T.C.
NECMETTİN ERBAKAN
ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MONOJENİK YARIGRUP GRAFLARINDA TERS DERECE İNDEKSLERİ ÜZERİNE BİR ÇALIŞMA

Beyza EMRE

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Matematik Anabilim Dalı

Ocak-2025
KONYA

TEZ KABUL VE ONAYI

Beyza Emre tarafından hazırlanan "Monojenik Yarıgrup Graflarında Ters Derece İndeksleri Üzerine Bir Çalışma" adlı tez çalışması 24/01/2025 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı'nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	**İmza**
Başkan	
Prof. Dr. Ahmet Sinan ÇEVİK	…………………..
Danışman	
Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ	…………………..
Üye	
Prof. Dr. Emine Gökçen KOÇER	…………………..

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

Prof. Dr. Havvanur UÇBEYİAY
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.

Beyza EMRE
Tarih: 24.01.2025

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ
MONOJENİK YARIGRUP GRAFLARINDA TERS DERECE İNDEKSLERİ ÜZERİNE BİR ÇALIŞMA

Beyza EMRE

Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ

2025, 28 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ
Prof. Dr. Emine Gökçen KOÇER
Prof. Dr. Ahmet Sinan ÇEVİK

Graf Teorisi, geniş bir uygulama alanına sahip olan bir matematiksel teoridir. Hem günlük yaşamda hem de çeşitli bilim dallarında pek çok probleme çözüm sunan bu teori, son dönemlerde daha fazla ilgi görmeye başlamıştır. Tez toplam 6 ana bölümden oluşmaktadır.

Birinci bölümde graf teorinin tanımı, kullanım alanları ve tarihçesi ardından temel kavramlar ve bazı özel graflar ele alınmıştır.

İkinci bölümde tezde kullanılan kaynakların araştırılması ve içerik bilgileri sunulmuştur.

Üçüncü bölümde Zagreb indeksten bahsedilmiştir.

Dördüncü bölümde Ters Zagreb topolojik indeksler konusu ele alınmıştır.

Beşinci bölümde sonuçlar ve öneriler kısmı yer almaktadır.

Altıncı bölümde kaynakçaya yer verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Graf, Sıfır-Bölen Graf, Ters Zagreb İndeks, Zagreb İndeks

ABSTRACT

MS THESIS

A STUDY OVER INVERSE DEGREE INDICES IN MONOGENIC SEMIGROUP GRAPHS

Beyza EMRE

Necmettin Erbakan University Institute of Science and Technology
Department of Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ

2025, 28 Pages

Jury
Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ

Prof. Dr. Emine Gökçen KOÇER

Prof. Dr. Ahmet Sinan ÇEVİK

Graph Theory is a mathematical theory with a wide range of applications. This theory, which provides solutions to many problems in both daily life and various scientific fields, has recently gained more attention. The thesis consists of six main chapters.

In the first section, the definition, areas of application, and history of graph theory are presented, followed by basic concepts and some special types of graphs.

In the second section, the sources used in the thesis have been researched and the content information has been presented.

In the third section, the Zagreb index is discussed.

The fourth section, focuses on the topic of Reverse Zagreb topological indices.

The fifth section, contains the results and recommendations section.

The sixth section, includes the references.

Keywords: Graph, Reverse Zagreb Index, Zagreb Index, Zero-Divisor Graph

ÖNSÖZ

Bu tezin hazırlanmasında bana rehberlik eden değerli danışmanım Prof. Dr. Nihat AKGÜNEŞ'e, göstermiş olduğu sabır, destek ve yönlendirmeleri için sonsuz şükran ve saygılarımı sunarım.

Graf Teorisi, matematiksel bir alan olarak, günümüzde birçok disiplinde uygulama bulmakta ve bu alanın gelişimi, problem çözme yöntemlerinin evriminde önemli bir rol oynamaktadır. Bu tezde, özellikle graf değişmezlikleri ve cebirsel graf teorisi üzerine yapılan güncel çalışmalara odaklanmış bulunmaktayım. Tezimi hazırlarken, bu alandaki derinlemesine literatür taramaları ve yapılan araştırmalar sayesinde, Graf Teorisi'nin güncel gelişmeleri hakkında daha fazla bilgi edinme fırsatı buldum.

Bu süreçte bana yardımcı olan, beni cesaretlendiren ve motive eden değerli aileme, sevgili arkadaşım Leyla'ya ve kıymetli eşim Tamer EMRE'ye de teşekkür etmek isterim. Onların sürekli desteği ve anlayışı, bu çalışmayı tamamlamamda büyük bir motivasyon kaynağı oldu.

Son olarak, bu tezin matematiksel düşüncenin ve bilimsel araştırmanın daha da gelişmesine katkı sağlamasını umuyorum.

Beyza EMRE

KONYA-2025

İÇİNDEKİLER

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

$\mathbb{Z}$	Tam Sayılar
$G(V,E)$	Graf
K_n	Tam graf
$K_{m,n}$	İki parçalı tam graf
T	Ağaç graf
S_n	Yıldız graf
C_n	Çevre graf
P_n	Yol graf
L_n	Ladder graf
$T_{r,s}$	Larva graf
W_n	Tekerlek graf
$d(u,v)$	u ve v köşeleri arası uzaklık
$\mathrm{Rad}(G)$	G nin radiusu
$Diam(G)$	G nin çapı
$\chi^{(G)}$	Renklendirme sayısı
$\triangle(G)$	Maksimum derece
$\Gamma(R)$	Sıfır-bölen halka
$\sigma(G)$	Minimum derece

Kısaltmalar

$M_1(G)$	*G* grafının birinci Zagreb indeksi
$M_2(G)$	*G* grafının ikinci Zagreb indeksi
$\Gamma(S_M^n)$	Ters Zagreb indeksi
girth(G)	*G* grafının girthi

1. GİRİŞ

Graf teorisi, matematiğin yapıya dair bağlantılarını araştıran alandır. Graflar, şahıslar, hareketler, ölçüler ve normal yaşamda karşımıza çıkan sorunlar vb. nesneler arasındaki ilişkilerin doğru parçalarla ve düğümlerle gösterildiği modellerdir. Karmaşık sorunları düzenleyip görselleştirerek bu tür modelleme, daha basit ve anlaşılır hale getirir.

Kökeni çok eski zamanlara dayansa da, modern graf teorisinin temelleri 1736 yılında Euler'in Königsberg köprü problemi üzerine yazdığı makale ile atılmıştır. Bir arkadaşının bu problemin çözümü olup olmadığını sorması üzerine Euler, yalnızca bu spesifik sorunu değil, genel bir teoriyi de geliştirmiş ve bu problemin çözülmesinin mümkün olmadığını ortaya koymuştur. Graf yapıları, doğası gereği basit ve yaygın olarak karşılaşılan yapılar olduğundan, farklı bilim insanları tarafından bu yapılar bazen farklı adlarla anılmıştır.

Bugün itibariyle graf teorisi birçok bilim dalında çalışmada bulunan araştırmacılara önemli katkılar sunmaktadır. Bununla birlikte pek çok dalıyla da yakından ilişki içerisinde bulunan matematiğin grup teorisi gerek olasılık gerek topoloji ve sayısal analiz benzeri konularla da ilişkilidir.

Graf teorisinin önemli konularından biri graf etiketlemesidir. Renklerde yeterli sayı bulunamaması nedeniyle yapılmaya sayılarla başlanılan grafik etiketleme önceleri bir renk problemi olarak sunulmuştur. Ayrıca gerçekleşme süreci kenarlara, düğümlere belirli kaideler çerçevesinde tam sayılar kümesinden elemanlar atayarak graf etiketleme oluşturulmuştur.

Bir graf, en basit şekilde noktalar ve bu noktaları birbirine bağlayan çizgilerden oluşur. Bu noktalar grafın köşeleri, çizgiler ise grafın kenarları olarak adlandırılır. Bir kenar, iki köşeyi birleştiren düz bir çizgi ya da eğri olabilir. Bazen bu eğri, bir köşeden başlayıp aynı köşeye geri dönebilir ve buna döngü denir. Bir graf, düz bir düzlemde çizilebileceği gibi, daha yüksek boyutlu yüzeylerde de çizilebilir.

Graf teorisi, karmaşık ve zor gibi görünen problemleri anlamak ve bu problemlerin çözümlerini kolaylaştıran yöntemler sunan bir alandır. Bu nedenle, birçok farklı disiplinle ortak uygulama alanlarına sahiptir. Graf teorisi ile cebirsel yapılar arasındaki ilişki ise 1988 yılından itibaren bir ortak çalışma alanı oluşturmuş ve bu işbirliği, her iki alana da farklı bakış açıları kazandırarak günümüze kadar pek çok önemli çalışmayı ortaya çıkarmıştır.

