arasındaki komşuluğu $v_i v_j \in E(G)$ olmak üzere grafın ikinci üstel Zagreb indeksi tanımı ve Aritmetik-Geometrik Ortalama Eşitsizliğinden

$$\frac{EM_2(G)}{m} = \frac{\sum_{i \sim j} e^{d_i d_j}}{m} \geq \sqrt[m]{\prod_{i \sim j} e^{d_i d_j}} = \sqrt[m]{E\pi_2(G)}$$

elde edilir. ■

Teorem 4.1.5. Bağlantılı bir G grafı için n grafın köşe sayısı olmak üzere birinci toplamsal üstel Zagreb indeksi grafın köşe sayısına bağlı olan aşağıdaki eşitsizlik geçerlidir.

$$2e^3 + (n-3)e^4 \leq EM_1^*(G) \leq \frac{(n-1)n}{2} e^{2(n-1)}$$

Ayrıca eşitsizliğin sol tarafı G grafının n . mertebeden yol grafa P_n ; sağ tarafının ise G grafının n . mertebeden tam grafa K_n izomorf olması durumunda eşitlikler sağlanır (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Grafın herhangi bir köşesi $v \in V(G)$ için derecesi d_v olsun. Birinci toplamsal üstel Zagreb indeksinde grafın komşu köşelerin dereceleri ile ilgilenildiğinden K_n tam grafında tüm köşeleri birbirine komşu olduğundan, komşu köşeler arasında en büyük derecelere sahip olan graf K_n tam grafıdır. Teorem 4.3.'den K_n tam grafının birinci toplamsal üstel Zagreb indeksi

$$EM_1^*(K_n) = \frac{1}{2}(n-1)ne^{2(n-1)}$$

dir. Dolayısıyla birinci toplamsal üstel Zagreb indeksinin üst sınırı elde edilir.

Ayrıca birinci toplamsal Zagreb indeksinin alt sınırı C_n çevrim ya da P_n yol grafında olduğu biliniyor (Eliasi vd., 2012). Birinci toplamsal üstel Zagreb indeksinin yapısına dikkat çekersek birinci toplamsal Zagreb indeksinde olduğu gibi alt sınırının C_n çevrim ya da P_n yol grafında olduğu görülür. Bunun yanısıra;

$$EM_1^*(P_n) = 2e^3 + (n-3)e^4 < ne^4 = EM_1^*(C_n)$$

olduğundan birinci toplamsal üstel Zagreb indeksinin alt sınırının P_n yol grafında olduğu elde edilir. ■

Üstel topolojik indekslerden birinci ve ikinci üstel Zagreb indeksleri için uç ağaç grafları çalışıldı (Rada, 2019; Cruz ve Rada, 2019). Fakat bu sonuç ikinci üstel Zagreb indeksi için en büyük ağaç grafi kapsamıyordu. Yakın zamanda ise bu boşluk Zeng ve Deng tarafından aşağıda verildiği gibi dolduruldu (Zeng ve Deng, 2020).

Lemma 4.1.4. T ağaç grafi $x + y = n - 2$ olacak şekilde n köşeli bir $S_{x,y}$ çift yıldız graf olsun. T ağacı $|x - y| \leq 1$ olmak üzere n köşeli çift yıldız graflar arasında e^{M_2} açısından en büyük ağaç graftır. T ağacı n köşeli dengeli çift yıldız graftır ve bu grafın e^{M_2} değeri

$$e^{M_2} \left(S_{\lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor, \lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor} \right) = \begin{cases} e^{\frac{n^2}{4}} + (n-2)e^{\frac{n}{2}} & n \text{ çift} \\ e^{\frac{n^2-1}{4}} + \frac{n-3}{2}e^{\frac{n-1}{2}} + \frac{n-1}{2}e^{\frac{n+1}{2}} & n \text{ tek} \end{cases}$$

dir (Zeng ve Deng, 2020).

İspat. Çift yıldız grafi $T = S_{x,y}$ için u ve v köşeleri uç olmayan iki köşesi olsun. Buna göre $d_T(u) = x + 1$ ve $d_T(v) = y + 1$ olsun. Genelliği bozmadan $x \leq y$ kabul edelim.

Eğer $|x - y| > 1$ ise $v_1 \in V(T)$ köşesi v köşesinin u köşesinden farklı olan bir komşusu olmak üzere $T' = T - vv_1 + uv_1$ ise $T' \cong S_{x+1,y+1}$ olur. Dolayısıyla

$$\begin{aligned} e^{M_2}(T') - e^{M_2}(T) &= [e^{(x+2)y} + (x+1)e^{x+2} + (y-1)e^y] \\ &\quad - [e^{(x+1)(y+1)} + xe^{x+1} + ye^{y+1}] \\ &= e^{(x+2)y} - e^{(x+1)(y+1)} - ye^{y+1} + (x+1)e^{x+2} - xe^{x+1} + (y-1)e^y \\ &> e^{xy+2y} - e^{xy+x+y-1} - ye^{y+1} = e^{xy+y}[e^y - e^{x+1}] - ye^{y+1} \\ &\geq e^{xy+y}[e^{x+2} - e^{x+1}] - ye^{y+1} = e^{xy+y+x+1}[e-1] - ye^{y+1} \\ &> e^{xy+y+x+1} - ye^{y+1} = e^{y+1}[e^{x(y+1)} - y] > 0 \end{aligned}$$

olur. O halde $e^{M_2}(T') > e^{M_2}(T)$ elde edilir ve T grafi n köşeli çift yıldız graflar arasında e^{M_2} indeksinin en büyük grafi olmaz. Dolayısıyla $|x - y| \leq 1$ için T grafi çift yıldız graflar arasında e^{M_2} indeksinin en büyük grafi olur. ■

Lemma 4.1.5. Birinci Zagreb indeksinin n köşeli ağaç graflar arasında en küçük değeri yol graf; en büyük değeri ise yıldız graf olması halinde gerçekleşir. Diğer bir ifade ile;

$$M_1(P_n) \leq M_1(T_n) \leq M_1(S_n)$$

şeklindedir (Gutman ve Das, 2004).

Biz de üstel Zagreb indekslerinin birinci Zagreb ve birinci çarpımsal Zagreb indeksleri için aşağıdaki teoremden basit ve ağaç graflar için uç grafları ve değerlerini vereceğiz.

Teorem 4.1.6. Bir ağaç grafin birinci üstel Zagreb indeksinin ve birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksinin uç ağaç grafları

$$EM_1(P_n) \leq EM_1(T_n) \leq EM_1(S_n)$$

ve

$$E\pi_1(P_n) \leq E\pi_1(T_n) \leq E\pi_1(S_n)$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Birinci üstel Zagreb indeks ile birinci üstel çarpımsal Zagreb indekslerinin tanımları yukarıdaki Lemma ile düşünüldüğünde istenilen sonuç elde edilir. ■

Teorem 4.1.7. Basit ve bağlantılı bir G grafinin en büyük birinci üstel Zagreb ve birinci üstel çarpımsal Zagreb indekslerinin değeri G grafinin tam graf olması halinde gerçekleşir. Diğer bir ifade ile;

$$EM_1(G) \leq EM_1(K_n)$$

ve

$$E\pi_1(G) \leq E\pi_1(K_n)$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Herhangi basit ve bağlantılı, n . mertebeden bir grafin en büyük derecesi $n-1$ olur. Dolayısıyla üstel Zagreb indeksleri tanımlarından bir tam grafin en büyük değerinin ve en büyük grafinin kendisinde olacağı görülür. ■

Das ve Gutman ikinci Zagreb indeksinin deęerini grafin kenarlarını silerek azaltacaklarını alıřmalarında elde etmiřlerdir (Das ve Gutman, 2004). Dolayısıyla bir grafin en buyk ve en kuk ikinci Zagreb indeksine sahip olması grafin en fazla ve en az kenar sayısına sahip olması demektir. Bu sebeple bir grafin u grafları ikinci Zagreb indeksi iin ařaęıda verilmiřtir.

Lemma 4.1.6. Basit, baęlantılı ve n . mertebeden bir G grafi

$$M_2(\overline{K_n}) \leq M_1(G) \leq M_2(K_n)$$

řeklinde u graflara sahiptir (Das ve Gutman, 2004).

Teorem 4.1.7. Basit ve baęlantılı herhangi bir G grafi iin ikinci stel Zagreb ve ikinci stel arpımsal Zagreb indeksinin en buyk grafları

$$EM_2(G) \leq EM_2(K_n)$$

ve

$$E\pi_2(G) \leq E\pi_2(K_n)$$

dir (Akgneř ve Aydın, 2021).

Ayrıca ikinci Zagreb indeksinin aęa graflar arasında u grafları ařaęıdaki gibi verilmiřtir.

Lemma 4.1.7. İkinci Zagreb indeksinin n křeli aęa graflar arasında en kuk deęeri yol graf; en buyk deęeri ise yıldız graf olması halinde gerekleřir. Dięer bir ifade ile;

$$M_2(P_n) \leq M_2(T_n) \leq M_2(S_n)$$

dir (Das ve Gutman, 2004).

