TÜBİTAK

# Geometric Representations and Symmetries of Graphs, Maps and Other Discrete Structures and Applications in Science

**Program Kodu:** 2530

**Proje No:** 210T173


Proje Yürütücüsü:

**Doç. Dr. Türker Bıyıkoğlu**

Bursiyer:

Dr. Lale Özkahya



Eylül 2015

ANKARA

## ÖNSÖZ

Bu proje bir birinden tamamen bağımsız üç çizge kuramı alanında gerçekleştirilmiştir. Çizgelerin özdeğer ve özvektörleri ve uygulamaları, diğer bilim alanlarında karşılaşılan önemli problemlerin çizge kuramı ile modellenmesi ve çözülmesi bu modellemelerde ortaya çıkan NP-tam problemlere yaklaşımlar getirilmesi ve cebirsel geometri ayrık geometri ve komutativ cebirin en temel sabitlerinden Castelnuovo-Mumford regülaritenin çizge kuramı ile anlaşılması ve çizge kuramı gereçlerin geliştirilmesi amaçlanmıştır.

Bu üç bağımsız konun bir birinden farklı çalışma metotları, yaklaşımları ve gereksinimleri vardır. Bu üç alandada aktif olabilmek için gerekli desteği sunduğu için TÜBİTAK a teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmalar esnasında ortak projeler yürüttüğüm bir çok araştırmacı bu proje kapsamında çıkan sonuçlar doğrultusunda TÜBİTAK projesi yazdı, geliştirdi, ve benim diğer TÜBİTAK projelerim devam etti. Adı geçen diğer projeler için bu projeye kapsamında TÜBİTAK in bize sunmuş olduğu destekden dolayı ayriyeten teşekkürlerimi ifade etmek isterim.

Doç Dr. Türker BIYIKOĞLU

# İÇİNDEKİLER

1. GİRİŞ . . . . . 1
1.1. Bulgular Dökümü . . . . . 2
2. LİTERATÜR ÖZETİ . . . . . 5
2.1. Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları . . . . . 5
2.2. Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri . . . . . 5
2.3. Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi . . . . . 6
3. GEREÇ VE YÖNTEMLER . . . . . 7
3.1. Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları . . . . . 7
3.2. Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri . . . . . 8
3.2.1. Hesaplanabilirliğin Karmaşıklığı ve NP-tam problemler . . . . . 9
3.3. Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi . . . . . 11
4. BULGULAR . . . . . 12
4.1. Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları . . . . . 12
4.1.1. Uç Cebirsel bağlılık Problemleri . . . . . 12
4.1.2. Kimyasal çizgelerin özdeğerleri ve Dendrimerlar . . . . . 14
4.1.3. İndirgenmiş Eşleşmeler için Özdeğer Sınırlar . . . . . 15
4.1.4. Fiedler Vektörünün $L$-1 Normu . . . . . 16
4.1.5. Biyolojik ağlar, dinamik sistemler ve karmaşık sistemlerde görülen ağ entropisi . . . . . 17
4.2. Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri . . . . . 20
4.2.1. Kablosuz Ağlarda Bilgi Alışverişinin Çizge Kuramı ile Modellenmesi ve Çizge Eşleşme Metotları ile Tam Çözümü . . . . . 20
4.2.2. BIONETALIGN: Biyokimyasal Ağlarda Fonksiyonel Ortoloji Çıkarımı Amaçlı Global Hizalamalar . . . . . 21

4.2.3. Kanaat Dinamiği ve Çizge Benzeryapı Dönüşümleri . . . . . . . . 23
4.2.4. Kütle Spektrometresi Çizgeleri ve İyon Farkı Eşleştirme Problemi . 24
4.2.5. Çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişim Problemlerinin Çizge Kuram Metotları ile Modellenmesi ve Çözülmesi . . . . . . . . . . . 29
4.3. Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi . . . . . . . . . . . . . . . . 30

5. SONUÇ VE TARTIŞMA . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 34
5.1. Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları . . . . . . . . . . . 34
5.2. Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri . . . . . . . . . . . . . . . . . . 34
5.3. Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi . . . . . . . . . . . . . . . . 35

6. KAYNAKÇA . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 36

7. PROJE ÖZET BİLGİ FORMU . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 42

## SİMGELER DİZİNİ

| | |
|---|---|
| $V(G), E(G)$ | $G$ çizgesin nin $V(G)$ köşelerinin kümesi, $E(G)$ kenarlarının kümesi |
| $\|S\|$ | $S$ kümesinin eleman sayısı |
| $P_n, C_n, K_n$ | n-köşeli yol, döngü, tam (hizip) çizge |
| $A(G)$ | $G$ nin komşuluk matrisi |
| $D(G)$ | $G$ nin derece matrisi |
| $L(G)$ | $G$ nin Laplace matrisi |
| $\lambda(A(G))$ | $G$ nin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri |
| $\overline{G}$ | $G$ nin bütünleyeni |
| $G-U$ | $G$ den $U$ in köşelerinin atılması |
| $d(v)$ | $v$ köşesinin derecesi |
| $N(v)$ | $v$ köşesinin komşularının kümesi |
| $N[v]$ | $v$ köşesinin (kapalı) komşuluğu |
| $G[S]$ | $G$ nin S tarafından indirgenmiş altçizgesi |
| $\Delta(G)$ | $G$ nin maksimum derecesi |
| $\mathrm{m}(G)$ | $G$ nin eşleşme sayısı |
| $\mathrm{im}(G)$ | $G$ nin indirgenmiş eşleşme sayısı |
| $\mathrm{reg}(G)$ | $G$ nin Castelnuovo-Mumford regülaritesi |

## TERMİNOLOJİ DİZİNİ

| | |
|---|---|
| clique | hizip |
| connectivity | bağlılık |
| independent set | bağımsız küme |
| algebraic connectivity | cebirsel bağlılık |
| homomorphism | benzeryapı |
| matching | eş kümesi |
| induced matching | indirgenmiş eş kümesi |
| NP-complete | NP-tam |
| extremal | uç |
| square-free monomial ideal | kare-serbest monomial ideal |
| girth | kuşak |
| $H$-free | $H$-yoksun veya $H$-serbest veya $H$-siz |

**Proje Başlığı:** Geometric Representations and Symmetries of Graphs, Maps and Other Discrete Structures and Applications in Science

## ÖZET


Bu proje çalışmasının üç temel amacı vardır. Bunlardan ilki, Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamalarıdır. Çizgenin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri ve özvektörü olan Perron vektörü ile Laplace matrisinin en küçük ikinci özdeğeri ve özvektörü olan Fiedler vektörünün yapısal özelliklerinin çizge özellikleri ve sabitleri ile ilişkileri araştırılmıştır.

Bu amaç doğrultusunda proje kapsamında ulaşılan sonuçlar temel başlıklar altında şöyledir:

- $n$ köşesi $m$ kenarı olan bağlı çizgelerden cebirsel bağlılığı en küçük olan çizgenin hizipli yol olduğu ispatlanmıştır.

- $n$ köşesi $m$ kenarı olan kimyasal ağaçlardan dendrimerin komşuluk matrisinin en büyük özdeğerinin tek bir ağaç olarak maximum değeri aldığı ispatlanmıştır.

- $G$ çizgesinin en büyük indirgenmiş eşleşme sayısı $im(G)$ ye $G$ çizgesinin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri cinsinden keskin bir alt sınır verilmiştir.

- Çizgenin topolojik entropisinin çizgenin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri ile ifade edilebileceği gözlemlenmiştir.

- Çizgenin bir birinden farklı alanlarda kullanılan asortiklik sayısı, s-metrik sayısı, ikinci Zagreb indeksi ve özel Randic indeksinin bir birine eşit olduğu gösterilmiştir.

- Çizgenin genel Randic indeksine çizgenin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri cinsinden bir üst sınır verilmiştir.

- Aynı derece dizisine sahip bağlı çizgelerden en büyük entropisi, asortikliği, genel Randic indeksi ve en büyük özdeğeri maximum olan çizgenin sarmal şeklinde olduğu ispat edilmiştir. Derece dizisinde ağaç var ise bu özelliğe sahip tek bir ağacın olduğu ispatlanmıştır.

İkinci amacımız, çizge kuramı modellemeleri ve çözümleri. Biyoloji, bioinformatik, dinamik sistemler, fizik, haberleşme, kriptoloji ve sosyal ağlar gibi bir birinden çok farklı alanlardan gelen birbirinden tamamen bağımsız olan temel problemler için çizge kuramı ile özgün modellenmesi ve ortaya çıkan çizge problemlerin çözülmesi amaçlanmıştır.

Bu ikinci amaç doğrultusunda proje kapsamında ulaşılan sonuçlar temel başlıklar altında şöyledir:

- Kablosuz ağlarda bilgi alışverişini sağlamak amacıyla köşelerin komşularından yararlanılması durumunda ortaya çıkan problemlerin çözümü için çizge modeli oluşturulmuştur. Problem çizge eşleşme problemine dönüştürüp tamamen çözülmüştür. Bu çizge modelinden yararlanılarak kablosuz ağlar için kanal kullanım kapasitesini iki katına çıkaran bal peteği hücre modeli geliştirilmiştir.

- Biyokimyasal iki farklı canlı ağları arasında benzer fonksiyonları bulmak için gerekli çizge modeli oluşturulmuştur. Model sonunda oluşan çizgesinin en büyük bağımsız kümeleri biyoinformatik ve biyoloji açısından aranılan özellikleri ifade ettiği gösterilmiştir. Problemin en özel durumda dahi NP-tam problem olduğu ispat edilmiştir.

- Model sonunda oluşan çizgenin çeşitli yapısal özellikleri ispat edilmiştir. Bu yapısal özellikleri kullanan yaklaşım algoritmalarının yaklaşım oranları verilmiştir.

- Ağlarda kanaat dinamiğinin çizge kuramı modeli verilmiştir. Ağın kanaat dinamiğinde görülebilecek kanaat çeşitliğinine karar verme probleminin NP-tam problem olduğu ispat edilmiştir.

- Kütle spektrometresi metodu ile ufak parçalara ayrılan moleküllerin her parçasının altı iyon farkı tipinden birisi ile doğru bir şekilde eşleştirme probleminin çözümü için çizge modeli oluşturulmuştur.

- Bu model ile oluşan çizgelerin hiziplerinde en fazla dört köşesinin olabileceği ispat edilmiştir. Bu model sonucunda oluşan çizgelerin 4-üçgenlenmiş çizgeler sınıfının üyeleri olduğu ispat edilmiştir.

- Bu model ile biyolojik manalı oluşabilecek bütün hizipler belirlenmiştir.

- Biyolojide iyon sıçraması olarak adlandıran durumun çizgelerde iki hizipin bir ortak köşesi olarak ifade edilebileceği gözlemlenmiştir.

- İyon farkı eşleştirme problemi için iki yeni algoritma geliştirilmiştir.

- Çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişimde gizlilik, kimlik tanıma ve gizli mahremiyetin sağlanması için kullanılan şifreleme algoritmaları için gerekli çizge modeli oluşturulmuştur. Bu tür bir iletişim için gerekli güvenli grup kurma sürecinin çizgede polinom sürede bulunabilen bir hizip problemi olduğu gösterilmiştir.

Üçüncü amacımız çizge kuramını kullanarak kare-serbest monomial $I$ idealinin Castelnuovo-Mumford regülaritesinin hesaplanması ve bu hesapta kullanılabilecek etkin çizge kuramı yöntemlerin keşfedilmesi ve araştırılmasıdır. Bu amaç doğrultusunda proje kapsamında ulaşılan sonuçlar temel başlıklar altında şöyledir:

- $G$ çizgenin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi $reg(G)$ için $reg(G) \leq im(G)\Delta(G)$ eşitsizliği ispat edilmiştir.

- Pençesiz bir $G$ çizgesi için $reg(G) \leq 2im(G)$ eşitsizliği ispat edilmiştir.

- $C_5$ döngüsünün $im(G) < reg(G) = m(G)$ durumunu sağlıyan tek çizge olduğu ispat edilmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** komşuluk matrisi, Laplace matrisi, özdeğer, özvektör, cebirsel bağlılık, Perron vektörü, Fiedler Vektörü, dendrimer, NP-tam, Topolojik Entropi, asortiklik, genel Randic indeksi, global çizge hizalaması, kanaat dinamiği, Kütle Spektrometresi Çizgeleri, İyon

Farkı Eşleştirme, Çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişim, independent set, clique, benzeryapı, Castelnuovo-Mumford regülaritesi, kare-serbest monomial ideal, indirgenmiş eşleşme sayısı.

TÜBİTAK

**Project Title:** Geometric Representations and Symmetries of Graphs, Maps and Other Discrete Structures and Applications in Science

## ABSTRACT


There are three particular aims of this project. The first part is focusing on the eigenvalue and eigenvector structure of graphs: Specially, the spectral radius of adjacency matrix of a graph and its Perron vector and the second smallest eigenvalue of Laplacian matrix of a graph so called algebraic connectivity and its Fiedler vectors.

The main contribution of the first part can be summarized as follows:

- proved that a graph with $n$ vertices and $m$ edges that minimizes the algebraic connectivity has a clique path form.

- proved that the chemical tree with $n$ vertices and $m$ edges that maximizes the spectral radius of adjacency matrix is unique and it is dendrimer.

- proved that the spectral radius of the adjacency matrix of a graph $G$ is a sharp lower bound for the maximum induced matching number of $G$.

- observed that the topological entropy of a graph $G$ can be expressed by its spectral radius of adjacency matrix.

- showed that assortativity, s-metric, secon Zagreb index and special Randic index are equivalent.

- proved that the spectral radius of the adjacency matrix of a graph $G$ is an upper bound for generalized Randix index of $G$.

- proved that the connected graph that maximizes topological entropy, the spectral radius of the adjacency matrix of a graph $G$, generalized Randic index under a given degree sequence has a spiral form. If the degree sequence is a tree sequence, then such an extremal tree is unique.

The second part is the modeling of different and independent problems from biology, bioinformatics, communication networks, cryptography, dynamical systems and social networks with graph theory and their graph theoretical solutions.

The main contribution of second part can be summarized as follows:

- optimal power allocation and partner selection policies of wireless communication networks that maximize the sum rate of a cooperative OFDMA system with mutually cooperating pairs of users modeled by graphs and formulated as matching problem and solved in polynomial time. It proposed a honeycomb model that doubled the frequency reuse.

- The problem of providing one-to-many alignments of reactions in a pair of metabolic pathways is modeled as maximum independent set problem of an intersection graph. It is

shown that the problem even in a primitive setting is NP-complete.

- By characterizing special structural properties of these intersecting graphs, approximation ratios of approximation algorithms for maximum independent sets are given.

- Opinion dynamics on networks is modeled. It is shown that the decision of the plurality of opinions on a given graph is a NP-complete problem.

- Ion naming of molecules that come from mass spectrometry method is modeled by graphs.

- It is shown that such graphs can have cliques with at most four vertices. It is shown that such graphs belong to $4$-triangulated graph class.

- with this model all biological meaningful cliques are listed.

- It is shown that in biology so called ion jumping can be seen as an intersection of two biological meaningful cliques.

- Two new ion naming algorithms are given.

- Group membership in Multi Party Off-the-Record messaging is modeled by graphs. It is shown that the cryptographically secure group building process can be modeled as a clique finding problem and such a clique can be found in polynomial time.

The last part is on the computation of Castelnuovo-Mumford regularity square-free monomial ideals that is equivalent to the computation of Castelnuovo-Mumford regularity of graphs. The computation of the regularity is in general a difficult task, finding effective bounds on such an invariant are important contributions. our main approach is graph theoretical. The instruments of graph theory are our main tools for establishing tight bounds on the regularity.

The main contribution of the last part can be summarized as follows:

- proved that the it is always hold $reg(G) \leq im(G)\Delta(G)$, for Castelnuovo-Mumford regularity $reg(G)$ of $G$.

- proved that If $G$ is claw-free graph, then $reg(G) \leq 2im(G)$.

- shown that $C_5$ is the unique graph with the property $im(G) < reg(G) = m(G)$.

**Keywords:** adjacency matrix, Laplacian matrix, spectral radius, Fiedler vector, Perron vector, eigenvalue, eigenvectors, algebraic connectivity, dendrimer, topological entropy, assortativity, generalized Randic index, global graph alignment, opinion dynamics, ion naming, multi party off-the-record messaging, independent set, clique, graph homomorphism, Castelnuovo-Mumford regularity, square-free monomial ideal, induced matching number, NP-complete.