Sonuç olarak, graf etiketleme teorisi başlangıçta renklerle sınırlı olsa da, zamanla sayılarla yapılan etiketleme yöntemlerine dönüşmüş ve bu yöntemler, çeşitli kurallar ve süreçler çerçevesinde graf teorisinin önemli bir bileşeni haline gelmiştir. Bu etiketleme, graf yapılarının daha derinlemesine incelenmesini ve grafiklerin çözümü için farklı stratejilerin geliştirilmesini sağlar.

Kimya, fizik ve matematik gibi disiplinlerde, karmaşık yapıların analizi için çeşitli sayısal indeksler geliştirilmiştir. Bu indeksler, moleküler yapıları ve ağ teorilerini daha iyi anlamak, sistemlerin özelliklerini analiz etmek için kullanılır. Bu yazıda, özellikle "Ters Zagreb İndeksi" üzerinde durulacaktır. Ters Zagreb indeksi, grafik teorisi ve moleküler kimyada önemli bir yer tutar. Bu indeks, bir molekülün yapısını anlamada ve özelliklerini tahmin etmede kullanılan güçlü bir araçtır.

Ters Zagreb indeksi, bir molekülün veya grafiğin topolojik yapısını sayısal bir değere indirger. Bu indeks, genellikle bir graftaki kenarların ve düğümlerin belirli özelliklerini kullanarak hesaplanır. Matematiksel olarak, ters Zagreb indeksi şu şekilde tanımlanabilir:

Bir graftaki her bir kenar için, bu kenarın bağlı olduğu iki düğümün derecelerinin çarpımı alınır. Ters Zagreb indeksi, bu çarpımların toplamıdır. Başka bir deyişle, bir graftaki her kenar için, bu kenarın uçları olan iki düğümün derecelerinin çarpımının toplamına eşittir.

Ters Zagreb indeksi, özellikle moleküler yapıları temsil eden grafikleri analiz etmek için kullanılır. Moleküler yapılar, atomlar arasındaki bağlarla temsil edilen graflar olarak modellenebilir. Atomlar düğüm, bağlar ise kenar olarak kabul edilir. Moleküllerin özelliklerini anlamak için bu yapılar arasındaki ilişkiler ve özellikler üzerinde çalışılır.

Ters Zagreb indeksinin bazı temel özellikleri şunlardır:

1. **Simetrik Olması**: Ters Zagreb indeksi, grafın simetrik yapısını yansıtır. Yani, bir graftaki kenarın sırasının değiştirilmesi, indeksin değerini değiştirmez.
2. **Topolojik Duyarlılık**: Ters Zagreb indeksi, graftaki düğümlerin ve kenarların ilişkilerine duyarlıdır. Bu, indeksin, moleküllerin topolojik yapılarındaki değişiklikleri algılayabilmesini sağlar.

3. **Matematiksel Uygulamalar**: Ters Zagreb indeksi, graf teorisi bağlamında da kullanılır. Özellikle, grafiklerin özelliklerini analiz etme ve sınıflandırma gibi uygulamalar için önemli bir araçtır.
4. **Kimyasal Özelliklerle İlişki**: Kimyasal moleküllerin yapısal özelliklerini yansıttığı için ters Zagreb indeksi, kimyasal reaktivite, biyolojik aktivite, ve diğer fiziksel özelliklerle ilişkilidir.

Zagreb indeksi ve ters Zagreb indeksi arasındaki fark, hesaplama şekillerinden kaynaklanır. Zagreb indeksi, her bir kenar için düğümlerin derecelerinin toplamını alırken, ters Zagreb indeksi her kenar için düğümlerin derecelerinin çarpımını alır. Bu küçük fark, her iki indeksin de moleküllerin veya grafiklerin farklı özelliklerini yansıtmasına neden olur. İki indeks de kimyasal ve biyolojik analizlerde kullanılır, ancak ters Zagreb indeksi daha hassas sonuçlar verebilir çünkü kenarların bağlı olduğu düğümlerin derecelerinin çarpımını dikkate alır.

Ters Zagreb indeksin, graf teorisi ile olan ilişkisi, matematiksel modelleme ve analizlerde oldukça kullanışlıdır. Gelecekte, ters Zagreb indeksinin daha fazla uygulama alanı bulacağı ve bilimsel araştırmalara katkı sağlayacağı beklenmektedir.

1.1. Graflar ve Özellikleri

Graf, bir dizi düğüm (veya vertex) ve bu düğümleri birleştiren kenarlardan (veya edge) oluşan matematiksel bir yapıdır. Graf teorisinde, düğümler genellikle nesneleri, kenarlar ise bu nesneler arasındaki ilişkileri veya bağlantıları temsil eder.

Tanım 1.1.1.

Elemanları noktalardan oluşturan V kümesinden ve ayrıt (kenar) olarak adlandırılan E kümesinin elemanlarından sıralı olmayan ikililerden oluşan bir kümeden oluşan bir yapı düşünelim. Nokta olarak V kümesinden ve ayrıt olarak E kümesinden oluşan diyagrama *graf* denir. $G=(V,E)$ ile gösterilir. G grafının, $V(G)=\{v_1,v_2,...,v_n\}$ köşeler kümesinin eleman sayısına G ‘nin mertebesi adı verilir ve $n(G)$ ile sembolleştirilir. Diğer yandan $E(G)=\{e_1,e_2,...,e_m\}$ kenar kümesinin eleman sayısına boyut denir ve $m(G)$ ile gösterilir.

Tanım 1.1.2.

Bir noktadan bir noktaya ulaşmak için her noktanın bir defa kullanılmasına yol adı verilir. *n-1, n* noktalı bir yolda kullanılan kenar sayısıdır. *Yol uzunluğu* ise noktalar arası gidişte kenar sayısında kullanılır.

Γ grafında v_1 ile v_2 noktaları arasındaki tüm yollar içinde en kısa olanın uzunluğuna; v_1, v_2 'nin *mesafesi (distance)* denir ve $d_\Gamma(v_1, v_2)$ şeklinde sembolleştirilir. Eğer v_1 ve v_2 noktaları arasında bir yol yoksa

$$d_\Gamma(v_1, v_2) = \infty$$

kabul görür.

Tanım 1.1.3.

Grafın *tam graf* ismiyle adlandırılması ise bir grafta kesin olarak her iki nokta arasında bir kenar bulunmasıyla sağlanır. K_n ile sembolize edilen, n köşeli bir tam graftır.

Tanım 1.1.4.

Herhangi bir grafın noktaları arasındaki en kısa uzunluğa grafın *yarıçapı (radius)* adı verilir aynı zamanda $rad(\Gamma)$ $\min\{e(v) : v \in V(\Gamma)\}$ şeklinde sembolleşir.

Tanım 1.1.5.

Grafın *çapı (diameter);* sıradan bir grafın noktaları arasındaki en büyük uzunluğa denir, $diam(\Gamma)$ $\max\{e(v) : v \in V(\Gamma)\}$ ile sembolleşir. Bütün noktalar birbiriyle ilişkili olduğunda tam bir grafta $diam(\Gamma) = 1$ dir.

Tanım 1.1.6.

Γ grafi $V \in \{v_0, v_1, ..., v_n\}$ nokta kümesine ve E kenar kümesine sahip

$\Gamma = (V, E)$ bir basit graf olsun. Eğer $e \in E \Leftrightarrow E = \{v_0, v_i\}, i \in (1, 2, ..., n)$ gösterilebiliyorsa $G = G(V, E) = (V, E)$ basit grafına n kenara ve n -1 noktaya sahip *yıldız graf* denir aynı zamanda S_n ile gösterilir.

Tanım 1.1.7.

Parçalı graf, graf teorisinde, noktalarının birden fazla disjoint (kesişmeyen) kümeye ayrıldığı bir graf türüdür. Yani, bir parçalı graf, noktalar kümesinin birden fazla alt kümeye bölündüğü ve bu kümeler arasında kenarların yer aldığı bir graftır.

Tanım 1.1.8.

Mükemmel (perfect) graf bir grafın indirgenmiş bütün alt grafları için klik ve kromatik sayısının eşit olmasıdır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Berge (1962), "*The Theory of Graphs and Its Applications*" adlı çalışmalarında perfect grafları ortaya çıkarmak için faydalanılabilecek Berge Graf şeklinde ad verilen graf ile özelliklerini tanıtmıştır. Bununla birlikte bu araştırmada genel graflar bilgisi de mevcuttur. Bu eser graf teorisinin temel ve ileri düzey konularını kapsamlı bir şekilde ele alan önemli bir kaynaktır. Kitap, hem matematiksel graf teorisini hem de bu teorinin çeşitli pratik alanlardaki uygulamalarını detaylandırır. Grafların özelliklerinden algoritmalara, planarlık ve renklemeye kadar birçok konuyu derinlemesine inceleyerek, alandaki bilgiye katkıda bulunan önemli bir referans kaynağıdır.