İkinci stel Zagreb ve ikinci arpımsal stel Zagreb indekslerinin aęa graflar arasında u grafları Lemma 4.1.7.'den ařaęıdaki gibi grlebilir.

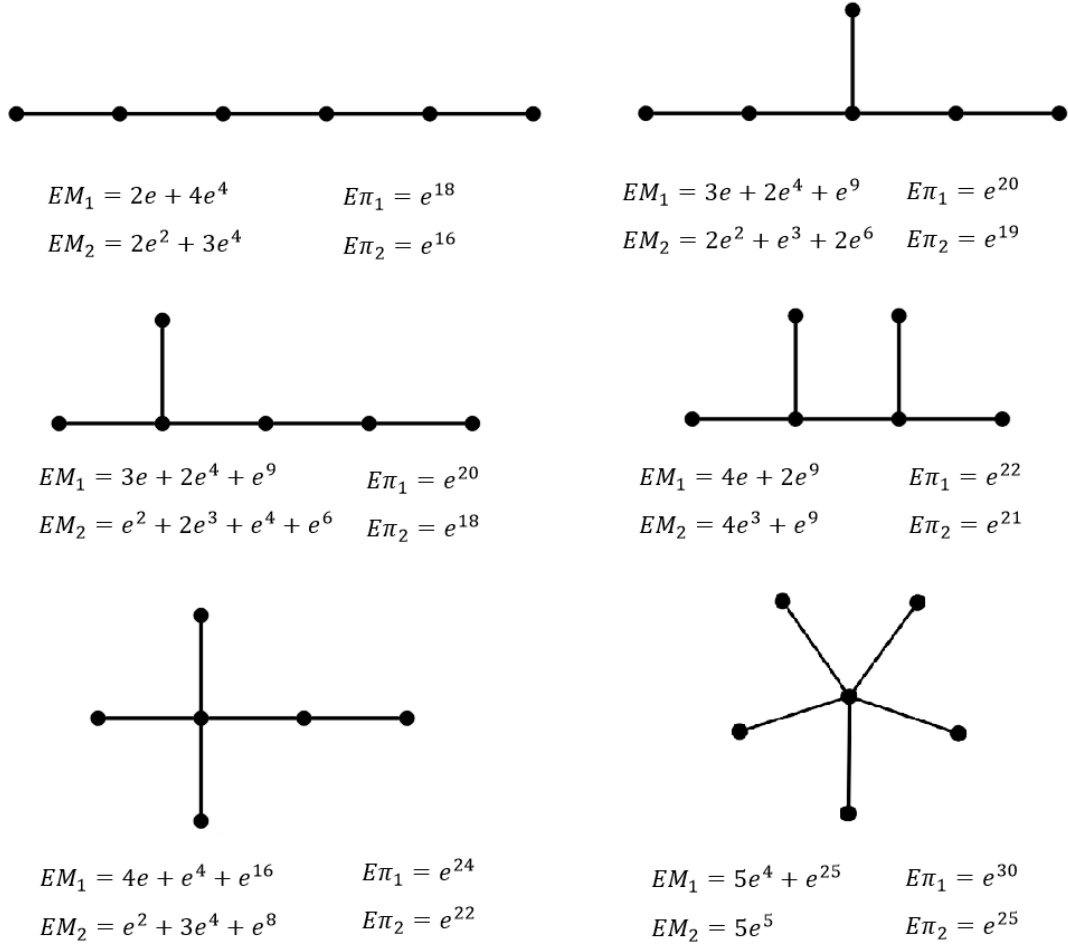
Teorem 4.1.8. Bir aęa grafin ikinci stel Zagreb indeksinin ve ikinci arpımsal stel Zagreb indeksinin u aęa grafları

$$EM_2(P_n) \leq EM_2(T_n) \leq EM_2(S_n)$$

ve

$$E\pi_2(P_n) \leq E\pi_2(T_n) \leq E\pi_2(S_n)$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).



Şekil 4.1.1. 6-köşeli ağaç graflar ile üstel Zagreb indeks değerleri

4.2. Devir İçermeyen ve Tek Devir İçeren Graflar Üzerinde Sonuçlar

Topolojik indekslerin sıklıkla devir içeren ya da içermeyen gibi moleküler graflar üzerinde sıkça kullanılmaktadır. Moleküler graf çeşitlerinin de çeşitli topolojik indekslerde sınırları, karşılaştırmaları ve uç grafları elde edilmiştir (Cruz ve Rada, 2019; Zeng ve Deng, 2020; Cruz vd., 2021). Moleküler graflardan ağaçlar, tek devirli (unicyclic) ve çift devirli (bicyclic) graflar için çarpımsal Zagreb indekslerinin uç grafları da çalışıldı (Xu ve Hua; Xu ve Das, 2012). İkinci Zagreb indeksinin de tek devirli graflar üzerinde en küçük grafının çevrim, en büyük grafının ise özel bir tek devirli graf sınıfında olduğu belirlenerek, tek devirli graflar için net sınırlar elde edildi (Yan vd., 2007).

Biz de bu alt bölümde devir içermeyen ve tek devir içeren grafların bazı sınıflarının üstel Zagreb indekslerinin karşılaştırmalarını elde edeceğiz.

Teorem 4.2.1. Bağlantılı ve n mertebeli U_n ve $T(n, n_1, k)$ ağaç grafları için aşağıda verilen ifadeler geçerlidir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

- i. $EM_1(U_n) = EM_1(T(n, n_1, k))$
- ii. $EM_2(U_n) < EM_2(T(n, n_1, k))$
- iii. $EM_1^*(U_n) < EM_1^*(T(n, n_1, k))$
- iv. $E\pi_1(U_n) = E\pi_1(T(n, n_1, k))$
- v. $E\pi_2(U_n) < E\pi_2(T(n, n_1, k))$

İspat. U_n ve $T(n, n_1, k)$ tanımında verilen acyclic graf sınıfları olsun. Buna göre;

- i. n_i sayısı, i dereceli köşelerin sayısı olmak üzere U_n ve $T(n, n_1, k)$ graflarında tüm n_i 'lerin sayısı birbirine eşit olduğu ve birinci üstel Zagreb indeksi tanımından istenen eşitlik görülür.
- ii. Ayrıca ikinci eşitsizliğin gerçekliği için U_n ve $T(n, n_1, k)$ graflarına ikinci üstel Zagreb indeksi tanımı uygulanırsa

$$EM_2(U_n) = 2e^2 + e^3 + (n - 6)e^4 + 2e^6$$

ve

$$EM_2(T(n, n_1, k)) = 3e^2 + (n - 8)e^4 + 3e^5$$

elde edilir. Buradan istenen eşitsizlik görülür.

- iii. Benzer şekilde birinci üstel Zagreb indeksinin toplam biçiminin tanımı verilen devir içermeyen graflara uygulandığında

$$EM_1^*(U_n) = 2e^3 + (n - 5)e^4 + 2e^5$$

ve

$$EM_1^*(T(n, n_1, k)) = 3e^3 + (n - 8)e^4 + 3e^5$$

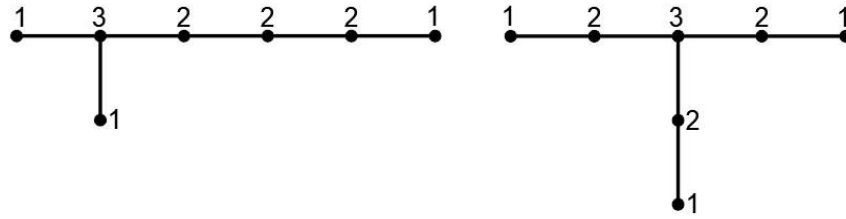
şeklinde elde edilen değerlerden istenen eşitsizlik görülür.

- iv. Birinci üstel Zagreb indeksine benzer olarak i dereceli köşelerin sayısı olan n_i sayıları U_n ve $T(n, n_1, k)$ graflarında birbirlerine eşittir. n_i sayılarının eşitliğinden ve birinci çarpımsal Zagreb indeksi tanımından istenen eşitlik görülür.
- v. Son olarak verilen graf sınıflarının ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri

$$\frac{E\pi_2(U_n)}{E\pi_2(T(n, n_1, k))} = \frac{e^{2.2+1.3+2.6+4.(n-6)}}{e^{2.3+3.6+4.(n-8)}} > 1$$

şeklinde oranlandığında istenen eşitsizlik elde edilir. ■

Örnek 4.2.1. Bağlantılı ağaç graflarından $n = 7$ mertebeli U_7 ve $T(7,2,3)$ graf sınıflarının bir önceki Teoremden bahsedilen üstel Zagreb indeks değerlerini elde edelim.



