

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه سبز

دانشکده ریاضی

گروه ریاضی محض

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

ریاضی محض-جبر

تکمدولی بودن چند جمله‌ای‌های استقلال گراف‌ها

استاد راهنما: دکتر سعید علیخانی

استاد مشاور: دکتر محمد رضا هوشمند اصل

پژوهش و نگارش: فاطمه جعفری

شهریور ماه ۱۳۹۱

تقدیم با لبه بردستان پدرم:

به او که فی دلم از بزرگی اش بگویم نامزدانگی، سلفت، مهربانی و...
پدرم راه تمام زندگی
پدرم دوشی، همسنگیت

تقدیم به مادر عزیزم از جانم:

فرشته ای که از خواسته هایش گذشت، سختی ها را له جان خرید و خود را برای مشکلات و ناملایمت کرد تا من به جا بمانم که
المن در آن ایستاده ام برسم

و تقدیم به:

همه عزیزم، اسطوره زندگی، پناه خستگی و امید و دلم.

سپاس‌گزاری...

خداوندا به ما توفیق تلاش در شکست، صبر در نومی‌دی، رفتن بی همراه، کار بی پاداش، فداکاری در سکوت، عظمت بی نام، خدمت بی نان، ایمان بی ریا، خوبی بی نمود، مناعت بی غرور، عشق بی هوس، تنهایی در انبوه جمعیت و دوست داشتن بی آنکه دوست بداند، را عنایت فرما.

به مصداق «من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق» بسی شایسته است از استاد فرهیخته و فرزانه جناب آقای دکتر سعید علیخانی که با کرامتی چون خورشید، سرزمین دل را روشنی بخشیدند و گلشن سرای علم و دانش را با راهنمایی های کار ساز و سازنده بارور ساختند، تقدیر و تشکر نمایم.

همچنین از جناب آقای دکتر محمدرضا هوشمند اصل، استاد مشاور ارجمندم، به دلیل راهنماییهای فراوانشان کمال تشکر و قدردانی را دارم.

از برادران و خواهران عزیزم که پیوسته یاری‌گرم بودند و هر لحظه تلاشم با فداکاری آنها میسر گشت، سپاس‌گزاری می‌کنم.

چکیده

یکی از راه‌های مطالعه‌ی گراف‌ها بررسی چندجمله‌ای‌هایی است که به آن‌ها نسبت داده می‌شوند. تاکنون چندجمله‌ای‌های گوناگونی به گراف‌ها نسبت داده شده‌اند و مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته‌اند. برای نمونه می‌توان به چندجمله‌ای‌های رنگی، چندجمله‌ای‌های غالب و چندجمله‌ای‌های استقلال اشاره کرد. یک مجموعه‌ی استقلال از گراف G ، عبارت است از یک زیر مجموعه‌ی S از مجموعه رؤس گراف G ، به طوری که هیچ دو رأسی در S مجاور نباشند. اگر G یک گراف ساده باشد و i_k تعداد مجموعه‌های استقلال k رأسی از گراف G باشد، آن‌گاه چندجمله‌ای استقلال G برابر است با:

$$I(G, x) = 1 + \sum_{k=1}^{\alpha(G)} i_k x^k.$$

یکی از مفاهیم مهمی که در بررسی چندجمله‌ای‌های وابسته به گراف‌ها به آن پرداخته می‌شود، مفهوم تک‌مدولی است.

دنباله‌ی متناهی $c_0, c_1, \dots, c_{n-1}, c_n$ تک‌مدول نامیده می‌شود، هرگاه اندیس n وجود داشته باشد،

$$c_0 \leq c_1 \leq \dots \leq c_{r-1} \leq c_r \geq c_{r+1} \geq \dots \geq c_n.$$
 به‌گونه‌ای که:

اندیس r مد این دنباله نامیده می‌شود.

چندجمله‌ای $\sum_{i=1}^n c_i x^i$ تک‌مدول نامیده می‌شود هرگاه دنباله‌ی ضرایب $c_0, c_1, \dots, c_{n-1}, c_n$ تک‌مدول

باشد.

در این پایان‌نامه تک‌مدولی بودن چندجمله‌ای‌های استقلال گراف‌ها مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

کلمات کلیدی:

۱. عدد استقلال
۲. مجموعه‌ی استقلال
۳. چندجمله‌ای استقلال
۴. تک‌مدولی.