Bondy ve Murty (1976), "*Graph theory with applications*" adlı araştırmalarında önemli graf parametrelerinden etiketlendirme adeti için grafın max. derecesi ile bağlantılı bir üst sınır bulmuşlardır.

Allan ve Laskar (1978), "*On Domination And Independent Domination Numbers Of a Graph*" adını verdikleri eserlerinde, baskınlık sayısı ve baskınlık sayısı çeşitlerinden biri olan bağımsız baskınlık sayılarıyla alakalı çalışma yapmıştır.

Beck (1988), graf ile halka teorisini bir araya getirmiş, ilk çalışmayı yapmıştır. "*Coloring of Commutative Rings*" adlı yapıtında bunu sunmuştur. Bununla birlikte değişmeli halkaların sıfır bölen graflarını açıklayarak bu grafların etiketlenmesiyle meşgul olmuştur. Bu eser genellikle cebirsel yapılar ve komütatif halkalarla ilgili matematiksel bir konuyu ele alır. Ayrıca komütatif halkaların bazı özelliklerini ve bu halkaların üzerinde yapılan "renkleme" işlemlerini inceleyen bir matematiksel çalışmayı yansıtır. Komütatif halkalar, sıklıkla cebirsel yapıların temel örneklerinden biri olarak incelenir ve burada "renkleme" (coloring) terimi genellikle belirli özelliklere veya yapısal sınıflandırmalara göre elemanların düzenlenmesiyle ilgili olabilir. Bu tür çalışmalar, komütatif halkaların teorisini geliştirmek veya bu halkaların davranışlarını daha iyi anlamak amacıyla yapılır.

Erdös (1989), "*Pach, Pollack ve Tuza'nın Radius, Diameter and Minimum Degree*" isimli araştırmalarında grafın yarıçapı, uzaklığı ile ilgili sadece nokta adetini ve min. mertebesini kapsayan çerçeveler bulmuşlardır.

Anderson ve Nasser (1991), "*Beck's Coloring of Commutating Rings*" adlı araştırmasında sıfır bölen grafların etiketleme adeti belirttiği problemi incelemiştir.

DeMeyer, McKenzie ve Schneider (2002), "*The Zero-Divisor Graphs of a Commutative Semigroup*" yapıtında sıfır bölen grafları değişmeli yarı gruplar üstünde araştırmıştır. Bu çalışma, komütatif semigruplarda sıfır-bölen grafları inceleyen bir araştırmadır. Çalışmada sıfır-bölen elemanların graf temsili, bu elemanlar arasındaki ilişkiler ve semigrubun yapısal özellikleri analiz edilir. Sıfır-bölen graflarının, semigrup teorisinin daha derinlemesine anlaşılmasında ve sıfır-bölenlerin yapı ve özelliklerinin keşfedilmesinde önemli bir rolü vardır. Bu çalışma, semigrup teorisinin, özellikle sıfır-bölenlerin analizi açısından önemini vurgular ve komütatif semigrup yapılarıyla ilgili matematiksel araştırmalara katkı sağlar.

Gross ve Yellen (2004), "*Handbook of Graph Theory*" graf teorisi alanında kapsamlı bir referans kaynağıdır. Matematiksel kuramları, algoritmalardan uygulamalara kadar geniş bir yelpazede konuları ele alır ve bu alandaki önemli konuları derinlemesine inceler. Graf teorisinin hem teorik hem de pratik yönlerini ele alarak, alandaki uzmanlar ve öğrenciler için temel bir başvuru kaynağıdır.

DeMeyer (2005), "*Zero-Divisor Graphs of Semigroups*" isimli araştırmasında ise yarı grupların değişmeli olmadığı hallerde de yarı gruplar için sıfır bölen graf araştırmalarını sürdürmüştür.

Arumugam ve Velammal (2007), "*Edge Domınatıon In Graphs*" adlı araştırmalarında, graflarda edge baskınlık sayıları ve bunlara bağlı olarak bazı graflarda ağaçların ve tek döngülü grafların özelliklerini gösterdiği de verilmiştir.

Atapour ve Soltankhah (2008), "*On Total Dominating Sets in Graphs*" adlı araştırmalarında baskınlık sayısı ve min. mertebeden bahsedilmiştir . Bununla birlikte total baskınlık sayısının alt ve üst sınırlarıyla ilgili çalışılmıştır.

Anderson ve Livingston (2008), "*The Zero-Divisor Graph of Commutative Ring*" isimli yapıtlarında sıfır bölen graflar üzerinde değişmeli halkaların sıfır bölen graflarıyla birlikte pek fazla teorem ispatlamıştır. Sıfır bölen grafıyla değişmeli halkanın alakalı olduğu ve uzaklığının 3'e eşit veya 3'ten küçük olduğu verilmiştir. Bu eser, sıfır-bölücü graf kavramını ve bu grafları kullanarak komütatif halkaların incelenmesini konu alır. Matematiksel cebirsel yapılar üzerine yapılan bu çalışma, sıfır-bölücülerin ilişkilerini görsel ve yapısal olarak analiz etmenin bir yoludur. Bu tür bir yaklaşım, halkaların teorisini ve özellikle komütatif halkaların çeşitli özelliklerini derinlemesine anlamayı sağlar.

Anderson ve Badawi (2008), "*On the Zero-Divisor Graph of a Ring*" adlı çalışma, sıfır bölgesi grafları üzerine yapılan derinlemesine matematiksel incelemeleri sunar. Bu çalışma, komütatif halkalar üzerindeki sıfır bölgesi grafiğini ve bu grafiğin sahip olduğu yapısal özellikleri detaylı bir şekilde araştırır. Sıfır bölgesi grafiklerinin analizi, halkaların yapısal özellikleri hakkında değerli bilgiler sunar ve bu grafiklerin incelenmesi, halkaların daha iyi anlaşılmasına katkıda bulunur. Ayrıca, bu tür çalışmalar daha geniş teorik sonuçlara ve pratik uygulamalara olanak tanıyabilir.

DeMeyer, Greve, Sabbaghi ve Wang (2010), "*The Zero-Divisor Graph Associated to a Semigroup*" adını verdikleri araştırmalarında graf ve soyut kavramları bir araya alarak sıfır bölen grafları anlamak için gereken kenar sayısının, alt sınırını bulmuşlardır.

Vargör (2010), "*Graflarda Baskınlık Ve Ortalama Baskınlık Sayısı*" adlı doktora tezinde bağlantılılık sayısı, örtü sayısı, bağımsızlık sayısı, baskınlık sayısı gibi ölçümlerle çalışılmıştır. Bu tezde, ortalama baskınlık sayısı adı verilen yeni bir ölçüm tanımlanmıştır.

Akgüneş ve Togan (2012), "*Some Graph theoretical properties over zero-divisor graphs of special finite commutative rings*" adlı eserlerinde, sonlu değişmeli halkalar üzerinde sıfır bölen bir grafın bitişiklik matrisi üzerinde çalışmışlardır. Bu eser sıfır bölgesi grafikleri ve sonlu komütatif halkalar arasındaki ilişkiyi inceleyen derinlemesine bir çalışmadır. Çalışma, sıfır bölgesi grafikleri ile ilgili çeşitli teorik özellikleri keşfeder ve bu grafiklerin cebirsel yapıların incelenmesinde nasıl kullanılabileceğini tartışır. Graf teorisi ile cebirsel yapılar arasındaki bu etkileşim, matematiksel problemlerin çözülmesinde önemli bir yaklaşım sunar.

Akgüneş (2012), "*Graf Parametleri ve Cebirsel Yapılara Grafsal Yaklaşımlar*" adlı çalışmasında düzensizlik indeksi kullanarak bir grafın yarıçapı için güçlü bir ayrım bulunmuştur. Bununla birlikte monojenic yarı gruplar üzerinde tanımlanan özel grafların topolojik indekslerinin monojenik yarı grubun derecesiyle ifade edileceğini belirtmiştir. Eser, matematiksel yapılar arasındaki ilişkileri derinlemesine inceleyerek, bu yapıların analizini kolaylaştıracak yeni bakış açıları ve yöntemler sunmaktadır. Hem teorik hem de uygulamalı olarak önemli katkılar sağlamaktadır ve bu alandaki matematiksel araştırmalar için değerli bir kaynaktır.