Şekil 4.2.1. $n = 7$ mertebeli U_7 ve $T(7,2,3)$ ağaç grafları

$$EM_1(U_7) = e(3 + 3e^3 + e^8) = EM_1(T(7,5,3))$$

$$EM_2(U_7) = e^2(1 + 2e + 2e^2 + e^4) < 3e^2(1 + e^4) = EM_2(T(7,5,3))$$

$$EM_1^*(U_7) = e^3(1 + 4e + e^2) < 3e^3(1 + e^2) = EM_1^*(T(7,5,3))$$

$$E\pi_1(U_7) = e^{24} = E\pi_1(T(7,5,3))$$

$$E\pi_2(U_7) = e^{22} < e^{24} = E\pi_2(T(7,5,3))$$

şeklinde verilen eşitlik ve eşitsizlikler $n = 7$ mertebeli ağaç graf sınıfları için elde edilir.

Teorem 4.2.2. Tek devir içeren graf sınıflarından n mertebeli ve k devir uzunluklu $L_{n,k}$ ve $H_{n,k}$ graflarının birinci üstel Zagreb indeksleri ve birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri arasında;

$$EM_1(H_{n,k}) \geq EM_1(L_{n,k})$$

$$E\pi_1(H_{n,k}) \geq E\pi_1(L_{n,k})$$

şeklinde eşitsizlikler vardır (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. $H_{n,k}$ ve $L_{n,k}$ tek devir içeren graf sınıflarının tanımlarından; $k = n$ ise $L_{n,k} = C_k$ ve $k = n - 1$ ise $L_{n,k} = H_{n,k}$ 'dir. Dolayısıyla k devir uzunluk sayısını $3 \leq k \leq n - 2$ aralığında ele alacağız.

i dereceye sahip köşelerin sayısı n_i olsun. Tek devir içeren $H_{n,k}$ graf sınıfı için $i \in \{1,2,3\}$ olmak üzere n_i sayıları $n_1 = n - k$, $n_2 = 2k - n$ ve $n_3 = n - k$ şeklindedir. Tek devir içeren $L_{n,k}$ graf sınıfı için ise $n_1 = 1$, $n_2 = n - 2$ ve $n_3 = 1$ şeklindedir. Dolayısıyla;

$$\begin{aligned} EM_1(H_{n,k}) - EM_1(L_{n,k}) &= (n - k)e^{1^2} + (2k - n)e^{2^2} + (n - k)e^{3^2} - [1 \cdot e^{1^2} + (n - 2)e^{2^2} + 1 \cdot e^{3^2}] \\ &\geq e^9 + 4e^4 + e \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

olur. Benzer şekilde n_i sayılarını kullanarak birinci üstel çarpımsal Zagreb indeks değerlerini oranlarsak;

$$\frac{E\pi_1(L_{n,k})}{E\pi_1(H_{n,k})} = \frac{e^{4n+2}}{e^{6n-2k}} = e^{-2} \leq 1$$

elde edilir. ■

4.3. Graf Operatörleri Üzerinde Sonuçlar

Topolojik indeksler yalnızca graflar üzerinde edgil ayrıca graf operatörleri üzerinde de çalışılmaktadır (Khalief vd., 2009; Ashrafi vd., 2010). Dolayısıyla grafların topolojik indeksleri ile graf ya da graflardan elde edilen graf operatörlerinin topolojik indeksleri arasında bir ilişki görülmesi muhtemeldir. Zagreb indekslerinin bazı graf operatörleri üzerinde bir çok çalışması yapılmıştır (Das vd., 2013; Loksha vd., 2020; Azari ve İranmanesh, 2015; Basavanagoud ve Patil, 2016; Bindusree vd., 2016).

Bu kısımda birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri bazı graf operatörleri üzerinde çalışılacaktır.

Teorem 4.3.1. Basit ve bağlantılı G ve H graflarının kartezyen çarpım grafinin birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri sırasıyla

$$E\pi_1(G \times H) = (\pi_1(G))^{|V(H)|} (\pi_1(H))^{|V(G)|} e^{8|E(G)||E(H)|}$$

ve

$$E\pi_2(G \times H) = e^{3(|E(H)||M_1(G)|+|E(G)||M_1(H)|+M_2(H)|V(G)|+M_2(G)|V(H)|)}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Lemma 2.3.1. ve Lemma 2.3.2.'yi göz önüne alalım. Buna göre birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi tanımından kartezyen çarpımı ile

$$\begin{aligned} E\pi_1(G \times H) &= \prod_{u \in V(G \times H)} e^{d_{(G \times H)}^2(u)} = \prod_{(a,b) \in V(G \times H)} e^{d_{(G \times H)}^2(a,b)} \\ &= \prod_{a \in V(G)} \prod_{b \in V(H)} e^{(d_G(a)+d_H(b))^2} = \prod_{a \in V(G)} \prod_{b \in V(H)} e^{d_G^2(a)+d_H^2(b)+2d_G(a)d_H(b)} \\ &= \prod_{b \in V(H)} \prod_{a \in V(G)} e^{d_G^2(a)} \prod_{a \in V(G)} \prod_{b \in V(H)} e^{d_H^2(b)} \prod_{a \in V(G)} \prod_{b \in V(H)} e^{2d_G(a)d_H(b)} \\ &= \prod_{b \in V(H)} \pi_1(G) \prod_{a \in V(G)} \pi_1(H) \prod_{a \in V(G)} e^{2d_G(a)2|E(H)|} \\ &= (\pi_1(G))^{|V(H)|} (\pi_1(H))^{|V(G)|} e^{8|E(G)||E(H)|} \end{aligned}$$

elde edilir.

Benzer şekilde ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi kartezyen çarpım grafinin uygulanırsa;

$$\begin{aligned}
& E\pi_2(G \times H) \\
&= \prod_{uv \in E(G \times H)} e^{d_{G \times H}(u)d_{G \times H}(v)} = \prod_{(a,b),(c,d) \in E(G \times H)} e^{d_{G \times H}((a,b))d_{G \times H}((c,d))} \\
&= \prod_{a \in V(G)} \prod_{bd \in E(H)} e^{d_{G \times H}((a,b))d_{G \times H}((a,d))} \cdot \prod_{ac \in E(G)} \prod_{b \in V(H)} e^{d_{G \times H}((a,b))d_{G \times H}((c,b))} \\
&= \prod_{a \in V(G)} \prod_{bd \in E(H)} e^{(d_G(a)+d_H(b))(d_G(a)+d_H(d))} \prod_{ac \in E(G)} \prod_{b \in V(H)} e^{(d_G(a)+d_H(b))(d_G(c)+d_H(b))} \\
&= \prod_{a \in V(G)} \left(e^{d_G^2(a)} \right)^{|E(H)|} \prod_{bd \in E(H)} e^{d_G(a)(d_H(b)+d_H(d))} \cdot e^{d_H(b)d_H(d)} \\
&\quad \cdot \prod_{b \in V(H)} \left(e^{d_H^2(b)} \right)^{|E(G)|} \prod_{ac \in E(G)} e^{d_H(b)(d_G(a)+d_G(c))} \cdot e^{d_G(a)d_G(c)} \\
&= \prod_{a \in V(G)} e^{|E(H)| \cdot d_G^2(a)} \cdot e^{d_G(a)M_1(H)} \cdot e^{M_2(H)} \cdot \prod_{b \in V(H)} e^{|E(G)| \cdot d_H^2(b)} \cdot e^{d_H(b)M_1(G)} \cdot e^{M_2(G)} \\
&= e^{|E(H)| \cdot M_1(G)} \cdot e^{2|E(G)| \cdot M_1(H)} \cdot e^{M_2(H) \cdot |V(G)|} \cdot e^{|E(G)| \cdot M_1(H)} \cdot e^{2|E(H)| \cdot M_1(G)} \cdot e^{M_2(G) \cdot |V(H)|} \\
&= e^{3(|E(H)|M_1(G) + |E(G)|M_1(H) + M_2(H)|V(G)| + M_2(G)|V(H)|)}
\end{aligned}$$

olur. Dolayısıyla istenilen eşitlikler elde edilir. ■

Teorem 4.3.2. Basit ve bağlantılı grafların birleşim çarpım graflarının birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri sırasıyla

$$E\pi_1(G + H) = E\pi_1(G) \cdot E\pi_1(H) e^{(|V(G)||V(H)|(|V(G)|+|V(H)|)+4(|V(G)||E(H)|+|V(H)||E(G)|))}$$

ve

$$E\pi_2(G + H)$$

$$= E\pi_2(G)E\pi_2(H)$$

$$\cdot e^{(|V(H)|^2(|V(G)|+|E(G)|)+|V(G)|M_2(H)+|V(H)|M_2(G)+2|V(G)||E(G)|+|E(H)|(|V(G)|^2+4|E(G)|+2|V(H)|))}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Lemma 2.3.1. ve Lemma 2.3.2.'yi göz önüne alalım. Buna göre birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi tanımından birleşim (join) çarpımı ile

$$\begin{aligned}
E\pi_1(G + H) &= \prod_{u \in V(G+H)} e^{d_{(G+H)}^2(u)} = \prod_{u \in V(G)} e^{d_{(G+H)}^2(u)} \prod_{u \in V(H)} e^{d_{(G+H)}^2(u)} \\
&= \prod_{u \in V(G)} e^{(d_G(u)+|V(H)|)^2} \prod_{u \in V(H)} e^{(d_H(u)+|V(G)|)^2} \\
&= \prod_{u \in V(G)} e^{d_G^2(u)+2d_G(u)|V(H)|+|V(H)|^2} \cdot \prod_{u \in V(H)} e^{d_H^2(u)+2d_H(u)|V(G)|+|V(G)|^2} \\
&= E\pi_1(G)e^{|V(H)|^2|V(G)|} e^{4|V(H)||E(G)|} \cdot E\pi_1(H)e^{|V(G)|^2|V(H)|} e^{4|V(G)||E(H)|}
\end{aligned}$$

elde edilir.