## 1. GİRİŞ

Bu proje çalışması birbirinden bağımsız üç çizge kuramı alanında temel problemlerin çözümlerini hedeflemektedir. Bu kapsamda ortaya konan problemlerin ve bu problemlere yönelik üretilen çözüm yöntemleri ve sonuçlarının rahatlıkla algılanabilmesi ve konuların dağılmaması için gerekli terim ve notasyonları yeri geldiği bölümlerde sunacağız.

Projemizin birinci araştırma alanı: Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları. Çizgelerin özdeğer ve özvektörlerinin kullanımı sadece kombinatorikde kalmayıp matematiğin diğer alanlarını da etkilemeye başlamıştır. Günümüzün büyük veri, internet, sosyal ağlar, dinamik sistemler ve kimyada kullanışı artmış ve bu alanlardaki bir çok problemin çözümü için kritik öneme sahiptir. Bu gelişmeler ESF-TÜBİTAK proje başvurusu süresinde beklediğimizden çok daha hızlı gelişmektedir. Araştırmalarımızda bu hızlı gelişimde kalıcı temel sonuçların ve farklı temel bağlantıların bulunması ve ilişkilendirilmesini amaçladık.

Projenin ikinci araştırma alanı: Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri. Biyoloji, bioinformatik, dinamik sistemler, fizik, haberleşme, kriptoloji ve sosyal ağlar gibi bir birinden çok farklı alanlardan gelen birbirinden tamamen bağımsız olan temel problemler için çizge kuramı ile özgün modellenmesi ve ortaya çıkan çizge problemlerin çözülmesi amaçlanmıştır. Bu problemler proje başladığından itibaren disiplinler arası yürütülmüş olup (bir kısmı halen devam etmektedir) problemlerin her zaman başlangıcı problemin oluştuğu alandaki araştırmacıların temasa geçip çizge kuramı ile "modellenebilir mi acaba?" ve benzer sorular ile başlamış ve oldukca ince eleyip sık dokuduktan sonra modelleme safhasına geçilmiş o alanlar için temel problemlerdir. Haberleşme alanından gelen problemin tam çözümünü verdik. Diğer bütün problemlerin genel itibari ile NP-tam problemler olduklarını gösterdik. Bir kısmına problemin alan bilgisini kullanarak çizge özelliklerinin özel olduklarını ortaya çıkararak polinom bir sürede çözülebilir hale getirdik. Bir kısmına çizge yapıları ve problemin geldiği alan bilgilerini kullanarak yaklaşım algoritmaları verebildik. Projenin bu bölümünün ESF-TÜBİTAK proje çağrısının ruhuna çok uygun düşmektedir. Gerçek problemlerin disiplinler arası işbirliği ile matematik modellenmesi ve bunların çözülmesi ne yazık ki Türkiyede çok tecrübe edilmemiştir. Bu proje çalışmalarımız ile Türkiyede displinler arası araştırma ve matematiksel modellemeye katkıda bulunmayı projenin bilimsel çıktıları dışında önemli bir çıktısı olduğunu ifade etmek isterim.

Projenin üçüncü araştırma alanı: Çizgelerin Castelnuovo-Mumford regülaritesi: Sadece cebirsel geometrinin en önemli sabitlerinden bir olmakla kalmayıp Castelnuovo-Mumford regülaritesi aynı zamanda kommutative cebir ve ayrık geometrinin en temel sabitlerinden bir olma özelliğine sahip. Son yirmi yıldır üzerinde yoğun çalışılan ve geçmis on yılda çizgerlerde de araştırılan bir sabit olmakla birlikte henüz tam olarak anlaşılamamıştır. Yusuf Civan (Süleyman Demirel Üniversitesi, Isparta) ile birlikte beş yılı aşkın süredir cebir ve topoloji sabitlerinin anlaşılması ve bu sabitler ile ilgili problemlerin çözülmesinde çizge kuramı ve kombinatoriyel topoloji metotlarının kullanılması üzerine bir program yürütmekteyiz. Bu konu ile ilglili Tübitak projemiz (proje no. 111T704) 2014 yılında sonuçlanmıştır. Bu bölümde sunacağımız bulgular 2014 yılı ve özellikle 2015 yılında beklenmedik yeni ve önemli sonuçların ESF-Tübitak projesi kapsamında gelişmiş olanları yer almaktadır. Çizgelerin Castelnuovo-Mumford regülaritesinin çok önemli bir problem olması ve bir çok alanı etkiliyor olmasından dolayı bu projenin son döneminde çalışmayı uygun bulduk.

### 1.1 Bulgular Dökümü

Bu altbölümde genel değerlendirmeye girilmeksizin başlıklar halinde proje çalışması sonucunda ortaya konan yeni sonuçlar verilmiştir. Genel değerlendirme Bulgular bölümünde detaylı olarak sunulacaktır.

- $n$ köşesi $m$ kenarı olan bağlı çizgelerden cebirsel bağlılığı en küçük olan çizgenin hizipli yol olduğu ispatlanmıştır.

- $n$ köşesi $m$ kenarı olan kimyasal ağaçlardan dendrimerin komşuluk matrisinin en büyük özdeğerinin tek bir ağaç olarak maximum değeri aldığı ispatlanmıştır.

- $G$ çizgesinin en büyük indirgenmiş eşleşme sayısı $im(G)$ ye $G$ çizgesinin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri cinsinden keskin bir alt sınır verilmiştir.

- Çizgenin topolojik entropisinin çizgenin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri ile ifade edilebileceği gözlemlenmiştir.

- Çizgenin bir birinden farklı alanlarda kullanılan asortiklik sayısı, s-metrik sayısı, ikinci Zagreb indeksi ve özel Randic indeksinin bir birine eşit olduğu gösterilmiştir.

- Çizgenin genel Randic indeksine çizgenin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri cinsinden bir üst sınır verilmiştir.

- Aynı derece dizisine sahip bağlı çizgelerden en büyük entropisi, asortikliği, genel Randic indeksi ve en büyük özdeğeri maximum olan çizgenin sarmal şeklinde olduğu ispat edilmiştir. Derece dizisinde ağaç var ise bu özelliğe sahip tek bir ağacın olduğu ispatlanmıştır.

- Kablosuz ağlarda bilgi alışverişini sağlamak amacıyla köşelerin komşularından yararlanılması durumunda ortaya çıkan problemlerin çözümü için çizge modeli oluşturulmuştur. Problem çizge eşleşme problemine dönüştürüp tamamen çözülmüştür. Bu çizge modelinden yararlanılarak kablosuz ağlar için kanal kullanım kapasitesini iki katına çıkaran bal peteği hücre modeli geliştirilmiştir.

- Biyokimyasal iki farklı canlı ağları arasında benzer fonksiyonları bulmak için gerekli çizge modeli oluşturulmuştur. Model sonunda oluşan çizgesinin en büyük bağımsız kümeleri biyoinformatik ve biyoloji açısından aranılan özellikleri ifade ettiği gösterilmiştir. Problemin en özel durumda dahi NP-tam problem olduğu ispat edilmiştir.

- Model sonunda oluşan çizgenin çeşitli yapısal özellikleri ispat edilmiştir. Bu yapısal özellikleri kullanan yaklaşım algoritmalarının yaklaşım oranları verilmiştir.

- Ağlarda kanaat dinamiğinin çizge kuramı modeli verilmiştir. Ağın kanaat dinamiğinde görülebilecek kanaat çeşitliğinine karar verme probleminin NP-tam problem olduğu ispat edilmiştir.

- Kütle spektrometresi metodu ile ufak parçalara ayrılan moleküllerin her parçasının altı iyon farkı tipinden birisi ile doğru bir şekilde eşleştirme probleminin çözümü için çizge modeli oluşturulmuştur.

- Bu model ile oluşan çizgelerin hiziplerinde en fazla dört köşesinin olabileceği ispat edilmiştir. Bu model sonucunda oluşan çizgelerin 4-üçgenlenmiş çizgeler sınıfının üyeleri

TÜBİTAK

olduğu ispat edilmiştir.

- Bu model ile biyolojik manalı oluşabilecek bütün hizipler belirlenmiştir.

- Biyolojide iyon sıçraması olarak adlandıran durumun çizgelerde iki hizipin bir ortak köşesi olarak ifade edilebileceği gözlemlenmiştir.

- İyon farkı eşleştirme problemi için iki yeni algoritma geliştirilmiştir.

- Çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişimde gizlilik, kimlik tanıma ve gizli mahremiyetin sağlanması için kullanılan şifreleme algoritmaları için gerekli çizge modeli oluşturulmuştur. Bu tür bir iletişim için gerekli güvenli grup kurma sürecinin çizgede polinom sürede bulunabilen bir hizip problemi olduğu gösterilmiştir.

- $G$ çizgenin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi $reg(G)$ için $reg(G) \leq im(G)\Delta(G)$ eşitsizliği ispat edilmiştir.

- Pençesiz bir $G$ çizgesi için $reg(G) \leq 2im(G)$ eşitsizliği ispat edilmiştir.

- $C_5$ döngüsünün $im(G) < reg(G) = m(G)$ durumunu sağlıyan tek çizge olduğu ispat edilmiştir.

## 2. LİTERATÜR ÖZETİ

Bu bölümde proje kapsamında üzerinde çalışılmış olan alanlardan sadece Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi için kısa bir tarihçe verilecektir. Diğer alan problemlerinin literatürü bulgular bölümünde bahsi geçen yerlerde kısaca verilecektir.

### 2.1 Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları

Çizgelerin özdeğer ve özvektörlerin proje kapsamındaki araştırmamız ile ilgili kısımları detaylı olarak Bıyıkoğlu-Leydold-Stadler vermektedir [8]. Literatür özeti için ilginç bir gözlemde bulunalım. Daha önce önemli yayın evlerinden ve serilerinden yüksek lisans ve daha üst düzey için çıkmış artık "klasik" kabül edilen kitaplar bulunmasına karşın son beş yılda bu konuda önemli yayın evlerinden çıkmış lisans düzeyi ve diğer bütün üst düzeylerde yeni kitapların basılmış olması konuya ilginin arttığının bir göstergesidir. Bunlardan sadece bazılarını vererek literatür özetini bitirelim: Bapat (2010 ve 2014) [6], Brouwer-Haemers (2012) [20], Brualdi (2011) [21], Cvetkovic-Rowlinson-Simic (2010) [29].

Cebirsel bağlılık, dendrimer, indirgenmiş eşleme için özdeğer sınırı ve ağ entropisi için gerekli literatür özeti kısa olarak bulgular bölümünde verilecektir. Problemlerin bir birinden bağımsız olması ve konuların literatürlerinin kısalığı ve konunun araştırılması ile yakınlığı ve problemin bütünlüğü ve daha iyi bir okunabilirlik açısından bulgular bölümünde vermeyi daha uygun bulduk.

### 2.2 Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri

Biyoloji, bioinformatik, dinamik sistemler, fizik, haberleşme, kriptoloji ve sosyal ağlar gibi bir birinden çok farklı alanlardan gelen birbirinden tamamen bağımsız olan temel problemlerin çizge modellemesi için gerekli literatür her problem için displinler arası çalışma yapılan grup belirlemiştir. Modelleme için gerekli literatür bilgilerinin burda detaylı verilmesi pratik bakımdan mümkün değildir. Bulgular bölümünde modelleme için gerekli olan kaynaklar belirtilecektir. Problemlerin kendi alanlarında ki oluşumu ve gelişimi proje kapsamı dışında kalmaktadır. Problemlerin çizge metotları ile ilgili çözümü için gerekli olan kaynaklar bulgular bölümünde yer verilecektir.

## 2.3 Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi

Castenuovo-Mumford regülaritesi için çok kısa bir tarihçe veriyoruz. Daha detaylı bir tarihçe bu konu ile ilgili TÜBİTAK sonuç raporumuzda bulunmaktadır.

İlk olarak Castelnuovo'nun 1893 yılında pürüzsüz projektif uzay eğileri üzerindeki lineer sistemler üzerine yazdığı çalışmasıyla ortaya çıkmıştır [26]. Hermann'nın 1926 yılında [46] sonlu tane homojen polinom tarafından üretilen bir idealin minimal serbest çözünürlüğünün sonlu adımda hesaplanabileceğini ve bu hesabın sadece üzerinde çalışılan halkanın değişmez sayısına ve verilen polinomların maksimal derecesine bağlı olduğunu kanıtlayarak Hilbertin bir sorusuna cevap vermek ile kalmayıp 80'li yıllarda *Gröbner taban tekniği* olarak bilinen algoritmik cebirsel hesaplama yaklaşımının doğuşuna sebep olmuştur. Castenuovo-Mumford regülaritesi bu tip algoritmaların karmaşıklığının tespiti için etkin bir sınır teşkil etmektedir.

Mumford 1966 yılında ilk formal tanımı vermiştir [52]. 1980'li yıllarda Ooishi [55] ve Eisenbud-Goto [35] şimdiki halini formalize etmişlerdir. Eisenbud ve Goto çalışmalarında ortaya attıkları önemli ve hala açık olan Eisenbud-Goto Savı regülaritenin değişmeli cebir ve cebirsel geometri alanlarında bu denli ilgi görmesinin önemli sebeplerinden biridir.

Zheng 2004 yılındaki orman çizgelerin regülaritesinin indirgenmiş eşleme sayısına eşit olduğunu kanıtlayan çalışması [62] çizgelerin regülaritesinin başlangıcıdır. Há'nın yeni incelemesi [44], çizgelerin regülaritesinin detaylı taramasını vermektedir.

# 3. GEREÇ VE YÖNTEMLER

Bu bölümde proje kapsamında ortaya konan problemlerin çözümlerinde kullanılan yöntemler, metodolojik teoriler ve modelleme yaklaşımı kısa bir şekilde ifade edilecektir. Burada ortaya konan yöntemlerin bir kısmı literatürde vardır ve bir kısmıda projemiz kapsamında geliştirilmiştir. Disiplinler arası problemleri modelleme yaklaşımımız genel modelleme yöntemlerini ile benzerlikleri olaması ile birlikte kişisel bir modelleme yöntemidir.

## 3.1 Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları

Teoremlerin ispatları proje başvurusunda belirttiğimiz çizgelerin özdeğer ve özvektörlerin yapısal özelliklerini kullanarak ve daha önce geliştirdiğimiz özgün çeşitli ispat teknikleri kullanılarak yapılmıştır Bıyıkoğlu-Leydold-Stadler [8], ve Bıyıkoğlu-Leydold (2007–2009) [9, 10, 11]. Fiedler vektörünün ve Perron vektörünün yapısı ve bu yapının çizge operasyonlarına göre değişmesi ispatlarda çok önemlidir [8, 10].

İspatlarda ayrık Courant köşe öbeği (nodal domain) teoremi, sınırlı çizgelerin Dirichlet özdeğeri ve özvektörleri ve yapıları kullanılmıştır [8, 9]. Çizge operasyonlarının çizgeye, özdeğer ve özvektörüne etkisi ve özellikle çizge operasyonlarından değiş tokuş (switch), kaydırma (shifting) operasyonları kullanılmıştır [8, 10, 9, 11]. $ab$ ve $cd$ kenarları $G$ çizgesinin kenarları olsun ve $ac$ ve $bd$ kenarları $G$ çizgesinin kenarları olmasın, $G$ çizgesinden $ab$ ve $cd$ kenarlarının çıkarılıp $ac$ ve $bd$ kenarlarının eklenerek oluşturulan yeni çizge için $ab$, $cd$ kenarları $ac$ ve $bd$ kenarları ile *değiş tokuş* edildi denir. Değis tokuş operasyonu köşelerin derecelerini değiştirmediğinden derece dizileri için çok önemli bir operasyondur. $G$ çizgesindeki $v$ kösesinin bazı komşularının silinip $w$ nin komşuları olarak eklenmesine *kaydırma* operasyonu denir. Ayrıca bir çizgenin indirgenmiş alt çizgesinin özdeğer ve özvektörlerinin çizgenin özdeğer ve özvektörlerine etkisi kullanılmıştır [29]. Çizgelerin yapısal özellikleri ve bu özelliklerin matris yapılarıda kullanılmıştır [8, 10, 9, 11, 29].

Derecece dizisi ve çizge operasyonlarının bu derece dizisinin çizgelerini tasarlarken etkisi önemli rol oynamıştır. Ayrıca bir derece dizisinin bir diğer derece dizisini kapsama özelliği (majorization) kullanılmıştır [10, 9, 11].