Akgüneş ve Çevik (2013), "*A new bound of radius of irregularity index*" adlı eserlerinde yarıçap(radius) bir graf parametresi için düzensizlik (irregularity) indeksi yardımı ile güçlü bir üst sınır bulmuşlardır. Bu eser graf teorisi alanında irregularity index (düzensizlik indeksi) için yeni bir üst sınır öneren önemli bir araştırmadır. Çalışma, bu indeksi sınırlandırarak grafik yapılarının daha homojen hale gelmesini amaçlamakta ve bunun matematiksel ispatlarını sunmaktadır. Bu yeni üst sınır, grafik teorisi ve ağ yapılarındaki analizler için önemli bir katkı sağlamaktadır.

Damir Vukicevic, Qiuli Li, Jelena Sedlar, Tomislav Doslic (2018), "*Lanzhou index*" isimli araştırmalarında yeni bir indeks olan Lanzhou topolojik indeksini tanımlamışlar ve bazı karşılaştırma veri kümelerinde bulunan birçok indeksten daha iyi bir performans gösterdiğini bulmuşlardır. Lanzhou Index, graf teorisi ve topolojik indeksler alanındaki önemli araştırmalardan biridir ve özellikle kimya, biyoloji ve sosyal ağlar gibi disiplinlerde ağ yapılarının analizinde faydalıdır. Bu indeks, ağların yapısal ve dinamik özelliklerini anlamak için matematiksel bir araç sunar ve çeşitli alanlarda önemli uygulamalara sahiptir.

Ediz (2018), "Maximal Graphs of The First Reverse Zagreb Beta Index" isimli çalışmasında birinci inverse Zagreb beta indeksine göre maksimal grafları karakterize etmişlerdir. Bu açıdan iki ayrı graf çeşidinin sonuçları literatüre kazandırılmıştır.

Kulli (2018), "Reverse Zagreb and reverse hyper-Zagreb indices and their polynomials of rhombus silicate networks" isimli makalesinde eşkenar dörtgen silikat ağları üzerinde reverse Zagreb indeksleri ve ayrıca hiper reverse Zagreb indekslerini hesaplamış olup bunların kesin sonuçlarını ortaya koymuştur. Bu çalışma reverse Zagreb indekslerinin uygulaması bakımından önem arz etmektedir.

Fengwei Li, Xueliang Li ve Hajo Broersma (2020), "*Spectral Properties of Inverse Sum Indeg index of Graphs*" isimli çalışmalarında cebirsel graf teorisinin graf özelliklerinin bazı matrislerin cebirsel niteliklerine nasıl yansıtıldığı ya da yansıtılıp yansıtılamadığını araştırmışlardır. Bu çalışma graf teorisinin spektral özelliklerini inceleyen bir çalışmadır. Çalışma, inverse sum indegree index kavramını ele alarak bu indeksin spektral özelliklerle ilişkisini araştırmaktadır. Graf teorisi, ağ yapıları ve optimizasyon problemleri gibi alanlarda önemli bir yere sahip olan bu çalışma, matematiksel analizler ve algoritmalarla graf yapılarının daha verimli bir şekilde modellenmesi için önemli katkılar sunmaktadır.

Abeer M. Albalahi ve Akbar Ali (2022), "*On the Inverse Symmetric Division Deg Index of Unicyclic Graphs*" adını verdikleri araştırmalarında bağlantılı ve sonlu graflar üzerine çalışma yapmışlardır. Bu eser, unicyclic graph'lar üzerindeki inverse symmetric division degree index indeksinin matematiksel ve yapısal özelliklerini detaylı bir şekilde inceleyen önemli bir çalışmadır. Bu araştırma, graf teorisi**,** topolojik indeksler ve spektral analiz gibi alanlarda daha geniş çaplı araştırmalara önemli katkılarda bulunmaktadır. Çalışma, ağların yapısını ve düğümler arasındaki ilişkileri anlamak amacıyla sağlam bir teorik temel sunmaktadır. Ayrıca SDD indeksi üzerinde bir çalışma yapmışlar ve bu indeksin uygulanabilir ve pratik olduğunu, performansının daha birçok popüler topolojik indeksin performansını aştığını belirlemişlerdir

Akbar Ali, Abeer M. Albalahi, Abdulaziz M. Alanazi, Akhlaq Ahmad Bhatti, Amjad E. Hamza (2022), "*On the Maximum Sigma Index of K-cyclic Graphs*" adlı araştırmalarında sonlu graflar ile ilgili çalışmışlardır.

Qian-qian, Liu, Qiu-li Li, He-ping Zhang (2022), "*Unicyclic graphs with extremal Lanzhou index*" isimli araştırmalarında tek çevrimli grafları minimum ve maksimum Lanzhou indeksleri ile ayrı ayrı belirleme üzerine çalışmalar yapmışlardır. Bu çalışma, unicyclic graph'lar üzerinde yapılan bir analiz olup, bu grafiklerin Lanzhou indeksinin ekstremal değerlerini araştırmaktadır. Bu tür çalışmalar, graf teorisi alanında yeni ve önemli sonuçlar ortaya koyarak ağ yapılarının daha verimli analiz edilmesine olanak tanımaktadır.

Akbar Ali, Yilun Shang, Darko Dimitrov, Tamas Retic (2023), "*Ad-Hoc Lanzhou Index*" isimli eserlerinde topolojik indexler kavramından yola çıkarak geçici Lanzhou indeksinin tanımını vermişlerdir. Ad-Hoc Lanzhou Index**,** graf teorisinin daha özel ve gelişmiş analizlerine olanak tanıyan, düğüm ve kenar ilişkilerini daha ayrıntılı şekilde değerlendiren bir topolojik indeks türüdür. Bu indeks, farklı alanlarda ağ yapılarının daha verimli analiz edilmesine yardımcı olabilir ve özellikle kimya**,** biyoloji ve sosyal ağlar gibi disiplinlerde önemli bir rol oynar.

Cangül (2024), "QSPR model for Bond Energy of Y-junction nanotubes through M, NM-polynomials based on reverse, reduced reverse degree and neighborhood degree based topological indices" isimli çalışmasında, M ve NM polinomlarının graf teorisinde önemli kavramlar olduğundan bahsetmiş olup, grafların eşleşme yapılarını (M polinomları) ve eşleşmeyen kenarlarını (NM polinomları) incelemişlerdir.

3. ZAGREB İNDEKSİ

Zagreb indeksi, kimya ve özellikle moleküler yapılar üzerinde yapılan analizlerde önemli bir yer tutan, graf teorisi temelli bir hesaplama aracıdır. Graf teorisi, matematiksel bir alan olarak, çeşitli nesneler arasındaki bağlantıları ve bu bağlantıların özelliklerini inceleyen bir disiplindir. Bu teorinin, moleküler yapıların analizi ve kimyasal bileşiklerin incelenmesinde güçlü bir uygulama alanı vardır. Bu bağlamda, Zagreb indeksi kimyasal moleküllerin yapısal özelliklerini anlamak için kullanılan önemli bir topolojik indekstir. Graf teorisi ile Zagreb indeksi arasındaki bağlantı, özellikle moleküler yapılar ile bu yapıların kimyasal özellikleri arasındaki ilişkiyi modellemek için kullanılır.

Zagreb indeksi, bir molekülün yapısal özelliklerini ölçmek için kullanılan bir topolojik endekstir. Bu endeks, özellikle karbon-oksijen bağları gibi kimyasal bağların yapısal ve kimyasal özelliklerini yansıtan bir graf teorisi aracıdır. Zagreb indeksi, molekülün topolojik yapısını dikkate alarak, onun kimyasal özelliklerine dair önemli bilgiler sunar.

Bir grafın Zagreb indeksini hesaplamak için kullanılan iki yaygın tür vardır:

Tanım 3.1.

Birinci Zagreb İndeksi ($M_1(G)$): Her kenarın, bağlı olduğu iki düğümün derece değerlerinin çarpımına eşittir. Bu, grafın tüm kenarları için bu çarpımların toplamına eşittir. Matematiksel olarak, birinci Zagreb indeksi şöyle ifade edilir:

$$M_1(G) = \sum_{(i,j)\in E} \deg(i).\deg(j)$$

Burada $\deg(i)$ ve $\deg(j)$ düğümlerinin derece değerleridir, yani her bir düğümdeki bağlı kenar sayısıdır ve E, kenar kümesidir.

Tanım 3.2.

İkinci Zagreb İndeksi ($M_2(G)$): İkinci Zagreb indeksi ise, her kenarın bağlı olduğu düğümlerin derece değerlerinin karelerinin toplamına eşittir. İkinci Zagreb indeksi şu şekilde tanımlanır:

$$M_2(G) = \sum_{(i,j)\in E} (\deg(i))^2.(\deg(j))^2$$

Bu indekslerin her biri, bir molekülün fiziksel ve kimyasal özellikleri ile korelasyon gösteren sayısal değerler sunar. Örneğin, birinci Zagreb indeksi, genellikle moleküllerin enerji seviyelerini ve kimyasal reaktivitesini tahmin etmede kullanılır.