Benzer şekilde ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi join çarpım grafına uygulanırsa;

$$\begin{aligned}
E\pi_2(G + H) &= \prod_{uv \in E(G+H)} e^{d_{G+H}(u)d_{G+H}(v)} \\
&= \prod_{uv \in E(G)} e^{d_{G+H}(u)d_{G+H}(v)} \prod_{uv \in E(H)} e^{d_{G+H}(u)d_{G+H}(v)} \\
&= \prod_{uv \in E(G)} e^{(d_G(u)+|V(H)|)(d_G(v)+|V(H)|)} \prod_{uv \in E(H)} e^{(d_H(u)+|V(G)|)(d_H(v)+|V(G)|)} \\
&\quad \cdot \prod_{u \in V(G)v \in V(H)} e^{(d_G(u)+|V(H)|)(d_H(v)+|V(G)|)} \\
&= E\pi_2(G)e^{|V(H)|^2|E(G)|} e^{|V(H)|M_2(G)} \cdot E\pi_2(H)e^{|V(G)|^2|E(H)|} e^{|V(G)|M_2(H)} e^{|V(G)||V(H)|^2} \\
&\quad \cdot e^{2(|V(G)||E(G)|+|V(H)||E(H)|)} e^{4|E(G)||E(H)|}
\end{aligned}$$

elde edilerek verilen eşitsizliklere ulaşılır. ■

Teorem 4.3.3. İki grafin bileşim, simetrik fark ve tensör çarpım graflarının birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri

$$E\pi_1(G[H]) = e^{|V(H)|(|V(H)|^2 M_1(G) + 8|E(G)||E(H)|) + |V(G)|M_1(H)}$$

ve

$$E\pi_1(G \oplus H)$$

$$= e^{|V(G)|^3 M_1(H)} e^{|V(H)|^3 M_1(G)} \prod_{u \in V(G), v \in V(H)} e^{2d_G(u)d_H(v)(|V(G)| - 2d_G(u))(|V(H)| - 2d_H(v))}$$

ve

$$E\pi_1(G \otimes H)$$

$$= e^{|V(G)|^3 M_1(H)} e^{|V(H)|^3 M_1(G)} e^{8|V(G)||V(H)||E(G)||E(H)|} e^{M_1(G)M_1(H)} \\ \cdot e^{-4|V(G)||E(G)|M_1(H)} e^{-4|V(H)||E(H)|M_1(G)}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Lemma 2.3.1. ve Lemma 2.3.2.'yi göz önüne alalım. Buna göre birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi tanımından lexicographical çarpımı ile

$$\begin{aligned} E\pi_1(G[H]) &= \prod_{u \in V(G[H])} e^{d_{G[H]}^2(u)} = \prod_{(a,b) \in V(G[H])} e^{d_{G[H]}^2((a,b))} \\ &= \prod_{a \in V(G), b \in V(H)} e^{(|V(H)|d_G(a) + d_H(b))^2} \\ &= \prod_{a \in V(G), b \in V(H)} e^{|V(H)|^2 d_G^2(a) + d_H^2(b) + 2|V(H)|d_G(a)d_H(b)} \\ &= \prod_{b \in V(H)} e^{|V(H)|^2 M_1(G)} \prod_{a \in V(G)} e^{M_1(H)} \prod_{a \in V(G)} e^{2|V(H)|2|E(G)|d_G(a)} \\ &= e^{|V(H)|^2 M_1(G)|V(H)|} e^{M_1(H)|V(G)|} e^{2|V(H)|2|E(G)|2|E(H)|} \\ &= e^{|V(H)|(|V(H)|^2 M_1(G) + 8|E(G)||E(H)|) + M_1(H)|V(G)|} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= E\pi_1(G)e^{|V(H)|^2|V(G)|}e^{4|V(H)||E(G)|} \cdot E\pi_1(H)e^{|V(G)|^2|V(H)|}e^{4|V(G)||E(H)|} \\
&= E\pi_1(G)E\pi_1(H)e^{|V(G)||V(H)|(|V(G)|+|V(H)|)+4(|V(H)||E(G)|+|V(G)||E(H)|)}
\end{aligned}$$

elde edilir.

Benzer şekilde Lemma 2.3.1. ve Lemma 2.3.2. ve birinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi tanımını ile simetrik fark çarpımından

$$E\pi_1(G\oplus H)$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{(u,v) \in V(G\oplus H)} e^{d_{G\oplus H}^2((u,v))} \\
&= \prod_{u \in V(G)} \prod_{v \in V(H)} e^{(|V(G)|d_H(v)+|V(H)|d_G(u)-2d_G(u)d_H(v))^2} \\
&= \prod_{u \in V(G)} \prod_{v \in V(H)} e^{|V(G)|^2d_H^2(v)+|V(H)|^2d_G^2(u)+2|V(G)||V(H)|d_G(u)d_H(v)+4d_G^2(u)d_H^2(v)} \\
&\quad \cdot \prod_{u \in V(G)} \prod_{v \in V(H)} e^{-4d_G(u)d_H(v)|V(G)|d_H(v)-4d_G(u)d_H(v)|V(H)|d_G(u)} \\
&= \prod_{u \in V(G)} e^{|V(G)|^2M_1(H)} \prod_{v \in V(H)} e^{|V(H)|^2M_1(G)} \\
&\quad \cdot \prod_{u \in V(G)} \prod_{v \in V(H)} e^{2d_G(u)d_H(v)(|V(G)|-2d_G(u))(|V(H)|-2d_H(v))} \\
&= e^{|V(G)|^3M_1(H)}e^{|V(H)|^3M_1(G)} \prod_{u \in V(G)} \prod_{v \in V(H)} e^{2d_G(u)d_H(v)(|V(G)|-2d_G(u))(|V(H)|-2d_H(v))}
\end{aligned}$$

olur. Buradan

$$E\pi_1(G\otimes H)$$

$$= \prod_{(u,v) \in V(G\otimes H)} e^{d_{G\otimes H}^2((u,v))}$$

$$\begin{aligned}
&= \prod_{u \in V(G) v \in V(H)} e^{(|V(G)|d_H(v)+|V(H)|d_G(u)-d_G(u)d_H(v))^2} \\
&= e^{|V(G)|^3 M_1(H)} e^{|V(H)|^3 M_1(G)} e^{8|V(G)||V(H)||E(G)||E(H)|} e^{M_1(G)M_1(H)} \\
&\quad \cdot e^{-4|V(H)||E(H)|M_1(G)} e^{-4|V(G)||E(G)|M_1(H)}
\end{aligned}$$

elde edilir. ■

Teorem 4.3.4. Herhangi basit ve bağlantılı iki grafın corona çarpım grafının birinci ve ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksleri sırasıyla

$$E\pi_1(G \circ H) = e^{|V(G)||V(H)|(|V(H)|+1)+M_1(G)+4(|V(G)||E(H)|+|V(H)||E(G)|)+M_1(H)|V(G)|}$$

ve

$$E\pi_2(G \circ H)$$

$$\begin{aligned}
&= e^{|V(H)|^2(|V(G)|+|E(G)|)+|V(G)|(|E(H)|+M_1(H)+M_2(H))} \\
&\quad \cdot e^{2|E(G)|(2|E(H)|+1)+M_2(H)+|V(H)|(M_1(G)+2|V(G)|+|E(H)|)}
\end{aligned}$$

dir (Akgüneş ve Aydın, 2021).

İspat. Lemma 2.3.1. ve Lemma 2.3.2. 'yi göz önüne alınırsa;

$$\begin{aligned}
E\pi_1(G \circ H) &= \prod_{u \in V(G \circ H)} e^{d_{G \circ H}^2(u)} = \prod_{u \in V(G)} e^{d_{G \circ H}^2(u)} \prod_{i=1}^{|V(G)|} \prod_{u \in V(H,i)} e^{d_{G \circ H}^2(u)} \\
&= \prod_{u \in V(G)} e^{(d_G(u)+|V(H)|)^2} \prod_{i=1}^{|V(G)|} \prod_{u \in V(H,i)} e^{(d_G(u)+1)^2} \\
&= \prod_{u \in V(G)} e^{d_G^2(u)+2d_G(u)|V(H)|+|V(H)|^2} \cdot \prod_{i=1}^{|V(G)|} \prod_{u \in V(H,i)} e^{d_G^2(u)+2d_G(u)+1} \\
&= e^{|V(H)|^2|V(G)|+M_1(G)+4|V(H)||E(G)|} e^{|V(G)||V(H)|+M_1(H)|V(G)|+4|V(G)||E(H)|}
\end{aligned}$$

elde edilir.