Çizgelerin önce enlemesine arama katmanlı yapısı (breath-first-search) ve bu katmanların çizge operasyonları ve özvektör ilişkisi oldukca önemlidir [10].

### 3.2 Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri

Günümüzde disiplinler arası problemlerin çizge kuramı ile modellenmesi çok yaygınlaşmış ve kaçınılmaz hale gelmiştir. Bu zorunluluğu bu proje kapsamında çalışılan modelleme problemlerinde de görmek mümkündür. Projede kullandığımız modelleme metot, süreç ve yöntemlerini detaylı bir şekilde vermeyi uygun gördük.

Birbirinden farklı alanlardan gelen birinden bağımsız problemlerin çizge kuramı ile modellenmeleri ve çizge çözümlerinin o alanlarda aranılan çözüme etkisi için izlediğimiz yol disiplinler arası modelleme için kullanılan genel yöntemlerdir [49]. Bu genel yöntemleri pratikde uygulamak için tecrübe, objektif yaklaşım, aceleye ve kolaya kaçmama ve disiplinler arası yoğun etkileşim çabası ve zamanı ve problemin kaynak disiplin için önemli bir problem olmasını gerektirir. Bu proje kapsamında bu noktalara azami ölçüde dikkat ettik.

Tecrübelerimiz, disiplinler arası çalışmalarda problemin kaynak disiplininin olası bir çözüm için diğer bir disiplin ile temasa geçmesinin modellelemenin başarısında oldukca önemli bir rol oynadığını göstermiştir. Bu proje kapsamında bütün disiplinler arası problemlerin modellenmesine bu şekilde başlanmıştır.

İkinci aşama problemin gerçekten çizge kuramı ile modellenmesinin geçerliliğinin olup olmadığının aşırı dikkatli ve bağımsız bir gözle irdelenmesidir. Çeşitli dönemlerde bu süzgeçten geçemeyen problemler elenmiştir.

Disiplinler arası bir problemin çizge modellenmesi çok zaman alan alır ve bir çok dene-yanıl, başa sar ve "bir birimizi yanlış anlamışız" süreçlerini içerir. Zaman geçer daha ortada model yoktur. Karşılıklı araştırmacılar huzursuzlanmaya başlar. Bu bağlamda çizge modelini zorlaştıran bir diğer unsur; araştırmacılarda basit çizge tanımlarının yanlış bir önsezi oluşturmasıdır. Tecrübelerimiz, kaynak disiplinde çalışanların kolaya kaçan modele veya empoze model ve yaklaşımlara çok kolay yönelebildiğidir.

Ama aslında esas iş çizge modelinin kaynak disiplinin ihtiyaçlarını doğru bir şekilde yansıtan matematiksel yaklaşımdan ödün vermiyen ama çözümü olsun diye belirli çizge koşulları/sonuçları/modelleri empoze etmiyen gerçek problemi ifade eden modelin kendisidir.

Kaynak problemi ifade eden çizge modeli tamamlanınca kaynak problemin çözülmesi için çizge modeli üzerinden çizge problemi olarak ifade edilmesi gerekir. Kaynak disiplindeki araştırmacılar genelde çizge modelinin tamamlanmasının akabinde çözümü getireceği yanılgısındadır. Çizge modeli için gerekli etkileşim kaynak problemin çizge problemine dönüştürülmesinde de aynı zaman alıcı süreçler yaşanır. Kaynak problem için böyle bir çizge problemi yok ise modelleme durdurulur. Ortaya çıkan model çizge modeli olarak kabul edilmez ve problem ile ilgili çalışma durdurulur. Bu aslinda modelleme başlangıcında olası modelleme sonunda kaynak problemin ne tür bir çizge probleme denk gelebileceği ile modellemeden bağımsız bir şekilde test edilmesi gerekir.

Çizge problemi çözümü çizge kuramı metotları ile çözüldükten sonra çözümlerin kaynak alana geri çevrilmesi gerekir burdada benzer etkileşim ve süreçler sözkonusur.

Bulgular bölümünde Model veya Çizge modeli ve benzer şekilde ifade ettiğimiz her model bu proje kapsamında modellenmiş olup kaynak problemler açısından özgün niteliktelerdir ve yukarda belirttiğimiz süreçlerden geçmiştir.

Kaynak problem için gerekli çözümler için çizge kuramı çözümlerinin bir kısmı için çizge algoritmaları geliştirilmiştir. Algoritmalar ortak etkileşim sonucu geliştirilmiştir.

Algoritmaların bilgisayar kodunun yazılması, gerekli verinin temini, test edilmesi ve çözümlerin kaynak alan için yorumlanması kaynak problemin grubuna aittir. Sonuçların değerlendirilmesi eğer algoritmanın iyileştirilmesi gerekliliğini doğurursa, algoritma iyileştirmesi ortak etkileşim ile yapılır.

Proje kapsamında sunulan bütün kaynak problemlerin çizge modellenmesi ve çizge kuramı çözümleri ve gerekli algoritmaların geliştirilmesi tamamlanmıştır.

Bazı kaynak problemlerin bilgisayar kodunun yazılımı, veri temini, test edilmesi ve sonuçların kaynak alan için yorumlanması aşamaları kaynak problemin grupları tarafından çalışmalara devam edilmektedir.

### 3.2.1 Hesaplanabilirliğin Karmaşıklığı ve NP-tam problemler

Bu proje kapsamında yürüttüğümüz çizge kuramı, modelleme ve uygulamarında karşımıza çıkan NP-tam problemler gerek çizge kuramı gerek bilisayar bilimleri gerek disiplinler arası problemlerin çözümü açısından oldukca önemlidir.

Çizge problemlerinin hesaplanabilirliği çizge kuramı ve bilgisayar bilimlerinin kesiştiği hesaplanabilirliğin karmaşıklığı (computational complexity) alanının içine girer. Bu kısımda çok kısa olarak NP-tam problem tanımını ve NP-tam problemleri çözmek için kullanılan yöntemlerden bahsedeceğiz (gerekli kapsamlı bilgi için bknz. [40]).

Bir algoritma eğer her $n$ elemanlı bir girdinin çözümü için en fazla $cn^k$ , $c,k$ positif sabit sayılar, gerektiriyorsa bu algoritmaya *polinom* sürede çalışan algoritma denir. $P$ kümesi bütün polinom sürede çözülebilen problemler kümesidir. Bir probleme *polinom sürede doğrulanabilinir* bir problem denir, eğer problemin sonucu için verilen bir girdinin doğru olduğunu polinom sürede doğrulayan bir algoritma var ise. $NP$ kümesi bütün polinom sürede doğrulanabilinir problemleri içerir. Tanım gereği $P$ kümesi $NP$'nin bir alt kümesidir. $S$ problemine *NP-tam* problem denir eğer, $S$ problemi $NP$ de ise ve $NP$ deki bütün NP-tam problemler polinom sürede $S$ problemine dönüştürelebiliyor ise. Yani bir başka ifade ile her hangi bir NP-tam problem $T$ yi çözmek için $S$ çözme yeterli ise (polinom sürede $T$ nin girdisi $S$ nin girdisi ve $S$ nin sonucu $T$ nin sonucuna çevrilebileme koşulu ile).

NP-tam problemlerin $P$ kümesinde olup olmadığı yani $P$ ve $NP$ nin bir birine eşit olup olmadığı bilgisayar bilimlerinin ve matematiğin en temel ve meşhur açık problemlerinden biridir.

Bu proje kapsamında baktığımız problemlerin bir çoğu NP-tam problemdir: en büyük hizip bulma problemi, en büyük bağımsız kümeyi bulma problemi en temel NP-tam problemlerdir [40]. Kanaat dinamiği için önemli olan benzeryapı dönüşümü de NP-tam problemdir [45]. Bir çizgedeki en büyük indirgenmiş eşleşmeyide bulmak NP-tam problemdir [22]. Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesini bulmakda NP-tam problemdir [61].

Elimizdeki yeni bir problemin ilk önce hesaplanabilir karmaşıklığını bulmak gerekir. Bu proje kapsamında çeşitli modelleme aşamalarından sonra elde ettiğimiz ve yukarıdaki problemlere denk gelen çizge problemi olarak ifadesi sonucunda zaten NP-tam olduğu bilinen problemlerdi.

NP-tam bir problemin çözümü için problemin ilgili özel sınıfdada NP-tam olup olmadığı araştırılır. Çeşitli yaklaşım algoritmaları verilir. Problem esnetilip kombinatorik optimizasyon yöntemleri ve diğer yaklaşımlar kullanılır [40].

Bir çizge problemi NP-tam bir problem ise, ve problemin özelinde özel bir çizge sınıfında NP-tam olma zorunluğu bulunmamaktadır. Araştırılan çizge problemi özel bir çizge sınıfı için tanımlanmış ise bu sınıf içinde problemin NP-tam olup olmadığı çok önemlidir. Global çizge hizalamalar için kullandığımız $D(2,1)$ çizgesi özel bir sınıf olmasına rağmen burda problemin NP-tam olduğunu gösterdik (Teorem 4.33). Buna karşın modelleme ve kaynak alan etkileşimi ile kütle spektrometri biyolojik çizgelerinin en büyük hiziplerinin polinom süre mümkün olduğunu gösterdik (Teorem 4.47). Çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişim için gerekli hizip sayısının bulununmasınında polinom sürede mümkün olduğunu gösterdik (Sonuç 4.70).

NP-tam problemler için polinom sürede hesap edilebilen sınırlar önemlidir. $im(G)$ için bir özdeğer alt sınırı verdik.

NP-tam problemlerin çözümü için bir diğer yol yaklaşım algoritmaları ve bu algoritmaların yaklaşım oranları (optimum sonuçtan en kötü durumda ne kadar kötü olduğu) verilir. Global çizge hizalamalar için literatürde bağımsız kümeler için geliştirilmiş belli başlı algoritmalar için bu yaklaşım oranlarını yapısal özelliklerini kullanarak verdik.

Diğer çözüm yöntemlerinin hem problemlerin yapısına uygun olmadığını düşündüğümüzden hemde araştırma alanımızın dışında kaldıklarından kullanmadık.

### 3.3 Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi

Bilinen veya bu proje kapsamında elde edilen regülarite hesaplarının büyük bir çoğunluğu çizgelerin yapısı üzerinden elde edilmiş sonuçlardır. Çizge regülaritesinin aslında *asal çizge* olarak adlandırdığımız bir takım özel çizgelere indirgenmiş parçalanması olarak ifade edilebilmesi çok kulandığımız bir yöntem Bıyıkoğlu-Civan (2015) [16]. Buna bağlı olarak temel problem bu asal çizgelerin belirlenmesi ve verilen her hangi bir çizgenin asallara indirgenmiş parçalanmasının elde edilmesidir. İndirgenmiş çizge parçalamaları çizge kuramı ve metotlarını kullanmayı dahada elverişli hale getirmektedir. İndirgenmiş eşlemelerle ilgi sonuçlarda bir çizgenin indirgenmiş eşleme yapısı ispatlarda önemli rol almaktadır.

# 4. BULGULAR

Bu bölümde proje kapsamında ulaştığımız sonuçların genel değerlendirilmesi yapılacaktır. Bu bağlamda proje önerisinde ortaya konan problemler, daha önce planlanmayan gelişmeler ve sonuçlar detaylı olarak incelenecektir. Sonuçların rahatlıkla irdelenebilmesi amacıyla, üç alanda altbaşlıklar altında değerlendirilmiştir.

## 4.1 Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları

Ağların özvektörlerinin (geometrik) yapısının bir çok önemli aşırı özdeğer problemlerinin çözülmesinde önemli bir metot olduğunu projede bulunan PI Josef Leydold, ve PI Peter Stadler ile birlikte proje sunumunda vurgulamıştık.

PI Josef Leydold (Viyana Ekonomi Üniversitesi, Avusturya) ile birlikte proje başvurusunda belirttiğimiz özvektör yapısını kullanarak AGX-Sistem sanısı olarak bilinen önemli bir cebirsel bağlılık sanısını çok büyük bir oranda cevaplandırdık. Aynı metotları kullanarak kimyasal ağaçlardan dendrimerların en büyük özdeğerinin uç değeri aldığını gösterdik.

Benzer şekilde özvektör ve özdeğer özelliklerini kullanarak bir çok alanda öneme sahip indirgenmiş eşleşmelere özdeğere bağlı bir alt sınır verdik.

Fatihcan Atay (Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences, Leipzig, Almanya) ile birlikte proje başvurusunda belirttiğimiz özdeğer ve özvektör metotları ile ağların entropisini özdeğer, kimyada kullanılan Randic indexi ve sosyal ağlarda kullanılan asortiklik kavramları ile ilişkilendirdik.

### 4.1.1 Uç Cebirsel bağlılık Problemleri

$G$ çizgesinin Laplace matrisinin $L(G) = D(G) - A(G)$ en küçük ikinci özdeğerine $G$ çizgesinin *cebirsel bağlılığı* denir. Cebirsel bağlılığın özvektörlerine *Fiedler vektörü* denir. Cebirsel bağlılığın gerek çizgelerin özdeğer ve özvektörleri araştırmasında gerek çizge kuramının diğer alanlarında gerekse çizge kuramı uygulamalarında önemli yeri vardır [8, 29].

Çizge kuramının önemli bir alanı uç (extremal) çizge problemleri üzerinedir. Uç çizge problemelerinde $n$ köşesi $m$ kenarı olan çizgelerin belirli koşullar altında aldıkları yapısal durumlar ve özellikler incelenir, aranan şartları sağlıyan çizgelerin yapıları bulunmaya ve karakterize edilmeye çalışılır. Uç özdeğer ve özvektör problemleride benzer şekillerde tanımlanır. Uç özdeğer problemlerine 50 yılı aşkın süredir çözülemeyen bir problem olan $n$ köşesi $m$ kenarı olan çizgelerden hangi çizgenin en büyük özdeğeri maximum değeri alır sorusu örnek verilebilinir [28, 29]. Komşuluk matrisinin en büyük özdeğerinin özvektörüne *Perron vektörü* denir. Uç çizgelerin kabaca neye benzedikleri ve Perron vektörünün yapısı bilinmektedir [29].

Bu soru ve diğer motivasyonlardan dolayı doğal olarak çizgelerin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri hakkında bir çok uç problemler ve araştırmalar bulunmaktadır [20, 21, 28, 29]. Bunun aksine cebirsel bağlılığın üzerine uç özdeğer ve özvektör çalışmaları yok denecek kadar azdır. Bu kadar önemli bir sabitin uç değer çalışmalarının azlığı dikkat çekicidir [41, 31]. Burda ispat tekniklerinin zorlayıcılığı önem kazandığı düşüncesindeyiz. Perron vektörünün bütün elemanları positifdir. Bu özdeğeri maximize ederken çok kullanışlıdır. Bunun aksine Fiedler vektöründe hem positif hem negatif değerler bulunduğundan ve çizgeye müdahelede (perturbation) işaret değiştirmesinin mümkün olması minimize ederken bir çok problem ile karşılaşılır. Bu noktaları bu önemli konudaki araştırma azlığının gerekçeleri olarak düşünmekteyiz.

Uç cebirsel bağlılık üzerine çoz az araştırma olmakla birlikte iki önemli sanı bunmaktadır:

**Sanı 4.1** (Godsil-Royle, 2001 [41])**.** Cebirsel bağlılığı küçük olan çizgelerin büyük çapı ve bol köprüsü vardır.

$H_1,\dots,H_k$ $k$ tane köşeleri bir birinden farklı sıralı hizip olsun. $H_i$ ile $H_{i+1}$ hizipleri arasına en az bir kenar ekliyelim, $i=1,\dots,k-1$ için. Bu çizgeye *hizipli yol* denir.

**Sanı 4.2** (Belhaiza-de Abreu-Hansen-Oliveira, AGX-Sistem Sanısı, 2005 [7])**.** $n$ köşesi $m$ kenarı olan bağlı çizgelerden cebirsel bağlılığı en küçük olan çizge hizipli yoldur ve $H_2,\dots,H_{k-1}$ hiziplerinde sadece bir köşe vardır.

Çalışmalarımızda iki önemli şonuç elde ettik.

**Teorem 4.3** (Bıyıkoğlu-Leydold, 2012 [12])**.** $n$ köşesi $m$ kenarı olan bağlı çizgelerden cebirsel bağlılığı en küçük olan çizge hizipli yoldur.

Fiedler vektörünün işaret değiştirdiği kenara *değişim kenarı* diyelim.