فهرست مطالب

۱	مقدمات و پیش‌نیازها	۱
۲	تعاریف	۱.۱
۵	مثال‌هایی از گراف‌ها	۲.۱
۱۰	عمل‌های گراف	۳.۱
۱۳	چندجمله‌ای‌ها و خواص آن‌ها	۲
۱۴	چندجمله‌ای‌ها با تنها ریشه‌های حقیقی	۱.۲
۲۳	خاصیت تک‌مدولی چندجمله‌ای‌ها	۲.۲
۳۶	مجموعه‌های استقلال و چندجمله‌ای‌های استقلال	۳
۳۷	مجموعه‌های استقلال	۱.۳
۴۰	چندجمله‌ای استقلال	۲.۳
۴۱	چگونه می‌توان چندجمله‌ای استقلال را محاسبه کرد؟	۱.۲.۳
۴۹	چندجمله‌ای استقلال و گراف‌های یکرخت	۲.۲.۳
۵۱	چندجمله‌ای k -استقلال	۳.۲.۳
۵۴	خواص چندجمله‌ای‌های استقلال برخی از گراف‌های خاص	۴
۵۵	ریشه‌های چندجمله‌ای استقلال گراف‌های خاص	۱.۴
۵۵	ریشه‌های چندجمله‌ای ژاکوبشال	۱.۱.۴

۶۲ چندجمله‌ای استقلال یک گراف در -1 ۲.۴

۶۴ $I(G; -1)$ برای گراف‌هایی با حداکثر یک دور ۱.۲.۴

۷۴ $I(G; -1)$ و عدد دوری از گراف G ۲.۲.۴

۸۰ بررسی خاصیت تک‌مدولی چندجمله‌ای‌های استقلال ۵

۸۳ $G \circ K_1$ گراف استقلال چندجمله‌ای استقلال ۱.۵

۹۱ خاصیت تک‌مدولی چندجمله‌ای استقلال برخی از گراف‌ها ۲.۵

۱۰۲ واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

۱۰۴ مراجع

لیست تصاویر

۳	یک گشت ما بین دو رأس v_1 و v_2	۱.۱
۴	یک گذر ما بین دو رأس v_1 و v_3	۲.۱
۴	دو گراف یکرخت.	۳.۱
۵	جورسازی تام.	۴.۱
۶	گراف‌های کامل.	۵.۱
۶	گراف‌های منتظم و دوبخشی.	۶.۱
۷	گراف‌های ستاره.	۷.۱
۸	گراف یالی.	۸.۱
۸	گراف‌های هزارپا و عنکبوت.	۹.۱
۸	گراف توران.	۱۰.۱
۹	گراف کاکتوس.	۱۱.۱
۱۰	انواع زنجیرهای شش ضلعی پلی فنیل.	۱۲.۱
۱۰	نانو لوله‌ی کربن (a)، نانو لوله‌ی مثلثی (b).	۱۳.۱
۱۱	مجموع دو گراف.	۱۴.۱
۱۱	ضرب دکارتی دو گراف.	۱۵.۱
۱۲	ضرب قاموسی دو گراف.	۱۶.۱
۱۲	کرونای دو گراف. P_3 و P_4	۱۷.۱
۳۸	مجموعه‌ی استقلال ماکسیمم	۱.۳

۳۹	نانو لوله‌ی کربن و نانو لوله‌ی مثلثی (به ترتیب از چپ به راست)	۲.۳
۳۹	گراف‌های شیک‌پوش	۳.۳
۴۴	گراف‌های \overline{O}_4 و \overline{O}'_4	۴.۳
۴۹	گراف‌های غیریکریخت	۵.۳
۴۹	درخت‌های غیریکریخت	۶.۳
۵۰	$I(H_3; x) = I(H_4; x)$ و $I(H_1; x) = I(H_2; x)$	۷.۳
۶۴	گراف‌هایی با حداقل یک یال آویز.	۱.۴
۶۸	درخت‌های غیرشیک‌پوش.	۲.۴
۶۹	سه درخت غیر یکریخت از مرتبه‌ی ۵.	۳.۴
۷۰	$I(G_n; -1) \in \{-2, -1, 1, 2\}$ و $I(G_1; -1) = 0$ برای $n > 3$	۴.۴
۷۱	فقط G_4 و G_3, G_2 شیک‌پوش هستند.	۵.۴
۷۳	$\forall v \in V(T), I(T; -1) = I(T - v; -1) = 0$	۶.۴
۷۶	گراف‌های H_1 و G دارای عدد دوری یکسان هستند.	۷.۴
۷۶	$\nu(H_1) = \nu(G) + 1$	۸.۴
۷۷	$\nu(H_1) = \nu(G) + \nu(L_{k-1}) = \nu(G) + k$	۹.۴
		$\nu(H_1) = \nu(H_2) = 5$ در حالی که $(-1)^4 \cdot 2^3$ و $(H_1; -1) = (H_2; -1) =$	۱۰.۴
۷۷	$(-1)^5 \cdot 2^4$.	
۷۸	$I(W_5; x) = (1 + 3x)^5 + x(1 + 2x)^5$ و در نتیجه $(-1)^5 \cdot (2^5 - 1)$	۱۱.۴
۷۹	رأس w به یکی از رئوس هر یک از گراف‌های L_1, L_2, L_3 متصل است.	۱۲.۴
۸۷	عنکبوت شیک‌پوش S_6 و هزارپای W_n .	۱.۵
۸۹	$\Delta_n := (\ominus(\ominus(n-1)K_2) \ominus K_2)$	۲.۵
۹۰	$(a) : \Delta_{n+1}, W_{2n+2}, (b) : \Delta_{n+1} \ominus K_2, W_{2n+2}$	۳.۵
۹۲	گراف n -اتصال.	۴.۵
۹۷	گراف H_n .	۵.۵