Zagreb indeksi, graf teorisi ile doğrudan ilişkilidir çünkü her iki kavram da yapısal özelliklerin analizine dayanır. Bir molekülün kimyasal yapısını incelemek için kullanılan Zagreb indeksi, aslında molekülün graf olarak modellenmiş halinin analizine dayanır. Bu bağlamda:

- **Düğüm Derecesi:** Her bir atom, grafın bir düğümüdür ve bağlı olduğu diğer atomlarla olan kimyasal bağlar, kenarları temsil eder. Düğüm derecesi, bir atomun diğer atomlarla olan bağ sayısını ifade eder. Bu özellik, Zagreb indekslerinin hesaplanmasında temel bir rol oynar.
- **Kenar Bağlantıları:** Molekül içindeki her bir kimyasal bağ, bir kenar olarak kabul edilir. Zagreb indeksi, bu kenarların hangi atomlara bağlandığını dikkate alarak bir molekülün kimyasal özelliklerini modellemeye yardımcı olur.
- **Topolojik Özellikler:** Zagreb indeksi, bir molekülün topolojik yapısını temsil eder. Molekülün kimyasal özellikleri ile yapısal özellikleri arasındaki ilişkiyi matematiksel olarak ifade etmek için graf teorisinin araçları kullanılır.

Zagreb indeksi, graf teorisinin teorik araçlarını kullanarak moleküler yapıyı daha anlaşılır hale getirir. Bu, özellikle kimyasal bileşiklerin fiziksel özelliklerini anlamada ve kimyasal reaksiyonları tahmin etmede faydalıdır. Zagreb indeksleri, ayrıca moleküller arasındaki yapısal benzerlikleri değerlendirmede ve yeni bileşiklerin keşfi sırasında da önemli bir rol oynar.

Zagreb indeksi, graf teorisi ile güçlü bir şekilde bağlantılı bir matematiksel araçtır ve moleküler yapıları analiz etmek için etkili bir yöntem sunar. Hem kimyasal yapıları anlamak hem de bu yapıları kullanarak fiziksel özellikler tahmin etmek için kullanılan bu indeks, moleküler biyoloji, kimya ve ilaç keşfi gibi birçok alanda büyük bir öneme sahiptir. Graf teorisinin sunduğu matematiksel araçlarla, Zagreb indeksi, moleküllerin yapısal ve kimyasal analizini daha derinlemesine yapabilmeyi mümkün kılar.

4. TERS (REVERSE) ZAGREB İNDEKSİ

Graf teorisi, matematiksel nesneler arasındaki bağlantıları inceleyen bir alandır. Kimya, biyoloji, bilgisayar bilimi gibi birçok disiplinde, graf teorisinin araçları, çeşitli yapıları modellemek ve analiz etmek için kullanılmaktadır. Bu bağlamda, graf teorisi temelli indeksler, özellikle kimyasal yapılar ve biyolojik ağlar gibi karmaşık sistemleri anlamada önemli bir rol oynamaktadır. Bu indekslerden biri de Ters Zagreb İndeksidir (Reverse Zagreb Index, RZI). Bu indeks, grafın topolojik özelliklerini yansıtan bir sayısal değerdir ve özellikle moleküler yapıların analizinde önemli bir yer tutar.

Tanım 4.1.

Ters Zagreb indeksi, bir grafın topolojik özelliklerine dayalı bir hesaplama aracıdır ve Zagreb indeksinin tersine bir hesaplama yapar. Ters Zagreb indeksi, özellikle moleküler graf teorisi bağlamında kimyasal bileşiklerin özelliklerini analiz etmek için kullanılır. Bu indeks, her kenarın bağladığı düğümlerin derece değerlerinin tersinin karelerinin toplamı olarak hesaplanır. Matematiksel olarak, ters Zagreb indeksi şu şekilde ifade edilir:

$$\Gamma(S_M^n) = \sum_{(i,j)\in E} \left[(r(\deg(i))^2 . (r(\deg(j))^2 \right]$$

Burada, $\deg(i)$ ve $\deg(j)$, düğümlerin derece değerleridir (yani her düğümdeki bağlı kenar sayısı), ve E grafın kenar kümesini temsil eder. (Cangül, 2024)

Ters Zagreb indeksi, grafın yapısal özelliklerini gösteren önemli bir ölçüt olup, aşağıdaki bazı özelliklere sahiptir:

- **Düğüm Derecesinin Etkisi:** Ters Zagreb indeksi, düğümlerin derecelerine ters bir ilişki kurar. Yüksek dereceye sahip düğümler, daha düşük bir etkiye sahiptir. Bu, ters Zagreb indeksinin, grafın yoğunluğunu ve düğüm bağlantılarının etkileşimini daha farklı bir şekilde yansıttığı anlamına gelir.
- **Grafın Topolojik Yapısı:** Ters Zagreb indeksi, grafın topolojik yapısına dair önemli bilgiler sunar. Daha fazla düğüm ve kenar içeren graf yapıları, ters Zagreb indeksinin değerini artırabilir, ancak yüksek dereceli düğümlerin ters ilişkisi nedeniyle bu etki genellikle daha az belirgindir.

- **Azalan Değerler:** Ters Zagreb indeksi, genellikle grafın daha düşük dereceli düğümleri arasında daha fazla ağırlık taşır. Bu özellik, düşük dereceye sahip düğümlerin bağlantılarının daha önemli olduğu durumlar için kullanışlıdır.
- **Sabit Değerler ve Simetri:** Ters Zagreb indeksi, simetrik graf yapılarında belirli sabit değerlere sahip olabilir. Örneğin, tam bağlantılı (complete) graf gibi simetrik yapılar, ters Zagreb indeksinin hesaplanmasında özel sonuçlar doğurabilir.

Ters Zagreb indeksi, bir grafın yapısını analiz etmek ve çeşitli özelliklerini tahmin etmek için farklı alanlarda uygulanabilir. Özellikle kimyasal ve biyolojik ağların analizinde, ters Zagreb indeksinin bazı belirgin kullanım alanları bulunmaktadır:

- **Düşük Dereceli Düğümler:** Yüksek dereceli düğümlerin ters Zagreb indeksine etkisi daha azdır, bu da düğümlerin derecelerinin yüksekliğinin öngörülen genel yapısal özellikler üzerindeki etkisini azaltır.
- **Ağırlıklı Etki:** Ters Zagreb indeksi, özellikle ağın düşük dereceli düğümleri ve kenarları arasında daha belirgin bir etki yaratır. Bu, ağın daha zayıf bağlantılarının kritik noktalar olduğunu gösterir.
- **Monotoniklik:** Bazı grafiklerde ters Zagreb indeksinin monotonik bir özellik gösterdiği, yani ağdaki düğüm sayısının ve kenar sayısının artması ile indeksin sistematik olarak değişmesi gözlemlenebilir.

Ters Zagreb indeksi, graf teorisi ve kimyasal yapıların analizi için önemli bir matematiksel araçtır. Moleküler yapıların özelliklerini anlamada, ağ yapılarındaki zayıf noktaların belirlenmesinde ve ağ tasarımı optimizasyonlarında önemli bir rol oynamaktadır. Özellikle düşük dereceli düğümlerin etkisini yansıtan bu indeks, grafın genel yapısı ve topolojisi hakkında derinlemesine bilgi sağlar. Ters Zagreb indeksi, matematiksel hesaplamalarla birlikte, karmaşık sistemlerin daha iyi anlaşılmasına ve bu sistemler üzerinde yapılan uygulamaların iyileştirilmesine katkıda bulunur.

Teorem 4.1.1:

Herhangi bir monojenik yarı grup S_n^m için $\Gamma(S_n^m)$ grafının ters derece dizisi

$$r(DS(\Gamma(S_n^m))) = \left\{ n-1, n-2, \ldots, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - 1, \ldots, 2, 1 \right\}$$

dir.

İspat 4.1.1:

$\Gamma(S_n^m)$ grafında x köşesinin yalnızca x^n köşesine komşu olduğunu biliyoruz. Dolayısıyla bu köşenin derecesi 1 dir. Bu köşenin ters derecesi $n-1$'dir. x^2 köşesini ele alırsak, komşulukları x^n ve x^{n-1}'dir. Bu köşenin ters derecesi ise $n-2$'dir. Bu yöntemle devam edersek

- $x^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor - 1}$ köşesinin ters derecesi $\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1$
- $x^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor}$ köşesinin ters derecesi $\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$
- $x^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor + 1}$ köşesinin ters derecesi $\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$
- $x^{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor + 2}$ köşesinin ters derecesi $\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - 1$

olduğu görülür.

Aynı şekilde devam edersek;

- x^{n-1} köşesinin ters derecesi 2
- x^n köşesinin ters derecesi 1

dir.