**Teorem 4.4** (Bıyıkoğlu-Leydold, 2012 [12])**.** $n$ köşesi $m$ kenarı olan bağlı çizgelerden cebirsel bağlılığı en küçük olan $G$ çizgesi hizipli yoldur. $G$ nin bir değişim kenarı var ise en fazla sekiz tane hizipinde birden fazla köşe bulunur.

**Teorem 4.5** (Bıyıkoğlu-Leydold, 2012 [12])**.** $n$ köşesi $m$ kenarı olan bağlı çizgelerden cebirsel bağlılığı en küçük olan $G$ çizgesi hizipli yoldur. $G$ nin bir değişim kenar sayısına göre hiziplerin birden fazla köşesi olanların sayısına üst sınır vermek mümkündür.

Ayrıca Teoremler Godsil-Royle sanısındaki beklenen yapının bulunduğunu göstermektedir.

Bu sonuçlar uç cebirsel bağlılık problemlerinde ilk kayda değer sonuçlar olma özelliğine sahiptir.

Teoremlerin ispatları proje başvurusunda belirttiğimiz çizgelerin özdeğer ve özvektörlerin yapısal özelliklerini kullanarak ve daha önce geliştirdiğimiz özgün çeşitli ispat teknikleri kullanılarak yapılmıştır [8, 11].

İspatlarda discrete Courant nodal domain teoremi, sınırlı çizgelerin Dirichlet özdeğeri ve özvektörleri, çizge operasyonlarının çizgeye, özdeğer ve özvektörüne etkisi gibi bir çok daha önce geliştirdiğimiz ve kullandığımız ispat tekniklerini içermektedir [8, 9].

PI Josef Leydold ile birlikte ESF proje başvurusunda bulunduğumuzda özvektör yapısını kullanarak AGX-Sistem sanısı olarak bilinen aşağıdaki önemli sanıya çözüm getirmek için çalışmaya başlamıştık. Yayın kabul ve basım aşamasına girdiğinde proje resmiyet kazanmadığından yayında TÜBİTAK ve ESF desteği belirtilememiştir. Buna rağmen bu yayının bu proje kapsamında ve projenin yazılmasınna temel teşkil eden bir yayın olduğunu belirtmek isterim.

#### 4.1.2 Kimyasal çizgelerin özdeğerleri ve Dendrimerlar

Kimyasal çizge kuramı hidrokarbonları köşe dereceleri en fazla dört olan çizgeler ile modeller [60]. *Kimyasal ağaçlar* köşe dereceleri en fazla dört olan ağaçlardır. Kimyasal ağaçlar alkalileri temsil eder [60]. Kimyasal çizge kuramı çizge sabitleri ile kimyasal özellikler arasında bir bağ kurmaya çalışır [60]. Kimyasal çizge kuramında bu çizge sabitlerinden en fazla araştırılanlardan bir tanesi çizgelerin komşuluk matrisin en buyük özdeğeridir $\lambda(A(G))$ [60, 28, 29].

*Dendrimerler* çok özel bir kimyasal ağaçdır. $n$ köşesi olan dendrimeri $D_n$ ifade etsin. Dendrimeri katman katman tanımlıyoruz. Sıfır katmanında tek bir köşe var ve bu köşeye kök diyelim. 1. katmanda en fazla dört köşe var ve birinci katmandaki bütün köşeler kök ile komşu. Diğer katmanları yineleme (recursion) ile tanımlıyoruz. $k$ ıncı katmandaki bir $v$ köşenin üç komşusu var $k+1$inci katmanda (eğer toplam köşe sayısı $n$ den az ise) ve $k-1$inci katmanda tek bir komşusu var. $k$ katmanındaki son köşenin üçden az komşusu olabilir toplam $n$ köşeye ulaşmak için.

Tanım gereği $n$ köşeli dendrimerdan sadece bir tane var ve bunlar kimyasal ağaçlar.

Fischermann ve ortak yazarları aşağıdaki gözlem [36] ve buna bağlı sanıda [37] bulunuyorlar:

**Sanı 4.6** (Fischermann ve ortak yazarları, 2002 [36, 37]). $n$ köşesi olan bütün kimyasal ağaçlar kümesi $T_n$ olsun. Eğer her $S \in T_n$ için $\lambda(A(S)) \leq \lambda(A(T))$ ise $T$ bir dendrimerdir.

TÜBİTAK

$G = (V,E)$ çizgesinin Collatz-Sinogowitz indexi $CS(G) := \lambda(A(G)) - \frac{2|E(G)|}{|V|}$ olarak tanımlanır.

Gutman ve ortak yazarları [42] bir önceki sonuçlar için bahsettiğimiz AGX-Sistemini kullanarak kimyasal ağaçların Collatz-Sinogowitz indexi için benzer bir sanıda bulunuyorlar.

**Sanı 4.7** (Gutman ve ortak yazarları, 2005 [42])**.** $n$ köşesi olan bütün kimyasal ağaçlar kümesi $T_n$ olsun. Her $H \in T_n$ için, $CS(H) \leq CS(D_n)$.

Çok aşikar bir biçimde bu iki sanı bir birine denk.

Biz bu iki bir birine denk sanının doğruluğunu gösterdik.

**Teorem 4.8** (Bıyıkoğlu-Leydold, 2012 [13])**.** Eğer $T$ $n$ köşesi olan bir kimyasal ağaç ise ve dendrimer değilse, $\lambda(A(T)) < \lambda(A(D_n))$.

### 4.1.3 İndirgenmiş Eşleşmeler için Özdeğer Sınırlar

Bir $G$ çizgesinin kenarlarından oluşan $M$ kümesine *eş kümesi* (matching) denir, eğer $M$ kümesindeki köşeler $M$ de en fazla bir kenarda bulunuyorsa. En fazla kenarı olan eş kümesine maximum eş denir ve $m(G)$ ile ifade edilir. $M$ eş kümesinde bulunan her köşenin $M$ de bulunan kenarı dışında $M$ deki köşeler ile $G$ çizgesinde başka komşuluğu yok ise, $M$ eş kümesine *indirgenmiş eş kümesi* (induced matching) denir. En büyük indirgenmiş eş kenar sayısına maximum indirgenmiş eş sayısı denir ve $im(G)$ ile ifade edilir. Eş bulma çizge kuramının en temel konularındandır. Her $G$ çizgesi için $m(G)$ yi polinom sürede bulmak mümkündür. İndirgenmiş eşleşme çizge kuramında görece yeni bir kavram olmakla birlikte (ilk yayınlardan biri Cameron (1989) [22]) bu konuda araştırmalar son zamanlarda hız kazanmıştır. Ayrıca girişde bahsettiğimiz ve bulgular bölümünün son alanı olarak araştırdığımız Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi için $im(G)$ nin kaçınılmaz önemli bir sabit olması indirgenmiş eşleşmelere özdeğer sınırlarına bakılmasına ayrı bir boyut katmaktadır.

$im(G)$ yi bulmak NP-tam bir problemdir [22]. $im(G)$ için diğer çizge sabitlerine bağlı sınırlarda mevcut değildir. NP-tam problem için bu tür kolay hesaplanabilinir veya diğer NP-tam problemler cinsinden ifade edilebilmesi oldukça önemlidir.

Proje kapsamında im(G) için çizgenin komşuluk matrisinin en büyük özdeğerine bağlı doğal bir alt sınır bulunmuştur. $G$ çizgesinin komşuluk matrisi $A(G)$'nin $a_{xy}$ elemanları $1$ eğer $x$ ve $y$ komşu ise, diğer bütün elemanlar sıfır (diyagonal elemanlar dahil). $A(G)$ matrisinin en büyük özdeğerini $\lambda(G)$ ile ifade edelim.

**Teorem 4.9.** [Bıyıkoğlu, 2015 [19]] $G$ bağlı bir çizge ise, $\lambda(G) \leq \frac{t+\sqrt{(t-2)^2+8im(G)t}}{2}$, $t = |V(G)| - 2im(G)$.

**Sonuç 4.10.** [Bıyıkoğlu, 2015 [19]] $G = (A,B)$ bağlı bir bipartite çizge ise, $\lambda(G) \leq \frac{r+\sqrt{(r-1)^2+4im(G)r}}{2}$, $r = |A| - im(G)$, eğer $|A| = |B|$.

$G = (A,B)$ bipartite ise ve $A$ ve $B$ deki köşe sayısı farklı olduğunda da benzer bir sonuç vermek mümkün ama bu durumda eşitsizliği ifade tarzı oldukca uzamaktadır.

**Uyarı 4.11.** Her köşe sayısı $n$ için Teorem 4.9 ve Sonuç 4.10 eşitliğini sağlayan çizgeler bulunmaktadır. Bundan dolayı sınır keskindir.

İspat için kullanılan metot proje başvurusunda önerdiğimiz özvektör yapısıdır. Bu sonuç $im(G)$ nin çizgelerin özdeğerleri ile ilişkisini inceleyen araştırmalarında ilklerinden olma özelliğine sahipdir. Literatürde $im(G)$ özdeğerler için çizge yapısal sınırları için sadece araç olarak kullan üç sonuç var: Cardoso ve ortak yazarlarının (2008) [23], P. Rowlinson (2010) [58] ve Cardoso-Rowlinson (2010) [24].

**Uyarı 4.12.** Komşuluk matrisini kullanarak $im(G)$ için manalı bir özdeğer üst sınırın çizge özdeğeri araştırmalarının en temel ve henüz tam çözülememiş problemlerinden birisi olan $n$ köşesi $m$ kenarı olan çizgelerden hangi çizgenin en büyük özdeğerinin en küçük değeri aldığı sorusu ile yakından alakalı olduğu gözlemlenmiştir.

### 4.1.4 Fiedler Vektörünün $L$-1 Normu

PI Josef Leydold ile birlikte yürüttüğümüz bir diğer araştırma konusu Fiedler vektörünün $L$-1 normunun temel özelliklerinin araştırılmasıdır. Çizgenin Laplace matrisinin ikinci en küçük özdeğerine cebirsel bağlılık olduğunu daha önce belirtmiştik. Bu özdeğerin özvektörleri olan Fiedler vektörünün matematik ve diğer alanlarda bir çok uygulaması bulunmaktadır [8, 29]. Buna karşın Fiedler vektörünün $L$-1 normu hakkında nerdeyse hiç bir şey bilinmiyor. Fiedler vektörünün olasılık, heuristik algoritmaları geliştirme, en iyileme ve buna benzer alanlarda ortaya çıkabilecek hesaplamalarda $L$-1 normunun (vektörün koordinatlarının mutlak değerlerinin toplamı) önem taşıdığını düşündüğümüzden bu konun ileride önem taşıyacağını düşünmekteyiz. Araştırmalarımızın henüz başlangıç aşamasındayız. İleride çalışmayı planladığımız problemler:

**Problem 4.13.** Çizgelerin Fiedler vektörünün $L$-1 normu hakkında neler söylenebilinir?

**Problem 4.14.** Fiedler vektörünün $L$-1 normu için ne tür doğal alt ve üst sınırlar bulunabilinir?

**Problem 4.15.** Hangi özel çizge sınıfları için Fiedler vektörünün $L$-1 normları hakında sonuçlar elde edilebilinir?

### 4.1.5 Biyolojik ağlar, dinamik sistemler ve karmaşık sistemlerde görülen ağ entropisi

Fatihcan Atay (Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences, Leipzig, Almanya) ile birlikte biyolojik ağlar, dinamik sistemler ve karmaşık sistemlerde görülen ağ entropisi kavramı üzerine araştırmalarda bulunduk.

Yaptığımız çalışmalarda ağ entropisinin ağların en büyük özdeğeri ile ilişkili olduğunu gözlemledik. Doğal olarak ağ entropisi ağların özvektörlerinin geometrik özellikleri ile ilişkili olduğundan proje kapsamında ağ entropisini inceledik. Proje kapsamında ağ entropisi, sosyal ağlarda karşılaşılan ağlarda asortiklik, en büyük özdeğer ve kimyada çokça kullanılan Randic indeksinin birbirleriyle ilişkilendirdik. Kimya, Fizik, Dinamik Sistemler, Enformasyon Kuramı, Sosyal Ağlar ve Çizge Kuramı gibi bir çok alanlar ile ilişkili olan araştırmalarımızdan ortaya çıkan bulgular:

Dinamik sistemlerde *topolojik entropi* olarak adlandırılan önemli bir kavramı kısaca çizge kuramı dilinde şu şekilde ifade edebiliriz:

$G$ yönlü bir çizge olsun. $G$ nin her köşesine seçtiğimiz bir alfabeden birbirinden farklı birer harf veriyoruz. $X$ kümesi çizgenin üzerinde dolaştığımızda oluşan bütün sonsuz harf dizilerinin kümesi olsun. $B(X,k)$ bütün $k$ uzunlunluğundaki blokların $X$ de bulunanlarının kümenin eleman sayısı olsun. *Topolojik entropi* $H(X) = \lim_{k\to\infty} \frac{\log(B(X,k))}{k}$ olarak tanımlanır. Benzer şekilde çizgelerde (yölü veya yönsüz) entropi tanımlamak mümkün: $N(G,k)$ $G$ çizgesi üzerinde $k$ uzunluğundaki bütün gezintilerin sayısı olsun. $n$ köşesi olan bir çizgede $lim_{k\to\infty}(\frac{N(G,k)}{n})^{1/k}$ $G$ çizgesinin komşuluk matrisinin en büyük özdeğeri $\lambda(A(G))$ ye yakınsar (Cvetkovic (1976) [28] yönsüz çizgeler için, Fujii (1993) [39] yönlü çizgeler için). Araştırmaya başlama sebeplerimizden biri yaptığımız şu temel gözlem olmuştur.

**Gözlem 4.16** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3])**.** Topolojik entropi $H(G) = \log(\lambda(A(G)))$.

Bu gözlem sonucu dinamik sistemlerin topolojik entropisi, dinamik sistemin çizgesinin en büyük özdeğeri ile doğal yollardan alakalı. Ayrıca çeşitli çıkarımlarımız ve literatürde var olan farklı alanlardaki sonuçlardan çizge entropisi istatistiksel mekanikte önemli olan Gibbs prensibi ve enformasyon kuramında oldukça önemli olan Shannon entropi ile çok yakından ilişkili olduğunu gösterdik [3]. Bir diğer önemli bağlantı projemizin ana sunuşunda belirtiğimiz çizgenin *Perron vektörünün* ( komşuluk matrisinin en büyük özdeğerin özvektörü) bahsi geçen kavramlar ile yakından ilişkili olduğunu gösterdik [3].

Kimyada bir çok kullanımı olan Randic indeksi organik bileşiklerde doymuş hidrokarbonlarda karbon iskeletinde yan dal oluşmasını ölçüyor (Randic (1975) [57]). Çizge dilinde *Randic indeksi* $R(G) = \sum_{xy \in E(G)} \frac{1}{d(x)d(y)}$ değerlerini ifade ediyor, $d(x)$ $x$ köşesinin derecesi (komşu sayısı). Randic indeksinin genel hali $R_r(G) = \sum_{xy \in E(G)} (d(x)d(y))^r$, $r$ her hangi sabit bir reel sayı ile tanımlanmakta.

Sosyoloji, sosyal ağlarda, biyoloji ve epidomolojide önemli olan bir kavram olan *asortiklik* (assortativity) Newman (2002) [54] tarafından tanımlanmıştır. Kısaca komşu sayısı yüksek olan köşelerin komşu sayısı yüksek olan köşeler ile bağlı olması olarak tanımlanabilinir. Araştırmalarımızda çeşitli çırakımlar sonucu bunun genel Randic indeksin özel bir şekli olarak tanımlana bileceğini gördük buna asortik(G) diyelim. Doyle ve ortak yazarları 2005 [33] yılında buna benzer bir kavram olarak her çizge için bir s-metrik(G) tanımlıyorlar. Bir çok alanda farklı ifade ve kullanımları olan kavramların aynı şey olduğunu gözlemledik.

**Teorem 4.17** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3])**.** Her $G$ çizgesi için, asortik(G)= s-metrik(G)= 2.ci Zagreb indeksi(G)= özel Randic indeks(G).

Ayrıca bu kavramlara çizgenin en büyük özdeğeri cinsinden bir üst sınır bulduk.

**Sonuç 4.18** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3])**.** $\frac{2R_r(G)}{\sum_{v \in V(G)} d(v)^{2r}} \leq \lambda(A(G))$.