پیشگفتار

چندجمله‌ای استقلال گراف‌ها برای اولین بار در سال ۱۹۸۳ توسط گوتمن و هراری معرفی شد و سال‌های زیادی است که به خاطر آنالیز و مقایسه و طبقه‌بندی گراف‌ها مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. این چندجمله‌ای‌ها در شیمی ترکیبیاتی، فیزیک آماری و حتی موسیقی کاربرد دارد. به‌طورمثال داروسازها توجه خاصی به چندجمله‌ای استقلال زنجیرهای شش‌ضلعی که مربوط به شکل گرافیکی شاخه‌ی مهمی از بنزن‌هاست، دارند. برای آشنایی بیشتر با کاربردهای چندجمله‌ای‌های استقلال می‌توانید به مراجع [۱۱] و [۱۹] مراجعه کنید. در این پایان‌نامه، تک‌مدولی بودن چندجمله‌ای‌های استقلال گراف‌ها مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

فصل اول به بیان مقدمات و تعاریفی از مفهوم گراف و اعمال روی گراف می‌پردازد.

در فصل دوم چندجمله‌ای‌ها و ویژگی‌های آن‌ها از جمله تک‌مدولی بودن مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این فصل از مراجع [۸، ۳۴، ۳۷، ۳۹، ۴۰، ۴۱] استفاده شده است.

فصل سوم شامل دو بخش است که در بخش اول مجموعه‌ی استقلال و ویژگی‌های آن بررسی می‌شود و بخش دوم که خود شامل ۳ زیربخش است به بررسی ویژگی‌های چندجمله‌ای‌های استقلال می‌پردازد. در زیر بخش اول به این که چگونه می‌توان چندجمله‌ای استقلال یک گراف را محاسبه کرد می‌پردازد، در زیربخش دوم رابطه‌ی چندجمله‌ای استقلال گراف‌های غیریکریخت مورد بررسی قرار می‌گیرد و در زیر بخش سوم چندجمله‌ای k -استقلال معرفی می‌شود. در این فصل از مراجع [۱، ۳، ۴، ۷، ۱۰، ۱۶، ۱۷، ۲۰، ۲۱، ۳۶، ۳۸] استفاده شده است.

فصل چهارم شامل دو بخش است که در بخش اول ریشه‌های چندجمله‌ای استقلال گراف‌های مسیره‌ها، دورها و چرخها مورد مطالعه قرار می‌گیرد و همه‌ی گراف‌هایی که تنها یک ریشه‌ی متمایز دارند، رده‌بندی می‌شوند و در بخش دوم چندجمله‌ای استقلال گراف‌های مختلف در ۱- بررسی می‌شود. در این فصل از مراجع [۱، ۵، ۱۳، ۱۵، ۲۲، ۲۳، ۲۴، ۳۵] استفاده شده است.

فصل پنجم این پایان نامه به بررسی تک مدولی بودن چند جمله‌ای استقلال گراف‌های مختلف می‌پردازد.

در این فصل از مراجع [۲, ۴, ۹, ۱۱, ۱۴, ۱۹, ۲۸, ۳۰, ۳۱, ۳۲, ۳۳, ۳۸, ۴۲] استفاده شده است.