Böylece ters derece dizisini elde ederiz. Ayrıca bu dizinin yalnızca iki teriminin aynı diğer terimlerinin farklı olduğunu söyleyebiliriz.

4.2. Algoritma

Hesaplamalarımızda kolaylıklar sağlamak ve topolojik nicelikler için ana sonuçları bulmak adına $\Gamma(S_n^m)$ özel grafının tanımından faydalanarak $\Gamma(S_n^m)$ üzerindeki noktaların komşulukları ile ilgili aşağıdaki algoritmayı yazabiliriz.

V_n : x^n köşesi kendisi hariç tüm x^{v_1} lere $(1 \le v_1 \le n-1)$ komşudur.

V_{n-1} : x^{n-1} köşesi kendisi hariç tüm x^{v_2} lere $(2 \le v_2 \le n-2)$ ve x^n köşesine (V_n ilk adımındaki) komşudur.

V_{n-2} : x^{n-2} köşesi kendisi hariç tüm x^{v_3} lere $(3 \le v_3 \le n-3)$, x^n köşesine (V_n ilk adımındaki) ve x^{n-1} köşesine (V_{n-1} ikinci adımındaki) komşudur.

Algoritmadaki verileri izleyerek, n nin tek sayı veya çift sayı olmasıyla ilişkin olarak iki durum elde ederiz:

n çift sayı ise :

$V_{\frac{n}{2}+2}$: $x^{\frac{n}{2}+2}$ köşesi sadece $x^{\frac{n}{2}-1}$, $x^{\frac{n}{2}}$ ve $x^{\frac{n}{2}+1}$ köşelerine değil, aynı zamanda x^n (V_n adımındaki), x^{n-1} (V_{n-1} adımındaki) , x^{n-2} (V_{n-2} adımındaki), … , $x^{\frac{n}{2}+3}$ ($V_{\frac{n}{2}+3}$ adımındaki) köşelere de komşudur.

$V_{\frac{n}{2}+1}$: $x^{\frac{n}{2}+1}$ köşesi sadece $x^{\frac{n}{2}}$ köşesine değil, aynı zamanda x^n (V_n adımındaki), x^{n-1} (V_{n-1} adımındaki), … , $x^{\frac{n}{2}+2}$ ($V_{\frac{n}{2}+2}$ adımındaki) köşelere de komşudur.

n tek sayı ise :

$V_{\frac{n+1}{2}+2}$: $x^{\frac{n+1}{2}+2}$ köşesi sadece $x^{\frac{n+1}{2}-2}$, $x^{\frac{n+1}{2}-1}$, $x^{\frac{n+1}{2}}$ ve $x^{\frac{n+1}{2}+1}$ köşelerine değil, aynı zamanda x^n (V_n adımındaki), x^{n-1} (V_{n-1} adımındaki), x^{n-2} (V_{n-2} adımındaki), … , $x^{\frac{n+1}{2}+3}$ ($V_{\frac{n+1}{2}+3}$ adımındaki) köşelere de komşudur.

$v_{\frac{n+1}{2}+1}$: $x^{\frac{n+1}{2}+1}$ köşesi sadece $x^{\frac{n+1}{2}-1}$ ve $x^{\frac{n+1}{2}}$ köşelerine değil, aynı zamanda x^n (V_n adımındaki), x^{n-1} (V_{n-1} adımındaki), x^{n-2} (V_{n-2} adımındaki), … , $x^{\frac{n+1}{2}+2}$ ($v_{\frac{n+1}{2}+2}$ adımındaki) köşelere de komşudur.

Bildiğimiz gibi d_1, d_2, … , d_n sembolleri sırasıyla $\Gamma(S_M^n)$ deki x, x^2, … , x^n noktalarının mertebelerini tanımlamış olsun. Şu durumu söylemeliyiz ki *derece dizileri* vb. başka adlarla noktaların mertebeleriyle bağlantılı pek çok araştırma bulunmaktadır. Aşağıdaki lemma, mertebeler arasındaki $d_1 \le d_2 \le \ldots \le d_n$ sıralı dizisini gösteren bu durum ile direkt bağlantılıdır. Bunun kanıtı, (Das, Akgunes ve Cevik, 2013) te olduğu halde, yukarıdaki algoritma ile de kolayca görülebilir.

Teorem 4.1.2:

Herhangi bir monojenik yarı grup S_M^n için, $\Gamma(S_M^n)$ grafının birinci ters Zagreb indeksi

$$r(M_1(\Gamma(S_M^n))) = \begin{cases} \dfrac{4n^3-3n^2+2n}{12} & ; \quad n \quad çift \quad ise \\[2ex] \dfrac{4n^3-3n^2+8n+3}{12} & ; \quad n \quad tek \quad ise \end{cases}$$

dir.

İspat 4.1.2:

İspatı *n* nin tek ve çift olma durumlarına göre inceleyelim:

1.Durum: *n* çift olsun:

$$r(M_1(\Gamma(S_M^n))) = \sum_{x^i \in V} \left(rd_i\right)^2 = (n-1)^2 + (n-2)^2 \ldots + \left(\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1\right)^2 + \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil^2 + \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil^2 + \left(\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - 1\right)^2 + \ldots + 2^2 + 1^2$$

$$= \sum_{x^i \in V} \left(rd_i\right)^2 = (n-1)^2 + (n-2)^2 \ldots + \left(\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1\right)^2 + \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil^2 + \left(\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - 1\right)^2 + \ldots + 2^2 + 1^2 + \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil^2$$

$$= \sum_{x^i \in V} \left(rd_i\right)^2 = (n-1)^2 + (n-2)^2 \ldots + \left(\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1\right)^2 + \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil^2 + \left(\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - 1\right)^2 + \ldots + 2^2 + 1^2 + \left(\frac{n}{2}\right)^2$$

$$= \frac{4n^3 - 3n^2 + 2n}{12}$$

elde edilir.

<u>2.Durum: n tek olsun:</u>

$$r(M_1(\Gamma(S_M^n))) = \sum_{x^i \in V} \left(rd_i\right)^2 = (n-1)^2 + (n-2)^2 \ldots + \left(\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil\right)^2 + \left(\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil\right)^2 + \ldots + 2^2 + 1^2$$

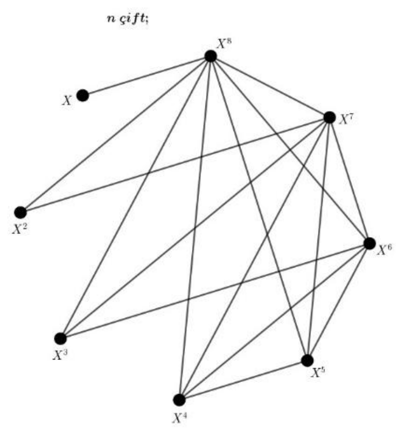
$$= \sum_{x^i \in V} \left(rd_i\right)^2 = (n-1)^2 + (n-2)^2 \ldots + \left(\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil\right)^2 + \ldots + 2^2 + 1^2 + \left(\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil\right)^2$$

$$= \sum_{x^i \in V} \left(rd_i\right)^2 = (n-1)^2 + (n-2)^2 \ldots + \left(\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil\right)^2 + \ldots + 2^2 + 1^2 + \left(\frac{n+1}{2}\right)^2$$

$$= \frac{4n^3 - 3n^2 + 8n + 3}{12}$$

elde edilir.

Örnek 4.1.1:



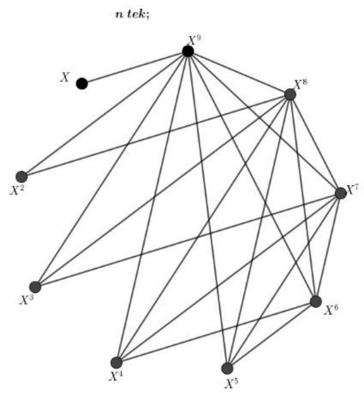
Şekil 4.1. 8 Köşeli Monojenik Yarı Grup Graf Örneği

$$r(M_1(\Gamma(S_M^8))) = 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 + 4^2 + 5^2 + 6^2 + 7^2$$

$$= 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 + 6^2 + 7^2 + 4^2$$

$$= \frac{4.8^3 - 3.8^2 + 2.8}{12}$$

$$= 156$$



Şekil 4.2. 9 Köşeli Monojenik Yarı Grup Graf Örneği

$$r(M_1(\Gamma(S_M^9))) = 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 + 5^2 + 6^2 + 7^2 + 8^2$$

$$= 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 + 6^2 + 7^2 + 8^2 + 5^2$$

$$= \frac{4.9^3 - 3.9^2 + 8.9 + 3}{12}$$

$$= 229$$

Teorem 4.1.3:

Herhangi bir monojenik yarı grup S_M^n için, $\Gamma(S_M^n)$ grafının ikinci ters Zagreb indeksi

$$r(M_2(\Gamma(S_M^n))) = \begin{cases} \frac{1}{48}\left(n^4 + 4n^3 + 2n^2 - 4n\right) & , \quad n \quad çift \quad ise \\ \frac{1}{48}\left(n^4 + 4n^3 + 2n^2 - 4n - 3\right) & , \quad n \quad tek \quad ise \end{cases}$$

şeklindedir.