Derece dizileri ve derece dağılımları bir çok bilim alanında kullanılan ve çeşitli temel sorularda karşıya çıkan önemli kavramlar. Gerçek bir çok ağın çok özel derece dizisi ve derece dağılımları var ve sistemin çeşitli özellikleri için bu iki kavram çok fazla kullanılmakta. $n$ köşesi ve köşelerin dereceleri $d_1, \ldots, d_n$ olan bir $G$ çizge varsa, $d = (d_1, \ldots, d_n)$ dizisine *derece dizisi* denir. Derece dizisi $d$ olan bütün çizgelerin kümesini $H(d)$ ile ifade edelim. Temel problemlerden birisi şu şekilde ifade edile bilinir:

**Problem 4.19.** $H(d)$ kümesinde en büyük/en küçük entropisi (asortikliği, Genel Randic indeksi olan çizgeler hangisi(leri)dir?

Bu soruya gerekli koşulu ortaya çıkararak bir cevap vermemiz araştırmalarımız sonucunda mümkün olmuştur.

TÜBİTAK

**Teorem 4.20** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3]). $H(d)$ kümesinde en büyük entropisi, asortikliği, Genel Randic indeksi ve en büyük özdeğeri maximum olan çizge sarmal şeklindedir.

Bu teorem yeter koşul getirmemektedir. Birden fazla çizgenin bu sarmal yapıya sahip olması mümkündür [3]. Ağaçlar hem çizge kuramında hemde bir çok alandaki uygulamalarında çok önemlidir. Bu teorem ağaç dizileri için hem gerekli hemde yeterli bir sonuçtur.

**Teorem 4.21** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3]). Derece dizisi $d$ olan bütün ağaçların kümesinde en büyük entropisi, asortikliği, Genel Randic indeksi ve en büyük özdeğeri maximum olan tek bir ağaç vardır. Bu tek ağacın derece ve Perron vektörü sarmal şeklindedir.

Burada sarmal yapıda olan ağacı inşaa etmek oldukça kolaydır. Çizgenin sarmal şekli köşelerin komşularının derecelerine göre tanımlanmış bir yapidir. Raporu kısa ve anlaşılır tutmak adına belirtmiyoruz [10]. Bilgi vermesi açısından Bölüm 4.1.2 tanımladığımız $n$ köşesi olan dendrimer $D_n$ nin sarmal yapısı vardır. Teoremlerin ispatlarında proje başvurusunda bahsettiğimiz özdeğer ve özvektör yapıları kullanılmıştır [8, 10, 9]. Elde ettiğimiz sonuçlar literatürde bulunan daha önceki sonuçları, yaklaşımları, hem genellemiş (örnek olarak Delermo ve ortak yazarlarının sonuçları (2003) [32]) hemde Doyle ve ortak yazarlarının öngörüleri (2005) [33] ispatlanmıştır.

Proje kapsamında doktara sonrası bursiyer olarak 2012 yılında dört ay çalışan Dr. Lale Özkahya ile birlikte derece dizileri ve derece dağılımlarında özellikle kuvvet yasası dağılımlarında ortaya çıkabilecek kaçınılmaz uç (extremal) yapılar ve bu yapıların önemli çizge sabitlerine etkileri üzerine çalıştık. Bu kapsamda ortak baktığımız bir diğer konu geometrik çizgelerin belirli çizge sabitleri için eşiklerin araştırılmasıydı. Her iki konudada çalışmalarımız henüz başlangıç aşamasındadır.

Normalize Randic indeksi olarak yeni bir tanım verdik.

**Tanım 4.22** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3]). Normalize Randic indeksi $NR_r(G) = \frac{\sum_{uv\in E(G)}(d(u)d(v))^r}{\sum_{v\in V(G)} d(v)^{2r}}$.

**Teorem 4.23** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3]). $NR(G) = \max_{r>0} NR_r(G)$ olsun, $NR(G)$ ağ entropisi formundadır.

**Teorem 4.24** (Atay-Bıyıkoğlu, 2015 [3]). Renyi ağ entropisi ve Tsalis $q$-ağ entropisi $NR(G)$ ile doğrudan ifade edilebilinir.

Tanımladığımız Normalize Randic indeksi kavramının ağ entropisini doğal yollardan ifade edilebilmesini önemli buluyoruz.

### 4.2 Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri

Proje kapsamında biyoloji, bioinformatik, dinamik sistemler, fizik, haberleşme, kriptoloji ve sosyal ağlar alanlarından gelen birinden tamamen bağımsız olan temel problemlerin çizge modellemesi ve çizge kuramı ile çözülmesi ve elde edilen sonuçları ve bulguları bu bölümde detaylı bir şekilde irdeliyeceğiz.

#### 4.2.1 Kablosuz Ağlarda Bilgi Alışverişinin Çizge Kuramı ile Modellenmesi ve Çizge Eşleşme Metotları ile Tam Çözümü

Onur Kaya (Işık Üniversitesi, Elektronik Bölümü) ile birlikte kablosuz ağlarda bilgi alışverişinin iyileştirilmesinde çizge kuramı metotlarının kullanılmasına yönelik araştırmalarda bulunduk.

Proje başlangıcı şu temel soru ile başladı.

**Problem 4.25.** Kablosuz ağlarda bilgi alışverişini sağlamak amacıyla oluşturulan yönlü ağdaki köşelerin komşularından yararlanılması durumunda hangi eşleşmelerin bilgi alışverişinde en iyi sonucu verir?

Bu problemi bir dönüşüm yaparak çizge kuramının en temel problemlerinden yönsüz ağırlıklı eşleşme problemine dönüştürdük.

**Model 4.26** (Bakşi-Kaya-Bıyıkoğlu [4])**.** Kablosuz ağlarda bilgi alışverişini ve maliyetini gösteren yönlü ağdaki bilgiler bir dönüşüm yapılarak yönsüz eşleşme problemine dönüştürülebilinir.

Araştırmalarımızdan ortaya çıkan bulgular:

**Teorem 4.27** (Bakşi-Kaya-Bıyıkoğlu, 2012 [4])**.** Kablosuz yönlü ağlarda bilgi alışverişi bu sistemi ifade eden yönsüz çizgenin kenar ağırlıklarının toplamı maximum olan eşleşme çözü ile tam olarak hızlı (polinom sürede) bir şekilde çözülür.

Yönlü ağın yönsüz ağa dönüştürülerek eşleşme problemi olarak çözülmesi kablosuz ağlarda benzer bir kaç problemin çözülmesine ve genelleştirilmesine imkan vermiştir. Ayrıca kanal kapasitesini daha verimli kullanabilen *bal peteği hücre modeli* önerilmiştir.

**Model 4.28** (Bakşi-Kaya-Bıyıkoğlu, 2013 [5])**.** Kablosuz yönlü ağlarda bilgi alışverişi bu sisteminde kullanıcıların bal peteği hücrelerinde ve komşu hücrelerdeki kanal kapasitesini kullanabilme problemini ifade eden yönsüz çizge ile ifade edilebilinir.

**Teorem 4.29** (Bakşi-Kaya-Bıyıkoğlu, 2013 [5])**.** Kablosuz yönlü ağlarda bilgi alışverişi bu sistemde kullanıcıların bal peteği hücrelerinde ve komşu hücrelerdeki kanal kapasitesini kullanabilme problemini ifade eden yönsüz çizgenin iki komşu kenarın çok kenarlı ve ağırlıklı problemi kenar ağırlıklarının toplamı maximum olan eşleşme çözü ile tam olarak hızlı (polinom sürede) bir şekilde çözülür.

**Sonuç 4.30** (Bakşi-Kaya-Bıyıkoğlu, 2013 [5])**.** Önerdiğimiz bal peteği hücreleri modeli kullanıldığında kanal kullanım kapasitesi iki katına çıkar.

### 4.2.2 BIONETALIGN: Biyokimyasal Ağlarda Fonksiyonel Ortoloji Çıkarımı Amaçlı Global Hizalamalar

Cesim Erten (Kadir Has Üniversitesi, Bilgisayar Bölümü) ile birlikte Bioinformatikte ortaya çıkan problemlerin çizge kuramı metotları ve teorik bilgisayar bilimleri ile modellenmesi ve çözülmesine yönelik çalışmalarda bulunduk. Aynı başlıklı TÜBİTAK projemiz (proje no 112E137) 2014 yılında sonuçlandı. Burada bu proje ile ilgili bölümlerini fazla bioinformatik detaya girmeden özetliyelim: Biyokimyasal iki farklı canlı ağlarında çizge kuramını ve teorik bilgisayar bilimleri metotlarını kullanarak iki canlı biyokimyasal ağları arasında benzer fonksiyonları bulmayı amaçladık.

Çizge dilinde öngördüğümüz model şu şekilde:

**Model 4.31** (Abaka-Bıyıkoğlu-Erten, 2013 [1])**.** Verilen iki $G$ ve $H$ çizgenin köşeleri arasında bir benzerlik çizgesi $B$ tanımlanıyor. $G$ ve $H$ çizgeleri farklı organizmaların biyokimyasal ağlarını temsil ediyor. $B$ benzerlik çizgesi evrim ve diğer işlevsel benzerlikler açısından manalı benzer olabilecek köşe eşlerini belirtiyor. $C = (a,b,c,d)$ köşelerinden ve $ab$ $G$ nin kenarı, $cd$ $H$ nin kenarı ve $bc, ad$ $B$ çizgesinin kenarlarından oluşan döngülerin birer köşe ile temsil ettiği bir yeni çizge $D$ tanımlıyoruz. Yeni $D$ çizgesinin kenarları dört köşeli döngülerin özel kesişimlerine göre tanımlanıyor.

**Teorem 4.32** (Abaka-Bıyıkoğlu-Erten, 2013 [1])**.** $D$ çizgesinin en büyük bağımsız kümeleri biyoinformatik ve biyoloji açısından aranılan özellikleri ifade ediyor.

Genel olarak bir çizgenin en büyük bağımsız kümelerini (kümeye ait köşelerin arasında herhangi bir kenar bulunması gerekiyor) bulmak temel NP-tam problemlerden biridir. Literatürde bilinen çeşitli bağımsız küme bulma yaklaşım algoritmaları kullanılarak makalede önerilen özgün ve yeni yaklaşım kullanılarak biyolojik anlamlı bulunan çeşitli sonuçları ve daha önce bilinen sonuçları kapsayan biyolojik sonuçları yayınladık [1].

Projenin ESF-TÜBİTAK projesi ile ilgili kısmı tam olarak $G, H$ ve $B$ çizgelerinden elde edilen $D$ çizgesinin çizge kuramı özelliklerinin ve yapısının araştırılmasına yöneliktir. Araştırmalarımızdan ortaya çıkan diğer bulgular:

$D$ çizgesi pratik öneme sahip olduğundan $D$ çizgesinin biyolojik olarak önemi olan özel hallerini inceledik. $D(2,1)$ çizgesi $G$ çizgesindeki köşelerin $H$ çizgesinden iki köşe ile eşleşmesi ve $H$ deki köşelerin $G$ den en fazla bir tane köşe ile eşleşme durumuna göre elde edilen $D$ çizgesi.

**Teorem 4.33** (Alkan-Bıyıkoğlu-Demange-Erten, 2015 [2])**.** $D(2,1)$ çizgeleri için en büyük bağımsız kümeyi bulmak NP-tam problemdir.

Geri kalan tek durum $D(1,1)$ bu zaten bilinen eşleme problemi ile polinom sürede çözülebiliniyor. Bu kadar az komşuluk için bile problemin NP-tam olması oldukça şaşırtıcı ve yaklaşım algoritmalarının kullanılmasından başka yapılabilecek bir şeyin olmadığı anlamına geliyor.

$D(2,1)$ çizgelerini yapısal özellikleri ortaya koyarak ve bunlardan yararlanarak yaklaşım algoritmaları geliştirdik ve yaklaşım algoritmalarının optimuma yaklaşma oranlarını belirledik.

**Teorem 4.34** (Alkan-Bıyıkoğlu-Demange-Erten, 2015 [2])**.** $D(2,1)$ çizgeleri beş köşeli hizip içermez.

**Teorem 4.35** (Alkan-Bıyıkoğlu-Demange-Erten, 2015 [2])**.** $D(2,1)$ çizgelerinin en büyük bağımsız kümesi en az en büyük komşu sayısının yarısı kadardır.

$D(m,1)$ çizgeleri $D(2,1)$ çizgelerinin genel hali: $D(m,1)$ $G$ çizgesindeki köşelerin $H$ çizgesinden en fazla $m$ köşe ile eşleşmesi ve $H$ deki köşelerin $G$ den en fazla bir tane köşe ile eşleşme durumuna göre elde edilen $D$ çizgesi.

**Teorem 4.36** (Alkan-Bıyıkoğlu-Demange-Erten, 2015 [2])**.** $D(m,1)$ çizgeleri en fazla $m^2$ köşeli hizip içerir.

**Teorem 4.37** (Alkan-Bıyıkoğlu-Demange-Erten, 2015 [2])**.** $D(m,1)$ çizgeleri $(2d_{\min}+2)$-pençe içermez.

**Teorem 4.38** (Alkan-Bıyıkoğlu-Demange-Erten, 2015 [2])**.** $D(m,1)$ çizgeleri için bir çok yaklaşım algoritması için yaklaşım oranları verilmiştir.

### 4.2.3 Kanaat Dinamiği ve Çizge Benzeryapı Dönüşümleri

Kaan Öztürk (Yeditepe Üniversitesi, Bilişim Bölümü) ile birlikte ağlarda kanaat dinamiği çalışmalarında bulunduk. Kanaat dinamiğinin güncel sosyal ağlarda ve çok büyük ağlardaki olası kullanımlarıda bulunmakla birlikte karmaşık dinamik sistem davranışları henüz tam olarak anlaşılamamıştır [25]. Proje kapsamında ağ yapısının kanaat dinamiğine nasıl bir etkisi olduğunu araştırdık.

Ağdaki her $v$ köşesinin (kişiler veya sistemin birim elemanlarının) bir başlangıç $k(v)$ kanaati (sayı olabilir yada daha karmaşık durumlarda vektörde olabilir) var. Köşeler $t+1$ inci zamandaki kanaat değerlerini komşu köşelerin $t$ zamanındaki kanaatlerine ve başka etmenlere bağlı bir fonksiyon ile güncelliyorlar. Sınırlı güvenilir (bounded confidence) adı verilen modellerde iki köşenin etkileşime geçebilmesi için kanaat değerlerinin farkının mutlak değerinin belirli bir eşik $d$ değerini geçmemesi gerekir. Bu tür modellerde sistem dengeye ulaştığında her iki komşu köşenin kanaat değerlerinin farkının mutlak değerinin eşik değeri $d$ den büyük olma koşulunu sağlaması gerekir [25].

Kullandığımız ağlarda kanaat dinamiğinin çizge kuramı modeli kısaca şu modele denk gelmektedir:

**Model 4.39.** $G = (V, E)$ çizgesi verilen herhangi bir bağlı çizge olsun. $G$ çizgesinin her $v$ köşesi için bir $renk(v)$ verilmiş olsun. Bu renkler $R = \{1, \ldots, r\}$ renk kümesinden olsun. $G$ çizgesinde komşu her iki $v$ ve $u$ köşesi için $|renk(u) - renk(v)| > d$, $d$ eşik değeri şartının sağlaması gerekmektedir.

**Problem 4.40.** Yukardaki şartları sağlayan en fazla kaç çeşit renk $G$ çizgesinde bulunur?

**Problem 4.41.** Maximum rengi hızla bulmak mümkünmü?

Problemler ilk bakışta klasik çizge boyama problemi (komşu köşelerin farklı renklerle boyanıp en az renk kullanılarak nasıl boyanabileceği) ile ilişkili olduğu düşünülse de aslında problemlerin benzeryapı problemleri oduğunu gösterdik.

Elimizde bağlı bir $G$ çizgesi ve köşeleri $\{1, \ldots, r\}$ olan bir $H$ çizgesi olsun. $H$ çizgesinin köşelerinin kendisine döngüleri (loop) bulunmakta. $H$ çizgesi burada kanaatlerin çizgesi. G çizgesinin komşu iki köşesi $u$ ve $v$ ve $renk(u) = a$ ve $renk(v) = b$ ancak ve ancak $a$ ve $b$ köşeleri $H$ çizgesinde komşu iseler $G$ çizgesi $H$-*kanaatli* denir.