$i = \{1, 2, \dots, |V(G)|\}$ olmak üzere, ikinci üstel çarpımsal Zagreb indeksi join çarpım grafına uygulanırsa;

$$\wp = \{uv : u \in V(G), v \in V(H, i)\}$$

$$\begin{aligned} E\pi_2(G \circ H) &= \prod_{uv \in E(G \circ H)} e^{d_{G \circ H}(u)d_{G \circ H}(v)} \\ &= \prod_{uv \in E(G)} e^{d_{G \circ H}(u)d_{G \circ H}(v)} \prod_{i=1}^{|V(G)|} \prod_{uv \in E(H)} e^{d_{G \circ H}(u)d_{G \circ H}(v)} \prod_{uv \in \wp} e^{d_{G \circ H}(u)d_{G \circ H}(v)} \end{aligned}$$

dir. Elde edilen bu eşitliği üç kısma ayırarak ifade edelim:

$$\begin{aligned} \prod_{uv \in E(G)} e^{d_{G \circ H}(u)d_{G \circ H}(v)} &= \prod_{uv \in E(G)} e^{(d_G(u)+|V(H)|)(d_G(v)+|V(H)|)} \\ &= e^{|V(H)|^2|E(G)|+M_2(G)+4|V(H)|M_1(G)} \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^{|V(G)|} \prod_{uv \in E(H)} e^{d_{G \circ H}(u)d_{G \circ H}(v)} &= \prod_{i=1}^{|V(G)|} \prod_{uv \in E(H)} e^{(d_G(u)+1)(d_H(v)+1)} \\ &= e^{|V(G)|(|E(H)|+M_1(H)+M_2(H))} \end{aligned}$$

dir. Ayrıca

$$\begin{aligned} \prod_{uv \in \wp} e^{d_{G \circ H}(u)d_{G \circ H}(v)} &= \prod_{i=1}^{|V(G)|} \prod_{u \in V(G)} \prod_{v \in V(H)} e^{(d_G(u)+|V(H)|)(d_H(v)+1)} \\ &= e^{|V(H)|^2|V(G)|+2|V(G)||V(H)||E(H)|+4|E(G)||E(H)|+2|E(G)|} \end{aligned}$$

olur. Buradan istenilen eşitliklere ulaşılır. ■

5. MAKSİMAL ZAGREB İNDEKSİ

Bu bölümde yeni bir Zagreb indeksi olan Maksimal Zagreb indeksi tanımlanacaktır. Daha sonra bazı özel graflar üzerinde maksimal Zagreb indeksinin graf parametreleri cinsinde değerleri incelenecektir. Ayrıca, maksimal Zagreb indeksinin azalan ya da artan olduğu dönüşümler belirlenecektir.

Tanım 5.1. G bir graf ve $d(u) = \max\{deg_G(u_1), deg_G(u_2); u_1, u_2 \in E(G)\}$ olsun. G grafi için maksimal Zagreb indeksi

$$MM(G) = \sum (d(u))^2$$

dir (Aydın ve Akgüneş, 2024).

Maksimal Zagreb indeksinin tanımına göre bazı özel grafların maksimal Zagreb indeksi değerlerini verelim.

Teorem 5.1. P_n yol, C_n çevrim, S_n yıldız, W_n tekerlek, K_n tam, $K_{m,n}$ iki parçalı tam, $S_{x,y}$ çift yıldız ve L_n ladder graflarının maksimal Zagreb indeksleri

$$MM(G) = \begin{cases} 4(n-1) & G \cong P_n \text{ ve } n \geq 3 \\ 4n & G \cong C_n \text{ ve } n \geq 3 \\ (n-1)^3 & G \cong S_n \text{ ve } n \geq 3 \\ (n-1) \cdot (n^2 - 2n + 10) & G \cong W_n \text{ ve } n \geq 3 \\ \frac{1}{2}(n-3)(n-1)^2n & G \cong K_n \text{ ve } n \geq 4 \\ (m+n) \cdot m^2 & G \cong K_{m,n} \text{ ve } m \geq n \geq 1 \\ x(x+1)^2 + y(y+1)^2 + x + 1 & G \cong S_{x,y} \text{ ve } x \geq y \geq 1 \\ 27n - 28 & G \cong L_n \text{ ve } n \geq 3 \end{cases}$$

dir (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. Teorem 4.1.'in ispatında olduğu gibi benzer şekilde elde edilir. ■

Bağlantılı herhangi bir grafta bir köşenin en büyük derecesi en az 2 en fazla $n-1$ olur. Bundan dolayı, bağlantılı bir graf en az kenara yol grafta, en fazla kenara tam grafta sahiptir. Dolayısıyla aşağıdaki teorem kenar kümesi üzerinde tanımlanan maksimal Zagreb indeksinin genel graflar üzerinde uç değer ve graflarını vermektedir.

Teorem 5.2. G grafi n mertebeli bağlantılı bir graf olmak üzere, G grafının maksimal Zagreb indeksi değerleri aşağıdaki değerler arasındadır.

$$4(n-1) \leq MM(G) \leq (n-1)^2 n$$

Ayrıca verilen eşitsizliğin alt sınırı $G \cong P_n$ ve üst sınırı $G \cong K_n$ olduğunda eşitlikler sağlanır (Aydın ve Akgüneş, 2024).

5.1. Grafların Maksimal Zagreb İndeksini Artıran veya Azaltan Dönüşümler

Literatürde uç grafları tüm türlere göre karakterize etmek için pek çok yaklaşım kullanılmıştır. İlk olarak 2007’de graf dönüşümleri kullanılarak birinci ve ikinci Zagreb indekslerinin uç grafları karakterize edilmiştir (Deng, 2007). Özellikle devir içermeyen, tek ve çift devir içeren graflar için bazı topolojik indekslere göre uç grafları çalışılmıştır (Buyantogtokh vd., 2020; Gao vd., 2017; Xu vd., 2013; Xu ve Das, 2012; Xu ve Hua, 2012).

Bu kısımda, maksimal Zagreb indeksi azaltan veya artıran dönüşümleri belirleyeceğiz.

Lemma 5.1.1. G_2 grafi graf dönüşümü 1 ile G_1 grafindan elde edilmiş bir graf olmak üzere;

$$MM(G_1) > MM(G_2)$$

dır. Yani graf dönüşümü 1 maksimal Zagreb indeksini kesin azaltan bir dönüşümdür (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. $deg_{G_1}(v) \geq 3$ ve $j = 1, 2$ için $d(u) = \max\{deg(u_1), deg(u_2); u_1 u_2 \in E(G_j)\}$ olsun. Maksimal Zagreb indeksi tanımından;

$$MM(G_1) - MM(G_2)$$

$$\begin{aligned} &> \sum_{j=1, u_1 u_2 = v w_t, u_1 v, u_{k-1} u_k} (d(u))^2 - \sum_{j=2, u_1 u_2 = u_k w_1, u_1 v, u_{k-1} u_k} (d(u))^2 \\ &= (deg_{G_1}(v))^2 + ((deg_{G_1}(v))^2 + 2^2) - (2^2 + (deg_{G_1}(v) - 1)^2 + 2^2) \\ &= (deg_{G_1}(v))^2 + 2deg_{G_1}(v) - 5 > 0. \end{aligned}$$

elde edilir. ■

Lemma 5.1.2. G_2 grafi graf dönüşümü 2 ile G_1 grafindan elde edilmiş bir graf olmak üzere;

$$MM(G_1) < MM(G_2)$$

dır. Yani graf dönüşümü 2 maksimal Zagreb indeksini kesin artıran bir dönüşümdür (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. $j = 1, 2$ için $d(a) = \max\{deg(u_1), deg(u_2); u_1u_2 \in E(G_j)\}$ olmak üzere;

$$MM(G_2) - MM(G_1)$$

$$\begin{aligned} &> \sum_{\substack{i=1 \\ i=2, u_1u_2=vw_i}}^t (d(a))^2 + (\max\{deg_{G_2}(u), deg_{G_2}(v)\})^2 \\ &- \sum_{\substack{i=1 \\ j=1, u_1u_2=uw_i}}^t (d(a))^2 - (\max\{deg_{G_1}(u), deg_{G_1}(v)\})^2 \end{aligned}$$

elde edilir. Eğer $deg_{G_0}(v) = k < t$ ise:

$$MM(G_2) - MM(G_1)$$

$$\begin{aligned} &> \sum_{i=1}^t \left[(deg_{G_2}(v))^2 - (deg_{G_1}(u))^2 \right] + (deg_{G_2}(v))^2 - (deg_{G_1}(u))^2 \\ &= \sum_{i=1}^t [(k+t+1)^2 - (t+1)^2] + (k+t+1)^2 - (t+1)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{t+1} [(k+t+1)^2 - (t+1)^2] > 0 \end{aligned}$$