İspat 4.1.3:

Şimdiki ana amacımız, mertebelerin toplam sayısına bağlı olarak $M_2(\Gamma(S_M^n))$ yi ayırt etmek olduğundan toplamı, aynı olmayan parçaların toplamı olarak ele almamız, bunların her bir parçasını ayrı ayrı toplamamız gereklidir. Hesaplamalar esnasında, noktaların mertebelerine hüküm vermek için çok sistemli yegane bir metot olduğundan Kısım 4.2 deki algoritmaya bakacağız.

n nin tek veya çift olma durumuna göre ispatı yapalım:

1. Durum: n çift olsun:

$r\ (M_2(\Gamma(S_M^n))) = rd_n rd_1 + rd_n rd_2 + rd_n rd_2 + \ldots + rd_n rd_{n-2} + rd_n rd_{n-1} +$

(V_n ile yazılan. Bu toplama T_n diyelim.)

$+rd_{n-1} rd_2 + rd_{n-1} rd_3 + \ldots + rd_{n-1} rd_{n-2} +$

(V_{n-1} ile yazılan. Bu toplama T_{n-1} diyelim.)

$+\ldots+$

$+rd_{\frac{n}{2}+2} rd_{\frac{n}{2}-1} + rd_{\frac{n}{2}+2} rd_{\frac{n}{2}} + rd_{\frac{n}{2}+2} rd_{\frac{n}{2}+1} +$

($V_{\frac{n}{2}+2}$ ile verilen. Bu toplama $T_{\frac{n}{2}+2}$ diyelim.)

$+rd_{\frac{n}{2}+1} .rd_{\frac{n}{2}}$

($V_{\frac{n}{2}+1}$ ile yazılan. Bu toplama $T_{\frac{n}{2}+1}$ diyelim.)

Sonuç olarak ikinci Zagreb indeksi

$$\sum_{vt \in E(G)} rd_v rd_t = T_n + T_{n-1} + \ldots + T_{\frac{n}{2}+1} + T_{\frac{n}{2}}$$

toplamı olarak yazılır.

Gayemize varmak amacıyla, bu ispatın başında gösterildiği üzere, her T_t ($\frac{n}{2}+1 \leq t \leq n$)'yi farklı farklı incelemeye gereksinim hissediyoruz. n çift olduğunda

$$\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil = \frac{n}{2}$$

dir.

$$T_n = 1(n-1) + 1(n-2) + 1(n-3) + \ldots + 1.3 + 1.2 + 1.\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$$

dir.

T_n deki şekilde benzer verileri kullanarak,

$$T_{n-1} = 2(n-2) + 2(n-3) + 2(n-4) + ... + 2.3 + 2.\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$$

,

$$T_{n-2} = 3(n-3) + ... + 3(n-4) + 3.\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$$

,

.

.

.

$$T_{\frac{n}{2}+1} + T_{\frac{n}{2}} = \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil . \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$$

dir.

Böylece,

$$T_n + T_{n-1} + ... + T_{\frac{n+1}{2}+2} + T_{\frac{n+1}{2}+1} = \sum_{k=1}^{\frac{n}{2}} k \left[\frac{n^2 - 2n(k-1) - 2k}{2} \right]$$

$$= \frac{1}{48}\left(n^4 + 4n^3 + 2n^2 - 4n\right)$$

şeklinde genelleme yapılır.

.

2. Durum: n tek olsun:

n'nin çift olması durumunda incelediğimiz T_n toplamının tek sayılar için değişimini inceleyelim:

$$T_n = 1.(n-1) + 1.(n-2) + ... + 1.3 + 1.2 + 1.\left(\frac{n+1}{2} \right)$$

$$T_{n-1} = 2(n-2) + 2(n-3) + 2(n-4) + ... + 2.3 + 2.\left(\frac{n+1}{2} \right)$$

.

.

.

$$T_{\frac{n}{2}+1} + T_{\frac{n}{2}} = \left(\frac{n-1}{2}\right)(n+1)$$

dir.

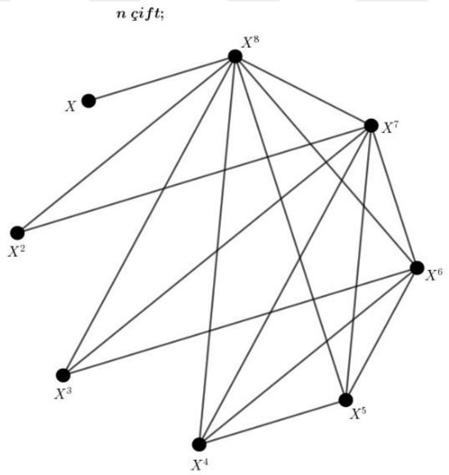
Böylece,

$$T_n + T_{n-1} + \ldots + T_{\frac{n+1}{2}+2} + T_{\frac{n+1}{2}+1} = \sum_{k=1}^{\frac{n-1}{2}} k\left[\frac{n^2 - 2n(k-1) - (2k-1)}{2}\right]$$

$$= \frac{1}{48}\left(n^4 + 4n^3 + 2n^2 - 4n - 3\right)$$

şeklinde genelleme yapılır.

Örnek 4.1.2:



Şekil 4.3. 8 Köşeli Monojenik Yarı Grup Graf Örneği

$$r(M_2(\Gamma(S_M^8)) = 1.7 + 1.6 + 1.5 + 1.4 + 1.4 + 1.3 + 1.2 = 1.\left(\frac{8^2 - 2}{2}\right)$$

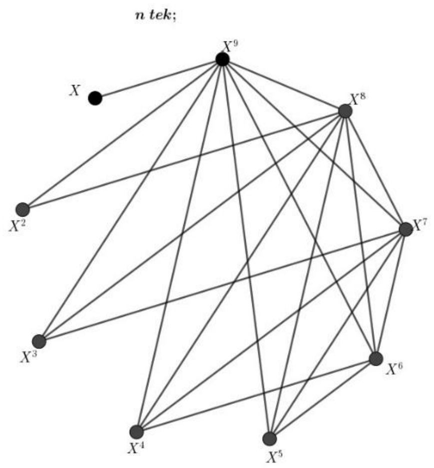
$$= 2.6 + 2.5 + 2.4 + 2.4 + 2.3 = 2.\left(\frac{8^2 - 2.8 - 4}{2}\right)$$

$$= 3.5 + 3.4 + 3.4 = 3.\left(\frac{8^2 - 4.8 - 6}{2}\right)$$

$$= 4.4 = 4.\left(\frac{8^2 - 6.8 - 8}{2}\right)$$

$$= \frac{8^4 + 4.8^3 + 2.8^2 - 4.8}{48}$$

$$= 130$$



Şekil 4.4. 9 Köşeli Monojenik Yarı Grup Graf Örneği

$$r(M_2(\Gamma(S_M^9)) = 1.8 + 1.7 + 1.6 + 1.5 + 1.5 + 1.4 + 1.3 + 1.2 = 1.\left(\frac{9^2 - 1}{2}\right)$$

$$= 2.7 + 2.6 + 2.5 + 2.5 + 2.4 + 2.3 = 2.\left(\frac{9^2 - 2.9 - 3}{2}\right)$$

$$= 3.6 + 3.5 + 3.5 + 3.4 = 3.\left(\frac{9^2 - 4.9 - 5}{2}\right)$$

$$= 4.5 + 4.5 = 4.\left(\frac{9^2 - 6.9 - 7}{2}\right)$$

$$= \frac{9^4 + 4.9^3 + 2.9^2 - 4.9 - 3}{48}$$

$$= 200$$

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1 Sonuçlar

Bu tezde, graf teorisi temelli Zagreb indeksleri ve bunların kimyasal yapılar, biyolojik ağlar ve diğer karmaşık sistemlerdeki uygulamaları detaylı bir şekilde incelenmiştir. İncelenen indeksler arasında birinci Zagreb indeksi, ikinci Zagreb indeksi ve ters Zagreb indeksi yer almakta olup, her birinin graf yapıları üzerinde nasıl bir etki yarattığına dair matematiksel temeller ve uygulamalar açıklanmıştır.