فصل ۱

مقدمات و پیش‌نیازها

پیشرفت‌های اخیر در ریاضیات، به ویژه در کاربردهای آن موجب گسترش چشمگیر نظریه‌ی گراف شده است به گونه‌ای که هم‌اکنون نظریه‌ی گراف ابزار بسیار مناسبی برای تحقیق در زمینه‌های گوناگونی مانند نظریه‌ی کدگذاری، شبکه‌های الکتریکی، تحقیق در عملیات، برنامه نویسی کامپیوتر، شیمی، زیست‌شناسی، آمار، علوم اجتماعی و سایر زمینه‌ها گردیده است. در واقع نظریه‌ی گراف در ریاضیات شاخه‌ای از توپولوژی است، که با جبر و نظریه‌های ماتریس‌ها پیوند مستحکم و تنگاتنگی دارد.

در این فصل ابتدا به مفاهیم، تعاریف اولیه و نمادگذاری‌ها می‌پردازیم. کلیه نمادگذاری‌های ذکر شده مربوط به نظریه گراف، در این فصل، بر اساس کتاب معروف باندی - مورتی، کتاب وست و کتاب ویلسون می‌باشد.

۱.۱ تعاریف

در این پایان‌نامه همه‌ی گراف‌ها را ساده یعنی گراف‌های فاقد طوقه، یال چندگانه و یال جهت‌دار در نظر می‌گیریم. مجموعه رئوس گراف G را با $V(G)$ و مجموعه یال‌های گراف G را با $E(G)$ نشان می‌دهیم و به اختصار می‌نویسیم $G = (V(G), E(G))$.

تعریف ۱.۱.۱. نماد $deg(v)$ ، نشان‌دهنده‌ی درجه رأس v در گراف G است که در واقع نشان می‌دهد رأس v بر چه تعداد یال واقع است. مینیمم و ماکسیمم درجه رأس‌های G را به ترتیب با $\delta(G)$ و $\Delta(G)$ نشان می‌دهیم.

تعریف ۲.۱.۱. یک رأس **آویز** رأسی از درجه‌ی ۱ است. یک برگ یا یک **یال آویز** یالی است که یکی از دو سر آن رأس آویز باشد.

تعریف ۳.۱.۱. یک زیرگراف از یک گراف G ، یک گراف H است به طوری که $V(H) \subset V(G)$ و $E(H) \subset E(G)$ که به صورت $H \subset G$ نشان می‌دهیم. یک **زیرگراف القایی** از گراف G زیرگرافی مانند H است به طوری که هر یال G مشمول در $V(H)$ متعلق به $E(H)$ باشد.

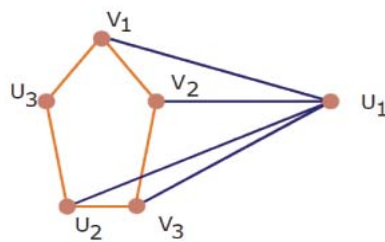
یک **زیرگراف فراگیر** از G زیرگرافی با مجموعه‌ی رأس‌های $V(G)$ است.

تعریف ۴.۱.۱. یک گشت در گراف G دنباله‌ای از رئوس به صورت $v_1 v_2 \dots v_m$ است که به ازای هر $0 \leq i \leq m-1$ داشته باشیم $v_i v_{i+1} \in E$. این تعریف برای تمام گراف‌ها اعم از ساده، چندگانه و

جهت‌دار برقرار است. در یک گشت به صورت $v_1 v_2 \dots v_m$ ، که آن را گشتی بین v_1 و v_m تعریف می‌کنیم، هم رؤس و هم یال‌ها می‌توانند تکراری باشند.

طول یک گشت شامل m رأس به صورت $v_1 v_2 \dots v_{m-1}$ را برابر با $m - 1$ می‌گیریم و بیان‌گر تعداد یال‌هایی است که این گشت می‌پیماید.

مثال ۵.۱.۱. در گراف شکل (۱.۱)، دنباله $v_1 u_1 u_2 u_3 u_2 v_2 v_1$ یک گشت ما بین v_1 و v_2 است که رؤس u_1 و u_2 در آن تکرار شده‌اند و یال $u_1 u_2$ ، ۲ بار پیموده شده است.



شکل ۱.۱: یک گشت ما بین دو رأس v_1 و v_2 .

تعریف ۶.۱.۱. اگر در یک گشت رؤس ابتدا و انتهای آن یکسان باشند، یعنی $v_1 v_2 \dots v_{m-1} v_1$ ، آن را یک گشت بسته می‌نامیم و بیان‌گر حرکتی روی یال‌ها می‌باشد که در انتها به رأس آغازین بازگشته‌ایم.