Verilen iki $G$ ve $H$ çizgesi olsun. Eğer $G$'nin köşelerinden $H$'nin köşelerine giden ve $G$'de her komşu $x$ ve $y$ köşeleri için $f(x)$ ve $f(y)$ $H$ de komşu olan bir $f$ fonksiyonu varsa $G$ çizgesi $H$ çizgesine *benzeryapıdadır* (graph homomorphism) denir. Bir $T$ çizgesinden sadece bazı kenarların silinmesi ile elde edilen çizgeye $T$ çizgesinin *geren alt çizgesi* denir.

Araştırmalarımızdan ortaya çıkan bulgular:

**Teorem 4.42.** $G$ çizgesi $H$-kanaatlidir ancak ve ancak $G$ çizgesi $H$ çizgesinin geren bir alt çizgesine benzeryapidadır.

Benzeryapı dönüşümlerini bulmak NP-tam bir problem olduğundan [45], bu teoremin ana sonuçlarından birisi problemlerin NP-tam bir problem olduğunu gösteriyor. Ayrıca, maximum rengi bulmak için geliştirilebilecek hızlı bir algoritmanın mümkün olmadığını da gösteriyor.

**Sonuç 4.43.** $G$ çizgesinin $H$-kanaatli olup olmadığına karar verme problemi NP-tam bir problemdir.

NP-tam problemlere yaklaşım algoritmaları geliştirmek başlı başına bir önemli bir alan olduğundan ve benzeryapı yaklaşımları diğer NP-tam problemlerden farklılık gösterdiğinden [45] ve yaklaşım algoritmaları geliştirmenin uzmanlığımız olmadığından projede herhangi bir yaklaşım algoritması geliştirmedik.

Kanaat dinamiğinin kullanılabilir çözümler içermesi gerekliliğinden sezgisel yaklaşım algoritmaları ve bunların benzetimleri üzerinde Kaan Öztürk çalışmaktadır. Sezgisel yaklaşım, benzetimler ve bilgisayar programlarının yazılması ve test edilmesi ardından çıkan sonuçların yorumlanması bittiğinde sonuçların yazım aşamasına geçilecektir.

### 4.2.4 Kütle Spektrometresi Çizgeleri ve İyon Farkı Eşleştirme Problemi

Jens Allmer ve grubu (İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Moleküler Biyoloji ve Genetik Bölümü) ile birlikte Bioinformatikte ortaya çıkan problemlerin çizge kuramı metotları ile modellenmesi ve çözülmesine yönelik çalışmalar yürütüyoruz. Moleküllerin bileşenlerinin ayırt edilebilmesi için genelde kütle spektrometresi kullanılıyor. Kütle spektrometresi ile yapılan ölçümler esnasında moleküller ufak parçalara (ve belirli bir düzen takip etmenin mümkün olmadığı şekilde) ayırılarak ölçümler yapılıyor. Genel, temel ve önemli problemlerden biri: her parçanın altı iyon farkı tipinden birisi ile doğru bir şekilde eşleştirilmesi gerekiyor. Amacımız bu parçaların iyon farkı eşleştirme probleminin çizge kuramı ile modellenmesi ve çözülmesi.

Problemin üç modülü var. Birinci modül biyolojik problemin çizge olarak modellenmesi. İkinci modül biyolojik eşlendirmeye temel teşkil eden biyolojik kuralları çizge kuramı diline çevrilmesi. Üçüncü modül çizge kuramı metotlarıyla çözülmesi ve çözümlerin biyolojik olarak yorumlanması. Bu üç modülde bir birine bağlı ve modüllerin iç içe geçen durumları bulunuyor. İlk modül olan problemin çizge kuramı ile modellenmesi tamamlandı. Problemin doğası gereği çizge modelinde yeri geldikçe ufak değişiklikler olmakla birlikte problemin temel çizge modelini tamamladık. İkinci modülü teşkil eden biyolojik kuralların çizge diline aktarılması tamamlandı. Son modül için çeşitli algoritmalar geliştirildi. Şu anda çözümlerin biyolojik olarak yorumlanması ve çözümlerin iyileştirme aşamasındayız.

Proje kapsamında baktığımız kütle spektrometri iyon farkı eşleştirme probleminin çizge kuramı modellemesi (modelleme ile ilgili bir çok detay ve çizge modelleme için epey zaman alıcı bir süreci doğuran biyolojik detaylar atlanılarak) şu şekilde özetlenebilir:

**Model 4.44.** Her $v$ köşenin bir biyolojik $m(v)$ ağırlığı kütle spektometri cihazları ile belirli bir hata payı ile ölçülebiliniyor. Bu ölçümlerin gerçek değerlerinden Kırmızı-Yeşil ve Mavi-Yeşil kenar ağırlıkları adını verdiğimiz iki çizge tanımlıyoruz. Bu çizgelere *biyolojik çizgeler* olarak adlandırıyoruz. Aynı şekilde iki tane kütle spektrometri değerlerine göre *veri çizgelerini* tanımlıyoruz.

**Problem 4.45.** Veri çizgelerindeki her köşenin altı harften biri ile biyolojik olarak doğru olarak harflendirilmesi.

Problem çeşitli alanlarda günlük laboratuar ve araştırmalarda kullanılmasına rağmen henüz çözülememiştir. Literatürde bu probeleme üç standart kabul edilen yaklaşım vardır. Birinci metot Pevzner ve ortak yazarlarının yaklaşımıdır (1999, 2005, 2013) [30, 38, 48]. İkinci yaklaşım Chi ve ortak yazarlarının geliştirdiği yaklaşımdır (2010) [27]. Üçüncü yaklaşım Pan ve ortak yazarlarının metodudur (2010) [56].

Bizim proje kapsamında ana araştırma alanımız üç metodunda biyolojik çizgelerin yapısal özelliklerini göz ardı ettiği biyolojik çizgelerin yapısal özelliklerinin belirlenip bunların köşe harflendirmesine katkısını araştırmak.

Yukarıda bahsettiğimiz modeli ve bahsi geçen metotların kullanımını zorlaştıran oldukça önemli bir konu ölçümlerin kesin olmadığı ve her zaman kenarlar için bir hata payı aralığının hesaba katılmasının gerekliliği. Bu hata payı aralıkları çizgede gerçekte var olan kenarları yokmuş gibi gösterebilmekte ve gerçekte olmayan kenarları varmış gibi gösterebilmekte. Bu durum biyolojik ve çizge kuramı açısından gerek yapısal gerek niceliksel problemleri barındırdığından öncelikli olarak bu konuya açıklık getirdik.

**Modele ek:** Makina ölçüm hatası $\delta$ yeterli bir modelleme için $\delta \in [0, 0.25)$ aralığında olması gerekmektedir.

Bu hassasiyet günümüz kütle spektrometri ölçüm makinelerinin sağladığı bir hassasiyet. Hata hassasiyetinin belirlenmesi ilk defa bizim öngördüğümüz modelde dikkate alınmıştır.

**Özellik 4.46.** Biyolojik $G$ çizgesi veri çizgesi $D$ nin geren alt çizgesidir.

Veri çizgesinde kenar ama biyolojik çizgede kenar olmama halini test edebilmek için veri çizge kabul koşulu oluşturduk. Her $v$ köşesi için $[0, 2\delta]$ aralığında hata değeri tanımlamak ve bunun kabul edilebilir olduğunu kontrol etmek mümkündür.

**Modele ikinci ek:** Veri çizgesinin kabul edilebilir olması çizge kenarları üzerinde oluşturulan bir lineer programın çözümü olması ile kontrol edilebilinir.

Veri çizgesinin tamamında çözmek yerine çizgede sorun teşkil eden bir alt çizgede bu lineer programı çözmek mümkündür.

Araştırmalarımız sonucunda elde ettiğimiz önemli bulgular:

**Teorem 4.47.** Kütle spektrometri çizgelerinin maximum hiziplerinde en fazla dört köşe bulunur.

**Teorem 4.48.** Biyolojik Kırmızı-Yeşil kenarlardan oluşan çizgelerde sadece üç köşesi olan hizipler içerir.

**Teorem 4.49.** Biyolojik Mavi-Yeşil kenarlardan oluşan çizgelerde üç köşeli veya dört köşeli hizipler içerir.

**Teorem 4.50.** Biyolojik manalı 20 farklı dört köşeli hizip ve 22 farklı üç köşeli hizip bulunmaktadır.

**Sonuç 4.51.** Bu sonuçlar uygulama ve pratik açıdan öneme sahip. Genel çizgelerde hizip bulma zor bir problem olup NP-tam bir problemdir ve hızlı bir algoritma yoktur. Maximum hiziplerde en fazla dört köşe olabilmesi hem bütün hiziplerin çok hızlı bir şekilde bulunabilmesini hemde hizipler arası ilişkilerin incelebilirliğine olanak sağlıyor.

Kombinatorik kısıtlar ve çizge yapısı tersini söylemesine rağmen, biyolojik sezgi köşelerin en fazla bir biyolojik manalı hizip içerisinde olabileceği yönündeydi. Bu yönde ilk algoritmayı oluşturduk.

**Algoritma 4.52.** Kırmızı-Yeşil ve Mavi Yeşil kenarlı veri çizgelerinde her köşeyi bulunduğu biyolojik en büyük hizipe göre köşe harfini ver.

**Sonuç 4.53.** Bu aşamadaki sonuçlarımız standart üç metodun sonuçları ile her yönü ile boy ölçüşücebilecek düzeydedir.

**Sonuç 4.54.** Kırmızı-Yeşil kenarlı çizgelerden oluşan veri çizgelerinde biyolojik manalı hiziplerin içinde olan her köşeyi doğru harflendirdik.

**Gözlem 4.55.** Kırmızı-Yeşil kenarlı çizgelerde çok az köşe hizip içerisinde.

**Sonuç 4.56.** Kırmızı-Yeşil kenarlı veri çizgelerindeki doğru köşe harflendirmelerini Mavi-Yeşil kenarlı veri çizgelerinde kullama ile biririni doğrulayan bir yöntemi literatürde ilk defa geliştirdik.

**Gözlem 4.57.** Biyolojik çizgelerde sadece kombinatorik ve çizge yapısı dikkate alınarak biyolojik manali iki hizipin bir ortak köşesi olduğunu gözlemledik.

Biyolojik olarak bu tür hizip kesişimleri iki şekilde meydana gelebiliyor: Birinci durumda iki hizipin bazı köşelerinin farklı amino asitlere ait olması. İkinci durumda iki hizipde aynı amino asitde olduğunda biyologların iyon sıçraması adını verdikleri durum meydana geliyor.

**Sonuç 4.58.** Her iki hizip kesişmesi durumuda kombinatorik ve çizge kısıtları ile ayırt etmek ve doğru harflendirmek mümkün.

Ayrıca biyolojik çizgelerin yapısal özelliklerinide inceledik. $C_k$ döngüsüne $G$ çizgesinde indirgenmiş döngü denir eğer, $k > 3$ ve döngünün köşelerinin döngü kenarları dışında $G$ çizgesinde başka bir kenarı yoksa. $G$ çizgesi *üçgenlenmiş çizgedir* ancak ve ancak $G$ çizgesinde bir $C_k$ döngüsü yok ise her hangi bir $k \geq 4$ değeri için.

**Teorem 4.59.** Biyolojik çizgelerde biyolojik manalı sadece indirgenmiş $C_4$ döngüleri olabilir.

**Sonuç 4.60.** Biyolojik manalı olabilecek indirgenmiş $C_4$ döngülerinden hepsi belirlenmiştir.

**Teorem 4.61.** Biyolojik çizgeler $4$-üçgenlenmiş çizgeler sınıfının üyeleridirler.

Bu sonuç gösteriyorki biyolojik çizgeler üçgenlenmiş çizgelerden çok farklı değiller ve yapısal çizge kuramında tanımlanmış ve araştırılmış $4$-üçgenlenmiş çizgeler sınıfının üyeleriler. $k$-üçgenlenmiş enfazla indirgenmiş döngüsü $C_k$ olan çizgelere deniliyor.

**Sonuç 4.62.** Bu sonuçlar kütle spektrometri çizgelerine çizge kuramı açısından yaklaşımda yeni bir yön açmaktadır. Bir çok NP-zor ve NP-tam problem k-üçgenlenmiş çizgelerde polinom hızında etkin olarak çözülebilir.

Bunun ötesinde bir çok biyolojik problemin çizge kuramı ile etkin çözülmelerine zemin hazırlıyabilecek düzeyde bir etkileşim söz konusudur.

**Yeni DAG algoritması:**

Harf dizilerini oluşturmak için kendi yaklaşımımızdan elde ettiğimiz çizgeden yararlanıyoruz. Harf dizisini oluşturmak için kullandığımız çizge döngü içermiyen yönlü bir çizgedir (DAG= directed acyclic graph). Bu DAG çizgesinin kökünden (root) belirli özelliklere sahip yaprakları arasındaki yönlü yollar olası bütün harf dizilerini vermektedir (yönlü kenarların ağırlıkları bir harf ile temsil edilmektedir).

**Teorem 4.63.** Biyolojik kütle spektrometri değerlerini içeren çizgede biyolojik yapıyı betimliyen harf dizisi yönlü döngü içermiyen yönlü bir çizgenin kökünden belirli yapraklarına giden yönlü yollar ile ifade edilebilinir.

DAG'ın kökünden belirli yapraklarına doğru üstsel sayıda yol bulunabilinir, buna bağlı olarak üstsel sayıda harf dizisi bulmak mümkün. Bu hem teorik (çizge kuramında ve bilgisayar bilimlerinde tercih edilmeyen ve aşılması mümkün olmıyan problem karmaşıklığı demektir). Ayrıca pratik anlamda problemler yaratmaktadır (hesaplama süresi hissedilir derecede artmaktadır). Modelin gerçek verilerde 20000 köşesi olan bir DAG oluşumuna kadar geçen süre milisaniyeler tutarken bütün yolların ve harf dizilerinin belirlenmesi yarım saate varan süreler almaktadır. Olabilecek bütün harf dizilerini oluşturmak yerine belirli biyolojik kıstaslarda güncel dizilerden en iyi $k$ (k sabit bir sayı) tanesini seçip aşağıdan yukarıya (yapraklardan köke doğru) dizileri oluşturmak ve aralarından her zaman kıstaslara göre en iyi $k$ tanesini iletmek yolu ile oldukca hızlı (kabaca bir iki saniyede) bir şekilde diziler (yaklaşık milyon tane) üretebildik.

**Algoritma 4.64** (Yeni Harf Dizisi Oluşturma Algoritması)**.** DAG da yapraklardan köke doğru biyolojik kıstaslara göre en iyi $k$ güncel diziyi aktar.

Bu algoritma olabilecek en iyi zaman olan lineer zamanda $O($köşe sayısı + kenar sayısı$)$ çalışmaktadır.

Şuanda çözmeye çalıştığımız problem bu en iyi $k$ tanesini seçme kriterlerinin biyolojik olarak en uygun adayları içermesini sağlamak. Bu problemi aştığımızda ana problemi tamamen çözmüş olacağız.

### 4.2.5 Çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişim Problemlerinin Çizge Kuram Metotları ile Modellenmesi ve Çözülmesi

Berkant Ustaoğlu (İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Matematik Bölümü) ile birlikte çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişimde gizlilik, kimlik tanıma ve gizli mahremiyetin sağlanması için kullanılan şifreleme algoritmaları üzerine çalışıyoruz. Kişi sayısı dördü geçtiğinde bu tür algoritmalar verimsiz çalışmaktadır. Çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişim problemi henüz iyi anlaşılmış bir problem olmadığından buradaki problemlerin çizge kuramı metotları ile çözülmesi üzerine bir yıldır çalışmaktayız.

**Problem 4.65.** Belirli kişiler arasından çok kişili kayıtsız bir grup oluşturabilmek için kişilerin kimlerle grup oluşturmak istediğini ve bu bilgilerin başka kişiler tarafından bilinmemesi nasıl mümkün olur?

**Problem 4.66.** Olası çok kişili grubun hızlı bir şekilde nasıl oluşturulur?

**Problem 4.67.** Bu oluşturulan grupda kişinin isteği doğrultusunda aktif rol almaması ve bunun diğer grup katılımcıları tarafından fark edilmemesi için nasıl bir çizge ve hangi yollardan elde edilmelidir?

Yukardaki problemlerin çözümüleri için gereken çizge modelinin formel bir tanımını yaptık. Kriptolojik teknik detaya girmeden kısaca bahsetmek gerekirse:

**Model 4.68.** Grup oluşturma eylemi bir kişinin insiyatifi ile başlıyor ve grup oluşturma çağrısını kendi listesindeki bütün kişilere gönderiyor. (Bu varsayımın verimi doğrultusunda hepsi yerine bir bölümüne göndermesi durumunu ilerliyen aşamalarda dikkate alıcağız ve inceleyeceğiz.) Gelen çağrı üç kişinin kriptolojik olarak güvenli iletişimi yoluyla dolaylı yollardan grup kurma çağrısı başlatan kişiye geliyor ve bu bilgiler doğrultusunda grup kurma çizgesi oluşmuş oluyor.