Zagreb indekslerinin, özellikle kimya ve biyoloji gibi disiplinlerde, moleküler yapıları ve ağları analiz etmede güçlü araçlar sunduğu görülmüştür. Bu indekslerin her biri, farklı yapısal özellikleri yansıtarak, moleküllerin ve ağların kimyasal reaktivitesini, stabilitesini ve etkileşimlerini anlamada faydalı olmuştur. Örneğin, birinci Zagreb indeksi, moleküler yapının genel kimyasal özelliklerini, ikinci Zagreb indeksi ise daha derinlemesine yapısal özellikleri anlamada kullanılan bir araçtır. Ters Zagreb indeksi ise, özellikle düşük dereceli düğümlerin ağırlığının daha fazla olduğu ağ yapılarında, yapısal analizde önemli bilgiler sunmuştur.

Ters Zagreb indeksinin, ağ yapılarındaki düşük dereceli düğümlerin etkisini daha belirgin bir şekilde ortaya koyması, ağ tasarımında ve optimizasyonunda yeni bir bakış açısı getirmiştir. Özellikle biyolojik ağlar, sosyal ağlar ve kimyasal moleküllerin incelenmesinde bu indeksin önemi vurgulanmıştır. Düşük dereceli düğümlerin rolünün daha belirgin olması, sistemlerin zayıf noktalarını tespit etmek ve güçlendirmek için bir fırsat sunar. Ayrıca, ters Zagreb indeksinin ağ yapılarındaki simetri ve etkileşimleri incelemede kullanılması, graf teorisinin geleneksel uygulamalarına farklı bir perspektif kazandırmıştır.

Sonuç olarak, Zagreb indeksleri, graf teorisinin matematiksel araçlarını kullanarak, kimyasal ve biyolojik sistemlerin analizi için güçlü bir temel sağlamaktadır. Bu indeksler, sadece mevcut yapıları analiz etmekle kalmaz, aynı zamanda gelecekteki moleküler tasarımlar ve ağ optimizasyonları için de değerli bilgiler sunar. Yapılan bu çalışma, grafiksel modelleme ve topolojik analizlerin, karmaşık sistemlerin daha iyi anlaşılması ve daha verimli çözümler üretmek için ne kadar önemli olduğunu bir kez daha gözler önüne sermektedir.

Gelecekteki araştırmalarda, Zagreb indekslerinin daha farklı ağ türlerinde ve farklı sistemlerde nasıl performans gösterdiği, yeni indekslerin geliştirilmesi ve bu indekslerin pratik uygulamalarındaki rolü daha ayrıntılı bir şekilde ele alınabilir. Ayrıca özellikle ters Zagreb indeksi gibi daha az bilinen indekslerin potansiyel kullanımları ve bu indekslerin çeşitli disiplinlerdeki etkileşimleri üzerine çalışmalar yapılması, graf teorisinin ve topolojik analizlerin yeni alanlara taşınmasına katkı sağlayacaktır.

Bu tez, graf teorisi temelli indekslerin daha derinlemesine incelenmesi için bir başlangıç noktası oluşturmuş ve bu alanda yapılacak daha fazla araştırma için sağlam bir temel sunmuştur.

5.2 Öneriler

Bu tezde ele alınan Zagreb indekslerinin ve özellikle ters Zagreb indeksinin matematiksel temelleri ve uygulamaları üzerine yapılan araştırmalar, graf teorisinin farklı alanlardaki potansiyel kullanım alanlarına ışık tutmuştur. Gelecekteki çalışmaların, bu indekslerin daha farklı ağ türlerinde ve daha karmaşık sistemlerde nasıl kullanılabileceğini keşfetmeye devam etmesi, graf teorisinin ve indekslerin daha geniş uygulama alanlarına ulaşmasına olanak sağlayacaktır.

6. KAYNAKLAR

Abeer, M. Abalahi, Abdulaziz, M. Alanazi, Akbar, A., Akhlaq, A., Bhatti, Amjad, E., Hamza, 2022, On the Maximum Sigma Index of K-cyclic Graphs, 57-64.

Abeer, M. Albalahi, Akbar, A., 2022, On the Inverse Symmetric Division Deg Index of Unicyclic Graphs, *De Computis*, 9, 963.

Akbar, A., Yilun, S., Darko, D., Tamas, R., 2023, Ad-hoc Lanzhou Index, *Mathematics*, 11 (20), 4256.

Akgüneş, N., 2012, Analyzing Special Parameters Over Zero-Divisor Graphs, *In AIP Conference* Proceedings, 1479, 390-393.

Akgüneş, N., Çevik, A. S., 2013, A New Bound of Radius of Irregularity Index, *Applied Math. Comput*, 219 (11), 5750-5753.

Akgüneş, N., Çevik, A. S., Das, K. C., 2014, Topological Indices On A Graph of Monogenic Semigroups, *Topics in Chemical Graph Theory*, 16(a), 3-20.

Akgüneş, N., Togan, M., 2012, Some Graph Theoretical Properties Over Zero-Divisor Graphs of Special Finite Commutative Rings, *Adv. Studies Contemp. Math*, 22(2), 305-315.

Allan, R. B., Laskar, R., 1978, On Domination and Independent Domination Numbers of a Graph, *Discrete Mathematics*, 73, 76.

Anderson, D. F., Badawi, A., 2008, On the Zero-Divisor Graph of a Ring, *Communications in Algebra* 36 (8), 3073-3092.

Anderson, D. F., Livingston, P. S., 1999, The Zero-divisor Graph of Commutative Ring, *J. Algebra* 217, 434-447.

Anderson, D. D., Naseer, M., 1991, Beck's Coloring of A Commutative Ring, *J. Algebra* 159, 500-514.

Arumugam, S., Velammal, S., 2007, Edge Domination in Graphs, *Bulletin of the Allahabad Mathematical Society Pramila Srivastava Memorial*, Vol. 24, Part 1, 43-49.

Atapour, M., Soltankhah, N., 2008, On Total Dominating Sets in Graphs, *Alzahra University Vanak Square*, 19834, Tehran, İran.

Beck, I., 1988, Coloring of Commutating Rings, *J. Algebra* 116, 208-226.

Berge, C., 1962, The Theory of Graphs and Its Applications, x+247pp. *Wiley, New York Translated by Alison Doig Methuen & Co. Ltd.,* London.

Bondy, J. A., Murty U. S. R., 1976, Graph Theory with Applications. Vol. 290. *London: Macmillian*.

Cangül, İ., N., 2024, QSPR model for Bond Energy of Y-junction nanotubes through M, NM-polynomials based on reverse, reduced reverse degree and neighborhood degree based topological indices, *Department of Mathematics*.

DeMeyer, F. R., DeMeyer, L., 2005, Zero-Divisor Graphs of Semigroups, *J. Algebra*, 283, 190-198.

DeMeyer, L., Greve, L., Sabbaghi, A., Wang, J., 2010, The Zero-Divisor Graph Associated to a Semigroup, *Communications in Algebra*, 3370-3391.

DeMeyer, F. R., McKenzie, T., Schneider, K., 2002, The Zero-Divisor Graph of a Commutative Semigroup, *Semigroup Forum* 65, 206-214.

Ediz, S., 2018, Maximal graphs of the first reverse Zagreb beta index, *TWMS Journal of Applied and Engineering Mathematics*, *8*(1.1), 306-310.

Erdös, P., Patch, J., Pollack, R., Tuza, Z., 1989, Radius, Diameter and Minimum Degree, *J. Combin. Theory B* 47, 73-79.

Fengwei Li, Xueliang Li, Hajo Broersma, 2020, Spectral Properties of Inverse Sum Indeg Index of Graphs, *Journal of Mathematical Chemistry*, 58, 2108-2139.

Gross, J.L., Yellen, J., 2004, Handbook of Graph Theory, Chapman Hall, *CRC Press*.

Kulli, V., R., 2018, Reverse Zagreb and reverse hyper-Zagreb indices and their polynomials of rhombus silicate networks, *Annals of Pure and Applied Mathematics*, *16*(1), 47-51.

Liu, Q. Q., Li, Q. Zhang, H., 2022, Unicyclic Graphs with Extremal Lanzhou Index, *Applied Mathematics- A Journal of Chinese Universities*, 37, 350-365.

Vargör, D., 2010, Graflarda Baskınlık ve Ortalama Baskınlık Sayısı, Doktora, *Fen Bilimleri Enstitüsü*, Bornova.

Vukičević, D., Li, Q., Jelena, S., Tomislav, D., 2018, Lanzhou index, *Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 863-876.

Wang, H., 2008, The Extremal Values of The Wiener Index of A Tree with Given Vertex Degree Sequence, *Discrete Appl. Math*, 156, 2647-2656.

Xu , K., Das, K. C., 2011, On Harary Index of Graphs, *Discrete Applied Math*, 159, 1631-1640.

Xu, J. M., Yang, C., 2006, Connectivity of Cartesian Product Graphs, *Discrete Math*, 306(1), 159-165.