elde edilir. Eğer $deg_{G_0}(v) = k \geq t$ ise:

$$MM(G_2) - MM(G_1)$$

$$\begin{aligned} &> \sum_{i=1}^t \left[(deg_{G_2}(v))^2 - (deg_{G_1}(u))^2 \right] + (deg_{G_2}(v))^2 - (deg_{G_1}(v))^2 \\ &= \sum_{i=1}^t [(k+t+1)^2 - (t+1)^2] + (k+t+1)^2 - (k+1)^2 \\ &= t \cdot k^2 + 2t(t+1)k + t^2 + 2t(k+1) > 0 \end{aligned}$$

olur. ■

Lemma 5.1.3. G_2 grafi graf dönüşümü 3 ile G_1 grafindan elde edilmiş bir graf olmak üzere;

$$MM(G_1) < MM(G_2)$$

dır. Yani graf dönüşümü 3 maksimal Zagreb indeksini kesinlikle artıran bir dönüşümdür (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. $deg_G(u) = x$ ve $deg_H(v) = y$ olsun. G_2 grafindaki w köşesi, G_1 grafindaki u ve v köşelerinin birleşiminden oluştuğu için $deg_{G_2}(w) = x + y + t - 1$ olur. Ayrıca $i \in \{2, 3, \dots, t-1\}$ için $deg_{G_1}(v_i) = 2$ ve $i \in \{1, 2, \dots, t-1\}$ için $deg_{G_2}(v_i) = 1$ elde edilir. $j = 1, 2$ için $d(u) = \max\{deg(u_1), deg(u_2); u_1 u_2 \in E(G_j)\}$ olmak üzere;

$$MM(G_2) - MM(G_1)$$

$$\begin{aligned} &> \sum_{i=1}^{t-1} (d(u))^2 - \sum_{i=1}^{t-1} (d(u))^2 \\ &= (t-1) (deg_{G_2}(w))^2 - (x+1)^2 - (y+1)^2 - (t-3)2^2 \\ &= (t-1)(x+y+t-1)^2 - (x+1)^2 - (y+1)^2 - (t-3)2^2 \\ &= (x+1)^2(t-2) + (y+1)^2(t-2) + (t-3)^2(t-1) - (t-3)2^2 \end{aligned}$$

elde edilir. $t=2$ ise $MM(G_2) - MM(G_1) = 0$ olur. $t=3$ ise:

$$\begin{aligned} MM(G_2) - MM(G_1) &> (x+y+t)^2(t-1) - (x+1)^2 - (y+1)^2 - 4(t-3) \\ &> (x+y+t)^2 - (x+1)^2 + (y+1)^2(x+y+t)^2 - (y+1)^2 \\ &> 0 \end{aligned}$$

dır. Dolayısıyla istenen sonuç elde edilir. ■

Lemma 5.1.4. G_2 grafi graf dönüşümü 4 ile G_1 grafindan elde edilmiş bir graf olmak üzere;

$$MM(G_1) > MM(G_2)$$

dır. Dolayısıyla graf dönüşümü 4 maksimal Zagreb indeksini kesinlikle azaltan bir dönüşümdür (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. Lemma 5.1.2.'den $MM(G) \geq MM(G_1)$ olur. Dolayısıyla $MM(G) > MM(G_2)$ olduğunu göstermek yeterlidir.

Şimdi G ve G_2 graflarının bazı komşu köşe çiftlerini

$$A = \{u_1u_2, u_{t-1}u_t\} \text{ ve } B = \{uu_1, vu_1\}$$

şeklinde iki küme halinde yazalım. Ayrıca,

$$d_G(a) = \max\{\deg(w_1), \deg(w_2); w_1w_2 \in A, w_i \in V(G)\}$$

$$d_G(b) = \max\{\deg(w_1), \deg(w_2); w_1w_2 \in B, w_i \in V(G)\}$$

$$d_{G_2}(a) = \max\{\deg(w_1), \deg(w_2); w_1w_2 \in A, w_i \in V(G_2)\}$$

ve

$$d_{G_2}(b) = \max\{\deg(w_1), \deg(w_2); w_1w_2 \in B, w_i \in V(G_2)\}$$

olmak üzere;

$$MM(G) - MM(G_2) > \sum_{i=1}^{t-1} (d_G(a))^2 + \sum_{i=1}^{t-1} (d_G(b))^2 - \sum_{i=1}^{t-1} (d_{G_2}(a))^2 - \sum_{i=1}^{t-1} (d_{G_2}(b))^2$$

elde edilir. $\deg_G(u) = \deg_{G_2}(u) = x$ ve $\deg_G(v) = \deg_{G_2}(v) = y$, $\deg_G(u_1) = 3$ ve $\deg_{G_2}(u_1) = 2$ olduğundan;

Eğer, $x \geq 3 = \deg_G(u_1)$ ve $y \geq 3 = \deg_G(u_1)$ ise

$$\sum_{i=1}^{t-1} (d_G(b))^2 - \sum_{i=1}^{t-1} (d_{G_2}(b))^2 = 0$$

olur. Diğer durumlarda;

$$\sum_{i=1}^{t-1} (d_G(b))^2 - \sum_{i=1}^{t-1} (d_{G_2}(b))^2 > 0$$

dır. Ayrıca,

$$\sum_{i=1}^{t-1} (d_G(a))^2 - \sum_{i=1}^{t-1} (d_{G_2}(a))^2 > 0$$

olduğundan yukarıdaki eşitsizlikler $MM(G) > MM(G_2)$ istenen eşitsizliği verir. ■

Lemma 5.1.5. G_2 ve G_2' grafları G_1 grafindan graf dönüşümü 5 yardımıyla elde edilmiş graflar olsun. Buna göre,

$$MM(G_1) < MM(G_2) = MM(G_2')$$

dır. Dolayısıyla, graf dönüşümü 5 bir grafin maksimal Zagreb indeksini kesinlikle artıran bir graf dönüşümüdür (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. $u, v \in V(G_0)$ olmak üzere $\deg(u) = x$, $\deg(v) = y$ ve $j = 1, 2$ için $d(a) = \max\{\deg(u_1), \deg(u_2); u_1 u_2 \in E(G_j)\}$ olsun. Buna göre

$$\begin{aligned} MM(G_2) - MM(G_1) &> \sum_{i=1}^k (d(a))^2 + \sum_{i=1}^k (d(a))^2 - \sum_{i=1}^k (d(a))^2 \\ &\quad - \sum_{i=1}^k (d(a))^2 = (x+k+t)^2(k+t) - (x+k)^2k - (y+t)^2t \\ &= k(x+k+t)^2 + t(x+k+t)^2 - k(x+k)^2 - t(y+t)^2 > 0 \end{aligned}$$

istenen sonuç elde edilir. ■

5.2. Maksimal Zagreb İndeksinin Uç Devir Grafları

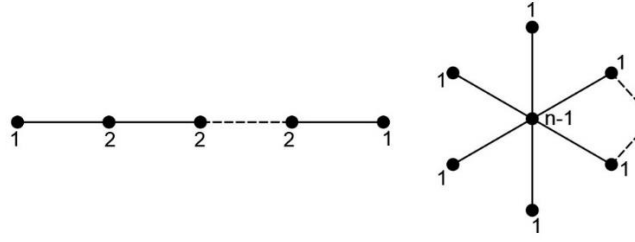
Bu kısımda maksimal Zagreb indeksinin devir içermeyen, tek ve çift devir içeren graflar üzerinde uç grafları elde edilecektir.

Teorem 5.2.1. G grafi n köşeye sahip devir içermeyen bağlantılı bir graf olsun. Buna göre;

$$MM(P_n) \leq MM(G) \leq MM(S_n)$$

dır (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. Herhangi devir içermeyen bir G grafi için Lemma 5.1.1. ve Lemma 5.1.2.'den istenen sonuç elde edilir. ■



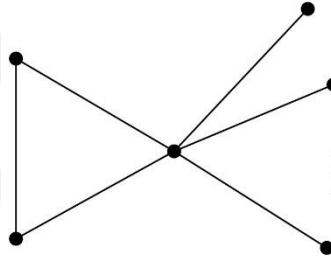
Şekil 5.2.1. n mertebeli devir içermeyen graflar için uç graflar

Teorem 5.2.2. G grafi n köşeye sahip tek devir içeren bir graf olsun. Buna göre

$$MM(C_n) \leq MM(G) \leq MM(U_n^3)$$

dir (Aydın ve Akgüneş, 2024).

Burada U_n^3 grafi Şekil 5.2.2.'deki gibi n köşeli 3 devir uzunluklu tek devir içeren bir graftır.