**Sonuç 4.69.** Grup kurma çizgesindeki hizipler (clique) aranılan özelliklere sahip grupları ifade eder.

Çizgelerde hizip bulma problemi en temel NP-tam problemlerden biridir. Buna karşın problemin etkin çözümü için hızlı hizip bulma algoritmaları gerekmektedir.

Yaptığımız literatür taramasında problemin pratik çözümüne önemli etkisi olabilecek şu önemli gözlemleri bulduk:

1990 yıllarda çeşitli antropologlar beynin neokorteks bölümünün sınırları doğrultusunda insan beynin yaklaşık 150 ile 300 civarında arkadaş veya sosyal ilkişki yürütebileceğini çeşitli alan çalışması, empirik ve teorik metotlar ile ortaya koymuşlardır. Bunlardan en yaygın kabul göreni Dunbar in 1992 yılında [34] arkadaş sayısının 150 civarında olduğudur ve *Dunbar sayısı* olarak tanımlanır. Dunbar sayısından yola çıkarak Saramaki ve ortak yazarları 2014 yılında sosyal ağlardaki gerçek verinin istatiksel analizlere dayanarak sosyal ağlardada komşu sayısının yaklaşık 150 civarında olduğunu gözlemlemişlerdir [59]. Bu çalışmada ayrıca zaman içerisinde yeni komşuların eski komşuların yerini aldığı gözlemlenmiştir [59]. Bu çalışmanın bir diğer önemli gözlemi belirli bir zaman aralığında sosyal ağlarda bir kişi yaklaşık 30 ile 40 kadar komşusu ile irtibata geçtiğidir [59].

**Sonuç 4.70.** Bu gözlemler komşu sayısının üstten sabit bir sayı ile (yaklaşık 150 sayısı) sınırlı olduğunu gösteriyor. Komşu sayısının üstten sınırlı olması çizgelerde hizip bulma problemini polinom sürede çözülebilinir hale getirmektedir.

Ayrıca büyük hiziplerin 30 köşeyi geçmiyeceği ve on ile on beş arasında köşesi bulunan hiziplerin çok sayıda olabileceği umudu doğmuş oluyor. Bu tip köşe sayısı az çizgelerde daha etkin literatürde var olan hizip bulma yaklaşım algoritmalarının kullanılabileceğini düşünüyoruz. Hizip sayısının sosyal ağların derece dağılımının tipik özelliği olan kuvet yasasına göre dağıldığı bilgisinin hizip bulmaya etkisini araştırıyoruz.

Önerilen hizip modelinin kriptolojik açıdan güvenli kabul edilebilmesi için modelin tamamının kriptolojik açıdan incelenmesi ve irdelenmesi ve çeşitli testlerden başarı ile geçmesi gerekmektedir. Bu süreç uzun sürmekle birlikte aynı zamanda yoğun bir bilgisayar hesaplamaları, algoritma adaptasyonları, uygun veri yapıları seçimi ve gerçek veri elde etmek için zaman yoğun bir süreç gerektirmektedir. Ayrıca hizip bulmak için önerdiğimiz yaklaşımlar test edilmektedir. Kriptolojik güvenlik, hız, verim, simulasyon ve kriptolojik güvenlik irdelenmesi Berkant Ustaoğlu tarafından halen yapılmaktadır. Kriptolojik güvenlik testleriden sonra yazım aşamasına geçilecektir.

### 4.3 Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi

Yusuf Civan (Süleyman Demirel Üniversitesi, Isparta) ile birlikte cebir ve topoloji sabitlerinin anlaşılması ve bu sabitler ile ilgili problemlerin çözülmesinde çizge kuramı ve kombinatoriyel topoloji metotlarının kullanılması üzerine beş seneden fazla süredir bir program yürütmekteyiz [14, 15, 16, 17, 18]. Bu konu ile ilglili Tübitak projemiz (proje no. 111T704) 2014 yılında sonuçlanmıştır. Bu bölümde sunacağımız bulgular 2014 yılı sonu ve özellikle 2015 yılında ESF-Tübitak projesi kapsamında beklenmedik yeni sonuçları içerir.

Castelnuovo-Mumford regülaritesi (bu bölümde kısaca regülarite diyecegiz) kommutative cebir ve ayrık geometrinin en temel sabitlerinden biridir [44]. Regülarite üzerinde çalışılan bir objenin (simpleksel kompleks, modül, balya, çizge, hiperçizge), genel yapısı kadar yerel yapısındaki karmaşıklığı ölçmek için kullanılabilecek önemli bir araçtır. Regülaritenin üzerinde çalışılan objenin niteliğine göre farklı tanımları olsa da, bu tanımların denkliğini göstermek zor değildir [51]. Biz burada çizgeler için ve proje raporunu çok uzun tutmamak adına köşe idealleri için olan tanımı çok kısaltarak veriyoruz. Morey-Villarreal in kapsamlı inceleme makalesi konu için gerekli detay ve ilgili alanların etkileşimini gösterir [51].

Bir $G=(V,E)$ çizgesi verilmiş olsun. $V=\{x_1,\ldots,x_n\}$ olmak üzere eğer $I_G$ ideali $R=\Bbbk[V]$ üzerinde kare-serbest ve $x_ix_j$ $G$ nin $ij$ kenarları tarafından üretiliyorsa $I_G$ idealine $G$'nin *kenar ideali* denir. $G$ nin regülaritesi $G$'nin kenar halkasının regüleritesi $reg(G):=reg(R/I_G)$ olarak tanımlanır. Cebirsel olarak halkasının regüleritesinin nasıl tanımlandığını burada vermiyoruz (bknz. [51]).

Verilen her hangi bir $I$ kare-serbest monomial idealin regülarite hesabı oldukça zordur. Ayrıca ideal ile alakalı kombinatoriyal nesnenin özelliklerinden ve sınıflandırılmasında çoğu zaman problemin çözümünü kolaylaştırmamaktadır. Regülarite bir cebirsel değişmez olmakla birlikte regülerite hesabında değişmeli cebir metodolojisi ana hesaplama yöntemidir.

Çalışmalarımızdan ESF-Tübitak projesi kapsamında öne çıkan bulgular:

$G$ bir çizge ve $x$ bir köşe olsun. $x$ kösesinin komşularını ifade eden kümeye $x$ nin *(açık) komşu kümesi* $N(x)$ denir. $N[x]=N(x)\cup\{x\}$ $v$ kösenin *kapalı komşu kümesi* denir.

Regülarite hesabı genelde $\mathrm{reg}(G)=\mathrm{im}(G)$ eşitliğini sağlayan çizge sınıflarının belirlenebilmesi üzerine yoğunlaşmıştır [44, 51, 61, 15]. Bu eşitliğin sağlandığı bir $G$ çizgesi için, eğer $\mathrm{im}(G)=n$ ise $\mathrm{reg}(G)=\mathrm{reg}(nK_2)$ olması anlamına gelir. Burada $nK_2$ çizgesi regülaritesi $n$ olan ve bu özellikle en az köşeye sahip olan çizgedir. Bu gözlemden yola çıkarak çizgeler teorisinin bir çok alanında önemli bir yere sahip olan "kritik çizge" kavramıyla eşlendiğinde regülarite açısından da böyle bir kavramın önemli olabileceği doğal bir önsezisidir.

**Tanım 4.71** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [16])**.** $G=(V,E)$ bir çizge ve $\Bbbk$ bir cisim olsun. Eğer her $x\in V$ köşesi için $\mathrm{reg}_{\Bbbk}(G)=k$ ve $\mathrm{reg}_{\Bbbk}(G-x)=\mathrm{reg}_{\Bbbk}(G-N_G[x])=k-1$ olacak şekilde bir $k\geq 1$ varsa, $G$ çizgesine $\Bbbk$ cismi üzerinde bir *asal çizge* denir. Eğer $G$ çizgesinin asal olması katsayı cisminin karakteristiğinden bağımsız ise $G$ ye *mükemmel asal çizge* denir.

Örneğin $K_2$ çizgesi, her $n \geq 4$ için $\overline{C_n}$ çizgesi ve her $k \geq 1$ için $C_{3k+2}$ döngü çizgesi birer mükemmel asal çizgedirler.

Tanım gereği bir çizgenin asal olup-olmaması kendisi kadar üzerinde çalışılan cismin karakteristiğine de bağımlıdır. Araştırmalarımızda karakteristiğe bağlı asal çizgeler bulduk [16].

**Sonuç 4.72.** Her $G$ çizgesi $\mathrm{reg}(G) = \mathrm{reg}(F)$ olacak şekilde bir indirgenmiş asal $F$ altçizgesine sahiptir.

**Tanım 4.73** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [16])**.** $\mathcal{H} = \{H_1, \ldots, H_r\}$ çizge ailesi $G$ çizgesinin ikişer ikişer köşe ayrık indirgenmiş altçizgelerinden oluşsun. Eğer $E(H_i) \neq \emptyset$ ve $G[\cup_{i=1}^r V(H_i)] \cong \cup_{i=1}^r H_i$ ise ve ayrıca $\mathcal{H}$ ailesi bu özelliklerle maksimal ise $\mathcal{H}$ ailesine $G$ nin bir *indirgenmiş ayrışımı* denir.

**Tanım 4.74** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [16])**.** $\mathcal{H} = \{H_1, \ldots, H_r\}$ ailesi $G$ çizgesinin bir indirgenmiş ayrışımı olsun. Eğer her bir $H_i$ altçizgesi asal çizge ise $\mathcal{H}$ ailesine $G$ nin bir *asal ayrışımı* denir ve $G$ nin asal ayrışımlarının kümesi $\mathcal{PD}(G)$ ile gösterilir. Ayrıca, eğer her $i, j \in [r]$ için $H_i \cong H_j \cong H$ sağlanıyor ise $\mathcal{H} = \{rH\}$ şeklinde yazılır.

Tanım gereği her $G$ çizgesi için $\mathcal{PD}(G)$ boş küme değildir.

Proje kapsamında regülarite için ulaşılan en önemli sonuçlardan bir tanesi her hangi bir çizgenin regülaritesinin aslında o çizgenin sahip olduğu asal ayrışımlardan hesaplanabileceğinin ispatıdır.

**Teorem 4.75** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [16])**.** $G$ her hangi bir çizge ise

$$\mathrm{reg}(G) = \max\{\sum_{i=1}^{r} \mathrm{reg}(H_i) \colon \{H_1, \ldots, H_r\} \in \mathcal{PD}(G)\}$$

eşitliği sağlanır.

**Tanım 4.76** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [16])**.** Teorem 4.75 deki eşitliği sağlayan bir asal $\mathcal{H}$ ayrışımına $G$ nin bir *asal parçalanışı* denir ve $G$ nin asal parçalanışlarının kümesi $\mathcal{PF}(G)$ ile gösterilir.

Asal çizgeler ve asal parçalanış kavramlarını kullanarak oldukça önemli yeni sonuçlara ulaştık:

$im(G)$ regüleriteye doğla bir alt sınır vermektedir.

**Teorem 4.77** (Katzman, 2006 [50]). $im(G) \leq reg(G)$.

Katzman'nın önemli temel alt sınır sonucu yukarda kullandığımız asal çizge kavramı ve Teorem 4.75 sonucu olarak da görülebilinir:

Daha önemlisi asal çizge kavramını kullanarak $im(G)$ ye bağlı bir üst sınır vermemiz mümkün oldu.

**Teorem 4.78** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [16]). $reg(G) \leq im(G)\Delta(G)$.

Burada $\Delta(G)$, $G$ deki derecelerin en büyüğü. Bu üst sınırın oldukça temel bir üst sınır olduğunu düşünüyoruz. Bu üst sınır $im(G)$ ye bağlı bulunan ilk üst sınır olma özelliğini taşımaktadır.

Bu Teoremin ispat tekniklerini kullanarak çizge kuramında önemli bir yeri olan *pençesiz* çizgeler için keskin bir üst sınır vermekte. $G$ çizgesine pençesiz çizge denir eğer $G$ çizgesi indirgenmiş $K_{1,3}$ çizgesini içermiyor ise.

**Teorem 4.79** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [16]). $G$ çizgesi pençesiz bir çizge ise, $reg(G) \leq 2im(G)$.

Bu sonuç Nevo'nun [53] çok özel bir pençesiz çizge ailesi sonucunuda genellemektedir. Ayrıca Teorem 4.79 Woodrofe'un [61] beklentisi ve sanısını doğrulamaktadır.

$G$ çizgesinin en büyük eşkümesindeki kenar sayısına $m(G)$ denir ve $reg(G) \leq m(G)$ eşitsizliği her zaman geçerlidir [43]. Çok yakın bir zamanda Hibi ve ortak yazarları [47] bu sonuçtan yola çıkarak şu doğal soruyu sormuştur:

**Soru 4.80** (Hibi ve ortak yazarları, 2015 [47]). $im(G) < reg(G) = m(G)$ koşulunu sağlıyan kaç tane çizge vardır?

Bu soruyu asal çizgeler ve asal parçalanışları kullanarak cevap verdik.

**Teorem 4.81** (Bıyıkoğlu-Civan, 2015 [17]). $C_5$ döngüsü $im(G) < reg(G) = m(G)$ özelliğini sağlayan tek çizgedir.

# 5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu bölümde proje kapsamında elde edilen sonuçların yolaçtığı bazı açık problemlerin irdelenmesi yapılacaktır.

## 5.1 Çizgelerin Özdeğer, Özvektör Yapıları ve Uygulamaları

Fiedler vektörünün $L$-1 normunun temel özelliklerinin araştırılmasının henüz başlangıç everesinde ama cebirsel bağlılığın ve Fiedler vektörünün kullanıldığı bir çok alan için önemli olacağı düşüncesindeyiz.

Ağ entopisi üzerine elde ettiğimiz sonuçlarının bir çok alanda kullanılacağı görüşündeyiz. Uygulamadan gelen bir çok problem doğası gereği yönlü çizgeler. Yönlü çizgelerin özdeğer ve özvektörlörü için çok az sonuç ve metot bulunmaktadır. Elde ettiğimiz teoremlerin yönlü çizgeler için benzer sonuçları üretmek gerek çizge kuramı gerek ise çizge kuramının uygulamaları için oldukça önemli. Elde ettiğimiz sonuçları yönlü çizgeler için geçerli olma umudu bulunmaktadır. Perron-Frobenius theoremi (bknz. [8, 29, 41]) yönlü çizgenin en büyük özdeğeri reel bir sayı ve Perron vektörünün hepsi positiv değerler aldığını söyler. Buna bağlı olarak sonuçlarımızın genellemesi için yönlü çizgelerin özdeğer ve özvektör ispatlarındaki metodik tıkanıklıklığın ilk etapda aşılabileceği umudu bulunmaktadır. Sonuçlarımızın yönlü çizgelere aktarılması başlı basına bir araştırma konusudur.

## 5.2 Çizge Kuramı Modellemeleri ve Çözümleri

Kütle Spektormetri verilerinden elde edilen biyolojik çizgelerin Teorem 4.61 bağlamında 4-üçgenlenmiş çizgeler sınıfının üyeleri olmasının önemli sonuçlar doğurabileceğini düşünmekteyiz. Bulgular kısmında bahsettiğimiz kimyasal çizge kuramının organik moleküller için derecesi en fazla dört olan çizgeleri kullanması ve bu sınıfda çizge kuramı metotlarını uygulaması [60] benzer bir şekilde biyolojik çizgelerinde 4-üçgenlenmiş çizgeler sınıfı ile ifade edilebilmesini çağrıştırmaktadır.

4-üçgenlenmiş çizge sınıfının çok iyi bilinen bir çizge sınıfı olması ve bir çok NP-tam problem 4-üçgenlenmiş çizgelerde polinom hızında çözülebiliyor olaması şu sorulara cevap aramaya itiyor:

**Soru 5.1.** Biyolojik önemi olan hangi tip sorular biyolojik çizgelerin 4-üçgenlenmiş çizgeler sınıfında çözülebilinir?