Şekil 5.2.2. U_n^3 grafi

İspat. Tek devir içeren graflar üzerinde verilen eşitsizliğin sol tarafı Lemma 5.1.1. ve Lemma 5.1.4.'den C_n çevrim grafinin maksimal Zagreb indekste en küçük graf olduğu görülür. Tek devir içeren graflar üzerinde maksimal Zagreb indeksinin üst sınırı için öncelikle U_n^k n köşeli C_k şeklinde tek devir içeren grafini Lemma 5.1.3.'den maksimal Zagreb indeksin keskin arttığı tek devir içeren C_3 grafidir. Ayrıca,

$$MM(U_n^k) = (n - k + 2)^3 + 4(k - 2) \leq (n - 1)^3 + 4 = MM(U_n^3)$$

şeklinde olduğundan U_n^3 grafi üst sınırdır. Dahası Lemma 5.1.5.'den U_n^3 grafinin maksimal Zagreb indeks için tek en büyük graf olduğu elde edilir. ■

Teorem 5.2.3. G , n mertebeli çift devir içeren bir graf olsun. Buna göre

$$MM(C_n(p, q)) \leq MM(G) \leq MM(S_n^2)$$

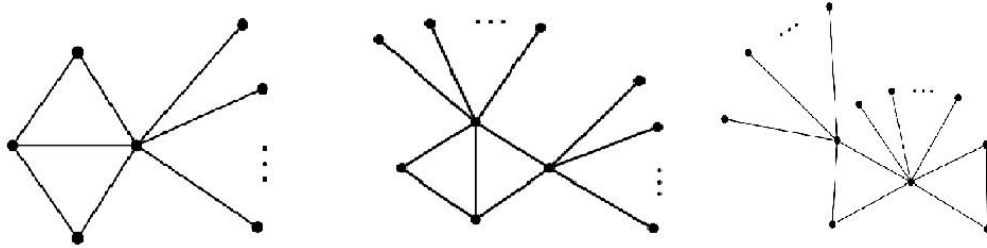
dir (Aydın ve Akgüneş, 2024).

İspat. $MM(S_n^2) = (n-1)^3 + 18$ elde edilir. Eğer $G \neq S_n^2$ ise $MM(G) < MM(S_n^2)$ olduğunu göstermeliyiz.

Çift devir içeren bir grafinin Tanım 2.2.16.'daki üç sınıftan bir tanesini alt grafi içermesi durumunda bu alt graflar G grafinin brace'i olarak tanımlanır. Tüm çift devir içeren grafların kümesi B_n^1 , B_n^2 ve B_n^3 olmak üzere brace'leri sırası ile $P_n^{k,t,m}$, $C_n(p,q)$ ve $C_n(l,r,t)$ graflarıdır.

Burada iki durum söz konusudur; G grafi $K_4 - e$ alt grafini brace'i olarak içerip içermediğidir.

1.durum: G grafi $K_4 - e$ alt grafini brace'i olarak içersin. O halde Lemma 5.1.2. ve Lemma 5.1.5.'den aşağıdaki şekilde gösterilen G^1 grafi G grafindan daha büyük maksimal Zagreb indeksine sahiptir. Yani $MM(G^1) < (n-1)^3 + 18$ 'dir.



Şekil 5.2.3. S_n^2 , G^1 ve G^2 grafları

2.durum: G grafi $K_4 - e$ alt grafini brace'i olarak içermesin. O halde Lemma 5.1.3.'den $K_4 - e$ 'yi brace'i olarak içeren maksimal Zagreb indeksi G grafinin maksimal Zagreb indeksinden daha büyük olan bir graf vardır. Dolayısıyla iki alt durum söz konusu olur.

1.alt durum: G grafinin brace'i $C_n(3,2,m)$ ise 1.duruma dönüşür.

2.alt durum: G grafinin brace'i $C_n(3,2,m)$ değil ise Lemma 5.1.2., 5.1.3. ve 5.1.5.'den G^2 şeklinde maksimal Zagreb indeksi G grafinin maksimal Zagreb indeksinden daha büyük olan yeni çift devir içeren bir graf elde edilir. $MM(G^2) < (n-1)^3 + 18$.

Dolayısıyla maksimal Zagreb indeksin çift devir içeren graflar üzerindeki üst sınırı S_n^2 grafinda olur.

Maksimal Zagreb indeksinin alt sınırı için ise $\{P_n^{k,t,m}, C_n(p, q), C_n(l, r, t)\}$ çift devir içeren alt graf kümesinin en küçük maksimal Zagreb indeks değerine sahip olan çift devir içeren alt grafi olmalıdır. Buna göre

$$MM(P_n^{k,t,m}) = MM(C_n(l, r, t)) = 4n + 34$$

$$MM(C_n(p, q)) = 4n - 52$$

olduğundan sonuç elde edilir. ■

Topolojik indekslerin en önemli problemlerinden biri de uç graflar elde etmektir. Maksimal Zagreb indeksinin genel graflar için uç grafları ve değerleri elde edilmiştir. Ayrıca maksimal Zagreb indeksinin devir graflar için elde edilen uç grafları aşağıdaki tabloda verilmiştir ($c = 0,1,2$).

Maximal Zagreb	En küçük grafi	En büyük grafi
Devir İçermeyen	P_n	S_n
Tek Devir İçeren	C_n	U_n^3
Çift Devir İçeren	$C_n(p, q)$	S_n^2

Tablo 5.2.1. Maksimal Zagreb indeksi devir graflar ($c = 0,1,2$) üzerinde uç grafları

6. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tezde en eski ve uygulama alanı oldukça fazla olan köşe derece bazlı topolojik indekslerin Zagreb indekslerinden yola çıkılarak yeni Zagreb indeksleri tanımlanmıştır. Bunlar, oldukça önemli bir fonksiyon olan üstel fonksiyon düşünülerek üstel Zagreb indeksleri ve komşu derecelerden en büyüğünün karelerinin toplamına eşit olan maksimal Zagreb indeksidir. Üstel Zagreb indekslerinin toplamsal ve çarpımsallarının yanında üstel eşindeksleri de tanımlanmıştır. Tanımlanan yeni Zagreb indekslerinin genel ve devir ($c = 0,1,2$) graflarda sonuçları elde edilmiştir.

Bir grafın iki temel değeri köşe ve kenar sayısı olduğundan ve Zagreb indeksler köşe ya da kenarlar üzerinde tanımlandığından bahsi geçen indekslerin de grafın mertebe ve boyutuna bağlı olmaları olağandır. Dolayısıyla üstel Zagreb indekslerinin grafların yalnızca mertebe ve boyutuna bağlı olan alt sınırları ile graf parametrelerine bağlı olarak kendi aralarında ve diğer topolojik indekslerle olan karşılaştırmaları elde edilmiştir. Ayrıca üstel çarpımsal Zagreb indeksleri graf operatörleri üzerinde de çalışılmıştır.

Maksimal Zagreb indeksinin de genel graflar üzerinde uç grafları ile değerleri elde edilmiştir. Ayrıca maksimal Zagreb indeksinin devir graflarda uç graflarını elde etmek için graf dönüşümlerinden yardım alınmıştır.

Topolojik indeks konusu genel olarak iki temel probleme odaklanır. Birinci problem topolojik indeksler için uç değerler veya uç graflar bulmaktır. Diğer problem ise topolojik indeksler içinde hangi moleküllerin hangi özelliklerini tahmin etmekte iyi olduğunun belirlenmesidir. Literatürde bu iki problemi içeren araştırmalar yapılmış fakat çoğu için de bu tür problemler çözülmemiştir.

Tanımlanan yeni Zagreb indeksleri diğer graflar üzerinde de incelenebilir ve diğer devir graflar için de uç grafları ile en büyük veya en küçük değerleri çalışılabilir.

Moleküllerin ve ilaçların topolojik indeks ve eşindeks değerleri çok büyük anlam ifade eder. Tanımlanan çok sayıda yeni topolojik indeks ve eşindeksler için hangi moleküllerin özelliklerini tahmin yeteneğine sahip olduğu açık bir araştırma alanıdır. Bu çalışmada tanımlanan yeni topolojik indeksler moleküllerden veya ilaçlardan elde edilen graflar üzerinde çalışılabilir.

Ayrıca yeni Zagreb indekslerinin diğer topolojik indekslerle olan ilişkileri de oldukça önemli ve geniş bir çalışma alanı oluşturacağı düşünülmektedir. Dolayısıyla, tanımlanan yeni topolojik indeksler ile literatürde var olan indeksleri karşılaştıran çalışmalar yapılabilir.

Farklı tekniklerden de yardım alınarak çalışılabilecek olan elde edilen veriler ve yeni çalışmalardan elde edilecek veriler bir dizi derece tabanlı topolojik veri oluşturmak için kullanılabilir ve etkinlikleri değerlendirilebilir.



KAYNAKLAR

- Akgüneş, N. ve Aydın, B. (2021). Introducing new exponential Zagreb indices for graphs. *Journal of Mathematics*, 2021(1), 6675321.
- Ashrafi, A. R., Došlic, T. ve Hamzeh, A. (2010). The Zagreb coindices of graph operations. *Discrete Applied Mathematics*, 158(15), 1571-1578.
- Ashrafi, A. R., Doslic, T. ve Hamzeh, A. (2011). Extremal graphs with respect to the Zagreb coindices. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 65, 85–92.
- Aydın, B. ve Akgüneş, N. (2024). On new Zagreb index: maximal Zagreb index. submitted.
- Azari, M. ve Iranmanesh, A. (2015). Some inequalities for the multiplicative sum Zagreb index of graph operations. *Journal of Mathematical Inequalities*, 9(3), 727-738.
- Basavanagoud, B. ve Patil, S. (2016). A note on hyper-Zagreb index of graph operations. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 7(1), 89-92.
- Bindusree, A. R., Cangül, İ. N., Loksha, V. ve Çevik, A. S. (2016). Zagreb polynomials of three graph operators. *Filomat*, 30(7), 1979-1986.
- Bollobás, B. ve Erdős, P. (1998). Graphs of extremal weights. *Ars combinatoria*, 50, 225.
- Bondy, J. A. ve Murty, U. S. (2008). Graph Theory. *vol. 244 of Graduate Texts in Mathematics*, Springer, Berlin, Germany.
- Borovicanin, B., Das, K. C., Furtula, B. ve Gutman, I. (2017). Bounds for Zagreb indices. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 78, 17-100.
- Buckley, F. ve Harary, F. (1990). Distance in Graphs. *Vol. 2. Redwood City: Addison-Wesley*.
- Buyantogtokh, L., Horoldagva, B. ve Das, K. C. (2020). On reduced second Zagreb index. *Journal of Combinatorial Optimization*, 39, 776-791.

- Cruz, R., Gutman, I. ve Rada, J. (2021). Sombor Index of Chemical Graphs. *Applied Mathematics and Computation*, 399, 126018.
- Cruz, R. ve Rada, J. (2019). The Path and The Star as Extremal Values of Vertex-Degree-Based Topological Indices Among Trees. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 82(3), 715-732.
- Das, K. C. ve Gutman, I. (2004). Some properties of the second Zagreb index. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 52(1), 103–112.
- Das, K. C., Yurttas, A., Togan, M., Çevik, A. S. ve Cangül, İ. N. (2013). The multiplicative Zagreb indices of graph operations. *Journal of Inequalities and Applications*, 1-14.
- Das, K. C., Akgüneş, N., Togan, M., Yurttas, A., Cangül, İ. N. ve Çevik, A. S. (2016). On the first Zagreb index and multiplicative Zagreb coindices of graphs. *Analele științifice ale Universității "Ovidius" Constanța. Seria Matematică*, 24(1), 153-176.
- Das, K. C., Çevik, A. S., Cangül, İ. N. ve Shang, Y. (2021). On sombor index. *Symmetry*, 13(1), 140.
- De, N., Nayeem, S. M. A. ve Pal, A. (2016). The F-coindex of some graph operations. *SpringerPlus*, 5(1), 221.
- Deng, H. (2007). A Unified Approach to the Extremal Zagreb Indices for Trees, Unicyclic Graphs and Bicyclic Graphs. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 57, 597-616.
- Doslic, T. (2008). Vertex-weighted Wiener polynomials for composite graphs. *ARS Mathematica Contemporanea*, 1, 66-81.
- Eliasi, M., Iranmanesh, A. ve Gutman, I. (2012). Multiplicative versions of first Zagreb index. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 68, 217– 230.
- Eliasi, M. ve Vukucevic, D. (2013). Comparing the multiplicative Zagreb indices. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 69, 765-773.

- Euler, L. (1953). Leonhard Euler and the Königsberg bridges. *Scientific American*, 189(1), 66-72.
- Falahati Nezhad, F., Iranmanesh, A., Tehranian, A. ve Azari, M. (2014). Comparing the second multiplicative Zagreb coindex with some graph invariants. *Transactions on Combinatorics*, 3(4), 31-41.
- Gao, W., Jamil, M. K., Javed, A., Farahani, M. R., Wang, S. ve Liu, J. B. (2017). Sharp Bounds of the Hyper-Zagreb Index on Acyclic, Unicyclic, and Bicyclic Graphs. *Hindawi Discrete Dynamics in Nature and Society*, Vol:2017.
- Gross, J. L. ve Yellen, J. (2004). Handbook of Graph Theory. *Chapman Hall, CRC Press*.
- Gutman, I. (2021). Geometric Approach to Degree-Based Topological Indices: Sombor Indices. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 86(1), 11-16.
- Gutman, I. ve Das, K. C. (2004). The first Zagreb index after 30 years. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 50, 83–92.
- Gutman, I., Furtula, B., Kovijanić Vukićević, Ž. ve Popivoda, G. (2015). On Zagreb indices and coindices. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 74, 5-16.
- Gutman, I. ve Trinajstić, N. (1972). Graph theory and molecular orbitals, Total φ -electron energy of alternant hydrocarbons. *Chemical Physics Letters*, 17(4), 535-538.
- Gutman, I., Ruscic, B., Trinajstić, N. ve Wilcox, C. F. (1975). Graph theory and molecular orbitals. XII. Acyclic Polyenes. *Journal of Chemical Physics*, 62(9), 3399-3405.
- Gutman, I. (2011). Multiplicative Zagreb indices of trees. *Bulletin of International Mathematical Virtual Institute*, 1(2011), 13-19.
- Hansen, P. ve Vukucevic, D. (2007). Comparing the Zagreb indices. *Croatica Chemica Acta*, 80(2), 165-168.
- Harary, F. (1994). Graph Theory. *Addison-Wesley, US*, 22.

- Hardy, G. H., Littlewood, J. E. ve Pólya, G. (1998). *Inequalities*. Cambridge university press, 2nd edition.
- Ilic, A. ve Stevanovic, D. (2011). On comparing Zagreb indices. *arXiv preprint arXiv:1104.4262 (2011)*.
- Katritzky, A. R., Maran, U., Lobanov, V. S. ve Karelson, M. (2000). Structurally diverse quantitative structure-property relationship correlations of technologically relevant physical properties. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 40(1), 1-18.
- Khalifeh, H., Yousefi-Azari H. ve Ashrafi, A. R. (2008). The hyper-Wiener index of graph operations. *Computers & Mathematics with Applications*, 56(5), 1402-1407.
- Khalifeh, M. H., Yousefi-Azari, H. ve Ashrafi, A. R. (2009). The first and second Zagreb indices of some graph operations. *Discrete Applied Mathematics*, 157(4), 804-811.
- Kirmani, S. A. K., Parvez, A. ve Ahmad, J. (2022). Topological coindices and quantitative structure-property analysis of antiviral drugs investigated in the treatment of COVID-19. *Journal of Chemistry*, 2022.
- Klavzar, S. (2000). *Product Graphs: Structure and Recognition*. John Wiley & Sons, New York.
- Liu, J. ve Zhang, Q. (2012). Sharp upper bounds for multiplicative Zagreb indices. *MATCH Communications in Mathematical and Computer Chemistry*, 68(1), 231.
- Lokesha, V., Jain, S., Çevik, A. S. ve Cangül, İ. N. (2020). New results on the F-index of graphs based on corona-type products of graphs. *Proceedings of the Jangjeon Mathematical Society*, 23(2), 141-147.
- Mijalkov, M. (2018). *Graph Theory to Study Complex Networks in the Brain*. PhD diss., Bilkent University.
- Nikolic, S., Kovacevic, G., Milicevic, A. ve Trinajstic, N. (2003). The Zagreb indices 30 years after. *Croatica Chemica Acta*, 76: 113-124.

- Ostrand, P. A. (1973). Graphs with Specified Radius and Diameter. *Discrete Mathematics*, 4, 71-75.
- Rada, J. (2019). Exponential Vertex-Degree-Based Topological Indices and Discrimination. *MATCH Communications in Mathematical and Computer Chemistry*, 82(2019), 29-41.
- Reti, T. ve Gutman, I. (2012). Relations Between Ordinary and Multiplicative Zagreb Indices. *Bulletin of International Mathematical Virtual Institute*, 2(2), 133-140.
- Todeschini, R. ve Consonni, V. (2010). Molecular descriptors. *Recent Advances in QSAR Studies*, 29-102.
- Wiener, H. (1947). Structural Determination of Paraffin Boiling Points. *Journal American Chemical Society*, 69, 1, 17-20.
- Wiener, H. (1948). Relation of the Physical Properties of the Isomeric Alkanes to Molecular Structure. *Journal Physics Chemistry*, 52, 6, 1082-1089.
- Xu, K. ve Das, K. C. (2012). Trees, unicyclic and bicyclic graphs extremal with respect to multiplicative sum Zagreb index. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 68, 257-272.
- Xu, K., Das, K. C. ve Tang, K. (2013). On the multiplicative Zagreb coindex of graphs. *Opuscula Mathematica*, 33, 191-204.
- Xu, K. ve Hua, H. (2012). A unified approach to extremal multiplicative Zagreb indices for trees, unicyclic and bicyclic graphs. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 68, 241-256.
- Yan, Z., Liu, H. ve Liu, H. (2007). Sharp bounds for the second Zagreb index of unicyclic graphs. *Journal of Mathematical Chemistry*, 42(3), 565-574.
- Zeng, M. ve Deng, H. (2020). The Maximal Tree with Respect to the Exponential of the Second Zagreb Index. *arXiv preprint arXiv:2006.08892*.