### 5.3 Çizgelerin Castelnuovo-Mumford Regülaritesi

Asal çizge kavramı çizgelerin ve benzer şekilde simpleksel komplekslerin regületitesinin asal çizgelerin belirlediğini gösterdiğinden, asal çizgelerin tasvirinin ve asal çizgelerin anlaşılmasının regülerite için oldukça önemli olduğunu düşünüyoruz.

Bu noktadaki en önemli soru:

**Soru 5.2.** Asal çizgelerin kombinatorial bir karakterizasyonu varmıdır?

Bu soru her ne kadar önemli olsada, bu proje çalışmasının sonuçları altında cevabının da pek kolay olmayacağı aşikardır. Bu önseziden yola çıkarak asal çizgelerin regüleritesi için üst sınırlar bulmak önemli hale gelmektedir. Teorem 4.78 genel bir üst sınır vermektedir.

**Soru 5.3.** Asal çizgeler $G$ için $reg(G) \leq im(G)\Delta(G)$ üst sınırı iyileştirilebilinir mi? Başka üst sınırlar bulmak mümkünmü?

Sorularının araştırılması gereken önemli sorular olduğunu düşünüyoruz.

$G$ çizgisinin indirgenmiş en küçük döngüsüne *kuşak* (girth) denir. Araştırmalarımızda elde ettiğimiz çeşitli sonuçların ortak bir yorumu ve çıkarımı: Bir çok önemli çizge sınıfında eğer kuşak$(G) \geq 5$ ise, $reg(G) \leq 2im(G)$ olmasıdır. Bunu bir sanı olarak ifade etmek ve araştırmak bir diğer önemli soru.

**Sanı 5.4.** Eğer kuşak$(G) \geq 5$ ise, $reg(G) \leq 2im(G)$ eşitsizliği sağlanır.

# Kaynakça


[1] G. Abaka, T. Bıyıkoğlu, and C. Erten, *CAMPways: Constrained Alignment Framework for the Comparative Analysis of a Pair of Metabolic Pathways,* Bioinformatics, 29 (13): 145-153, 2013.

[2] F. Alkan, T. Bıyıkoğlu, M. Demange and C. Erten, *Constrained Alignments of a Pair of Graphs,* Discrete Applied Mathematics, under review (2015).

[3] F. Atay and T. Bıyıkoğlu, *Graph entropy, degree assortativity, and hierarchical structures in networks,* under review (2015).

[4] S. Bakşi, O. Kaya, and T. Bıyıkoğlu, *Optimal and Near-optimal Partner Selection Algorithms in Cooperative OFDMA,* IEEE Wireless Communications and Networking Conference (WCNC 2012), Paris, France, April 2012.

[5] S. Bakşi, O. Kaya, and T. Bıyıkoğlu, *Enabling Cooperation, Resource Allocation and Receiver Selection Across Cells: Complementary Fractional Frequency Reuse,* IEEE PIMRC 2013, London, UK, Sept. 2013.

[6] R.B Bapat, *Graphs and matrices,* Springer, 2010 and 2014.

[7] S. Belhaiza, N.M.M. de Abreu, P. Hansen, C.S. Oliveira, *Variable neighborhood search for extremal graphs 11. Bounds on algebraic connectivity,* in: O. Marcotte, D. Avis, A. Hertz (Eds.), Graph Theory and Combinatorial Optimization, Springer, 2005, pp. 1–16.

[8] T. Bıyıkoğlu, J. Leydold, and P.F. Stadler, *Laplacian eigenvectors of graphs: Perron-Frobenius and Faber-Krahn type theorems,* Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1915, Springer, (2007).

[9] T. Bıyıkoğlu, and J. Leydold, *Faber-Krahn type inequalities for trees,* J. Combin. Theory Ser. B, 97:159–174, (2007).

[10] T. Bıyıkoğlu, and J. Leydold, *Graphs with given degree sequence and maximal spectral radius,* Electron. J. Combin., 15: Research Paper 119, (2008).

[11] T. Bıyıkoğlu, and J. Leydold, *Algebraic connectivity and degree sequences of trees,* Linear Algebra Appl., 430:811–817, (2009).

[12] T. Bıyıkoğlu, and J. Leydold, *Graphs of given order and size and minimum algebraic connectivity,* Linear Algebra and its Applications, 436:2067–2077, (2012).

[13] T. Bıyıkoğlu, and J. Leydold, *Dendrimers are the unique chemical trees with maximum spectral radius,* MATCH. Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 68:851–854, (2012).

[14] T. Bıyıkoğlu and Y. Civan, *Four-cycled graphs with topological applications,* Annals Combin., 16 (2012), 37-56.

[15] T. Bıyıkoğlu and Y. Civan, *Vertex-decomposable graphs, codismantlability, Cohen-Macaulayness, and Castelnuovo-Mumford regularity,* Electronic J. Combin., 21:1, (2014), #P1, 1-17.

[16] T. Bıyıkoğlu and Y. Civan, *Castelnuovo-Mumford regularity of graphs,* Combinatorica, under review, (2015).

[17] T. Bıyıkoğlu and Y. Civan, *Prime Graphs, Matching and Regularity,* under review, (2015).

[18] T. Bıyıkoğlu and Y. Civan, *The virtual induced matching number and regularity of Cohen-Macaulay graphs of girth at least five,* under review, (2015).

[19] T. Bıyıkoğlu, *Spectral radius bounds for induced matching of a graph,* in preparation, (2015).

[20] A.E. Brouwer and W.H. Haemers, *Spectra of graphs,* Springer, (2012).

[21] R.A Brualdi, *The mutually beneficial relationship of graphs and matrices,* CBMS Series in Mathematics, American Mathematical Society, (2011).

[22] K. Cameron, *Induced matchings,* Discrete Applied Math., 24 (1989), 97-102.

[23] D.M. Cardoso, C.J Orestes, C. Delorme, and P.C Silva, *Efficient edge domination in regular graphs,* Discrete Appl. Math., 156:3060–3065, (2008).

[24] D.M. Cardoso, P. Rowlinson, *Spectral upper bounds for the order of a $k$-regular induced subgraph,* Linear Algebra Appl., 433:1031–1037, (2010).

[25] C. Castellano, S. Fortunato, and V. Loreto, Statistical physics of social dynamics, Reviews of Modern Physics, Vol. 81, No. 2. 591, (2009).

[26] G. Castelnuovo, *Sui multipli di una serie lineare di gruppi di punti appartente ad una curva algebrica,* Rend. Circ. Math. Palermo 7 (1893), 89–110.

[27] H. Chi, R.X. Sun, B. Yang, C.Q. Song, L.H. Wang, C. Liu, Y. Fu, Z.F. Yuan, H.P. Wang, S.M. He, *pNovo: De novo Peptide Sequencing and Identification Using HCD Spectra,* J. Proteome Research, 9:2713–2724, (2010).

[28] D.M. Cvetkovic, M. Doob, and H. Sachs, *Spectra of graphs,* Johann Ambrosius Barth, Heidelberg, 3rd edition, 1995.

[29] D. Cvetković, P. Rowlinson, and S. Simić, *An introduction to the theory of graph spectra,* Cambridge University Press, (2010).

[30] V. Dancik, T.A. Addona, K.R. Clauser, J.E. Vath, P.A. Pevzner, *De novo peptide sequencing via tandem mass spectrometry,* J. Computational Biology, 6:327–342, (1999).

[31] N.M.M. de Abreu, *Old and new results on algebraic connectivity of graphs,* Linear Algebra Appl., 423:53–73, (2007).

[32] C. Delorme, O. Favaron, and D. Rautenbach, *Closed formulas for the numbers of small independent sets and matchings and an extremal problem for trees,* Discrete Appl. Math., 130(3):503–512, 2003.

[33] J.C. Doyle, D.L. Alderson, L. Li, S. Low, M. Roughan, S. Shalunov, R . Tanaka, and W. Willinger, *The robust yet fragile nature of the Internet,* PNAS, 102(41):14497–14502, 2005.

[34] R.I.M. Dunbar, *Neocortex size as a constraint on group size in primates,* Journal of Human Evolution, 22:469–493, (1992).

[35] D. Eisenbud and S. Goto, *Linear free resolutions and minimal multiplicity,* J. Algebra 88 (1984) 89–133.

[36] M. Fischermann, I. Gutman, A. Hoffmann, D. Rautenbach, D. Vidovic, L. Volkmann, *Extremal chemical trees,* Z. Naturforsch. 57a: 49–52, (2002).

[37] M. Fischermann, A. Hoffmann, D. Rautenbach, L. Szkeley, L. Volkmann, *Wiener index versus maximum degree in trees,* Discr. Appl. Math. 122:127–137, (2002).

[38] A. Frank, Pevzner, P. Pevzner, *PepNovo: De novo peptide sequencing via probabilistic network modeling,* Analytical Chemistry, 77:964–973, (2005).

[39] M. Fujii, M. Nakamura, Y. Seo, and Y. Watatani, *Graphs and Kolmogorov's complexity,* Math. Jap., 44(1):113–117, 1996.

[40] M.R. Garey and D.S. Johnson, *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness,* Freeman, San Francisco, 1978.

[41] C. Godsil and G. Royle, *Algebraic graph theory,* Springer, 2001.

[42] I. Gutman, P. Hansen, H.M. Melot, *Variable neighborhood search for extremal graphs, 10. Comparison of irregularity indices for chemical trees,* J. Chem. Inf. Model. 45:222–230, (2005).

[43] H.T. Há and A. Van Tuyl, *Monomial ideals, edge ideals of hypergraphs, and their graded Betti numbers,* J.Alg. Combin., 27 (2008), 215-245.

[44] H.T. Há, *Regularity of squarefree monomial ideals,* Connections Between Algebra, Combinatorics, and Geometry, Springer Proc. in Math. & Stat., 76, (2014), 251-276.

[45] P. Hell and J. Nesetril, Graphs and homomorphisms, Oxford University Press, (2004).

[46] G. Hermann, *Uber die Frage der endlich vielen Schritte in der Theorie der Polynomideale,* Math. Ann., 95 (1926), 736–788..

[47] T. Hibi, H. Higashitani, K. Kimura, and A. Tsuchiya, *Dominating induced matchings of finite graphs and regularity of edge ideals,* J. Algebraic Combinatorics, to appear (2015).

[48] K. Jeong, S. Kim, P.A. Pevzner, *UniNovo: a universal tool for de novo peptide sequencing,* Bioinformatics, 29:1953–1962, (2013).

[49] J. Kallrath (Editor), *Modeling languages in mathematical optimization,* Kluwer Academic Publishers, (2004).

[50] M. Katzman, *Characteristic-independence of Betti numbers of graph ideals,* J. Combin. Theory, Ser. A, 113 (2006), 435-454.

[51] S. Morey and R.H. Villarreal, *Edge ideals: algebraic and combinatorial properties,* In Progress in Commutative Algebra, Combinatorics and Homology, Vol.1, De Gruyter, Berlin, (2012), pp. 85-126.

[52] D. Mumford, *Lectures on Curves on an algebraic surface,* Annals of Mathematics Studies 59, Princeton University Press (1966).

[53] E. Nevo, *Regularity of edge ideals of $C_4$-free graphs via the topology of the lcm-lattice,* J. Comb. Theory, Ser. A 118, (2011), 491–501.

[54] M.E.J. Newman, *Assortative mixing in networks,* Physical Review Letters, 89(20), NOV11 2002.

[55] A. Ooishi, *Castelnuovo-Mumford regularity of graded rings and modules,* Hiroshima Math. J. 12 (1982), 627–644.

[56] C. Pan, B.H. Park, W.H. McDonald, P.A. Carey, J.F. Banfield, N.C. VerBerkmoes, R.L. Hettich, N.F. Samatova, *A high-throughput de novo sequencing approach for shotgun proteomics using high-resolution tandem mass spectrometry,* BMC Bioinformatics, 11:Mar 5, 2010.

[57] M. Randic, *On characterization of molecular branching,* J. Amer. Chem. Soc., 67:6609–6615, 1975.

[58] P. Rowlinson, *On multiple eigenvalues of trees,* Linear Algebra Appl., 432:3007–3011, (2010).

[59] J. Saramäki, E.A. Leicht, E. Lopez, S.G.B. Roberts, F. Reed-Tsochasan, R.I.M Dunbar, *Persistence of social signatures in human communication,* PNAS, 111:942–947, 2014.

[60] N. Trinajstic, *Chemical Graph Theory,* CRC Press, 1992.

[61] R. Woodroofe, *Matchings, coverings, and Castelnuovo-Mumford regularity,* to appear in J. Commutative Algebra, (2012), arXiv:1009.2756v3, 12 pp.

[62] X. Zheng, *Resolutions of facet ideals,* Comm. Algebra, 32 (2004), 2301-2324.

**TÜBİTAK**

**PROJE ÖZET BİLGİ FORMU**

**Proje No:** 210T173

**Proje Başlığı:** Geometric Representations and Symmetries of Graphs, Maps and Other Discrete Structures and Applications in Science

**Proje Yürütücüsü:** Doç Dr Türker BIYIKOĞLU

**Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:**

Işık Üniversitesi, Matematik Bölümü (2011-2012)

İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Matematik Bölümü (2012-2014)

**Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:**

Destekleyen herhangi bir başka kuruluş yoktur.

**Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:** 01/09/2011 - 01/05/2015

**Öz(en çok 70 kelime)**

Bu proje çalışmasının birinci amacı çizgelerin özdeğer ve özvektör yapılarını çizge özellik ve sabitleri ile ilişkilendirmektir. İkinci amacı biyoloji, bioinformatik, dinamik sistemler, haberleşme, kriptoloji ve sosyal ağlar gibi bir birinden çok farklı alanlardan gelen birbirinden tamamen bağımsız olan temel problemler için çizge kuramı ile özgün modellenmesi ve ortaya çıkan çizge problemlerin çözülmesidir. Üçüncü amacı çizgelerin Castelnuovo-Mumford regülaritesine indirgenmiş eşleşme sayısı ile üstten etkin sınırlar getirmektir.

**Anahtar Kelimeler:** komşuluk matrisi, Laplace matrisi, özdeğer, özvektör, cebirsel bağlılık, Perron vektörü, Fiedler Vektörü, dendrimer, NP-tam, topolojik entropi, asortiklik, genel Randic indeksi, global çizge hizalaması, kanaat dinamiği, kütle spektrometresi çizgeleri, iyon farkı eşleştirme, çok kişili kayıtsız çevrimiçi iletişim, bağımsız küme, hizip, benzeryapı, Castelnuovo-Mumford regülaritesi, kare-serbest monomial ideal, indirgenmiş eşleşme sayısı.

**Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu mu ?** **Evet** ☐ **Gerekli Değil** ☒

Fikri Ürün Bildirim Formu'nun teliminden sonra 3 ay içerisinde patent başvurusu yapılmalıdır.

**Projeden Yapılan Yayınlar:**

[1] T. Bıyıkoğlu, and J. Leydold, *Graphs of given order and size and minimum algebraic connectivity,* Linear Algebra and its Applications, 436:2067–2077, (2012).

[2] T. Bıyıkoğlu, and J. Leydold, *Dendrimers are the unique chemical trees with maximum spectral radius,* MATCH. Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 68:851–854, (2012).

[3] S. Bakşi, O. Kaya, and T. Bıyıkoğlu, *Optimal and Near-optimal Partner Selection Algorithms in Cooperative OFDMA,* IEEE Wireless Communications and Networking Conference (WCNC 2012), Paris, France, April 2012.

TÜBİTAK

[4] G. Abaka, T. Bıyıkoğlu, and C. Erten, *CAMPways: Constrained Alignment Framework for the Comparative Analysis of a Pair of Metabolic Pathways,* Bioinformatics, 29 (13): 145-153, (2013).

[5] S. Bakşi, O. Kaya, and T. Bıyıkoğlu, *Enabling Cooperation, Resource Allocation and Receiver Selection Across Cells: Complementary Fractional Frequency Reuse,* IEEE PIMRC 2013, London, UK, Sept. 2013.

**Projede Hakem aşamasında olan Yayınlar:**

[6] F. Alkan, T. Bıyıkoğlu, M. Demange and C. Erten, *Constrained Alignments of a Pair of Graphs,* Discrete Applied Mathematics, under review (2015).

[7] F. Atay and T. Bıyıkoğlu, *Graph entropy, degree assortativity, and hierarchical structures in networks,* under review (2015).

[8] T. Bıyıkoğlu and Y. Civan, *Castelnuovo-Mumford regularity of graphs,* Combinatorica, under review, (2015).

[9] T. Bıyıkoğlu and Y. Civan, *Prime Graphs, Matching and Regularity,* under review, (2015).