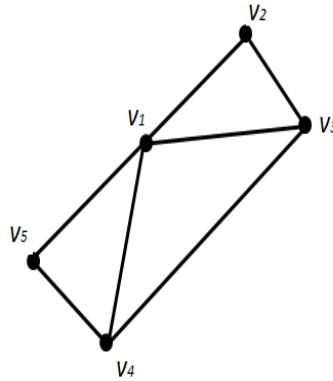
تعریف ۷.۱.۱. اگر در تعریف گشت این شرط را هم اضافه کنیم که یال تکراری نداشته باشیم آن را گذر می‌نامیم. به عبارتی دیگر گذر، گشتی است که یال تکراری ندارد. طول گذر و رؤس ابتدایی و پایانی گذر نیز مانند گشت می‌باشد.

تعریف ۸.۱.۱. گذر بسته مانند گشت بسته، به گذری می‌گوییم که رؤس ابتدایی و انتهایی آن یکسان باشند. مثلاً در شکل (۲.۱)، $v_1 v_2 v_3 v_1$ یک گذر و $v_1 v_2 v_3 v_4 v_3 v_2 v_1$ یک گذر بسته می‌باشد.

تعریف ۹.۱.۱. اگر علاوه بر یال‌ها، رؤس یک گشت هم غیر تکراری باشند آن را مسیر می‌نامیم. به عبارت دیگر مسیر، گذری با رؤس غیر تکراری می‌باشد.

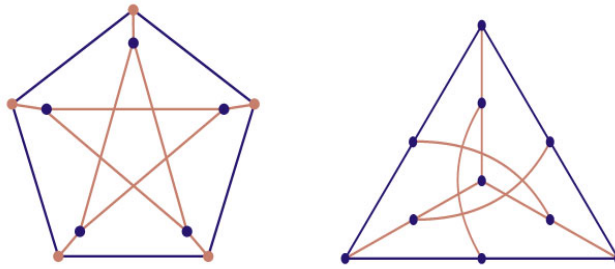
تعریف ۱۰.۱.۱. در مسیر $v_1 v_2 v_3 \dots v_m v_{m+1}$ اگر $v_1 = v_{m+1}$ باشد آن را یک دور می‌نامیم. طول یک دور با m رأس، به صورت $v_1 v_2 \dots v_m v_1$ را برابر با m می‌گیریم و بیان‌گر تعداد یال‌های آن می‌باشد.

تعریف ۱۱.۱.۱. مکمل گراف G که آن را با G^c یا \bar{G} نشان می‌دهیم، گراف ساده‌ای است با مجموعه رؤس V و دو رأس در \bar{G} مجاورند اگر و فقط اگر در G مجاور نباشند.



شکل ۲.۱: یک گذر ما بین دو رأس v_1 و v_3 .

تعریف ۱۳.۱.۱. به طور کلی، دو گراف G و H را یکرخت می‌گوئیم (می‌نویسیم $G \cong H$), هر گاه یک تناظر یک به یک بین رئوس G و H وجود داشته باشد، به طوری که تعداد یال‌هایی که هر دو رأس از G را به هم وصل می‌کند برابر تعداد یال‌هایی باشد که رئوس نظیر در H را به هم وصل می‌کند. نمونه‌ای از دو گراف یکرخت در شکل (۳.۱) ملاحظه می‌شود.



شکل ۳.۱: دو گراف یکرخت.

تعریف ۱۳.۱.۱. یک همسایگی باز از رأس $v \in V(G)$ که با $N_G(v)$ نشانی دهیم عبارت است از:

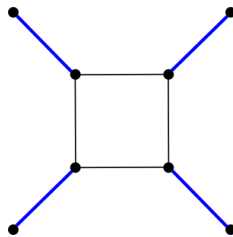
$$N_G(v) = \{w : w \in V(G), vw \in E(G)\}$$

یک همسایگی بسته از رأس $v \in V(G)$ که با $N_G[v]$ نشانی دهیم عبارت است از:

$$N_G[v] = N_G(v) \cup \{v\}$$

تعریف ۱۴.۱.۱. فرض می‌کنیم G یک گراف ساده است، منظور از یک **جورسازی** گراف G زیرمجموعه‌ی M از $E(G)$ است به گونه‌ای که هیچ دو یال موجود در M مجاور نباشند. اندازه‌ی مجموعه جورسازی ماکسیمم یک گراف را **عدد جورسازی** یا **تطابق** می‌نامیم و با $\beta(G)$ نشان می‌دهیم.

جورسازی $M \subseteq E(G)$ را یک **جورسازی تام** می‌نامیم هرگاه هر رأس از G توسط یک یال در M پوشیده شود. در شکل (۴.۱) یال‌های آبی یک جورسازی تام را نشان می‌دهد.



شکل ۴.۱: جورسازی تام.

۲.۱ مثال‌هایی از گراف‌ها

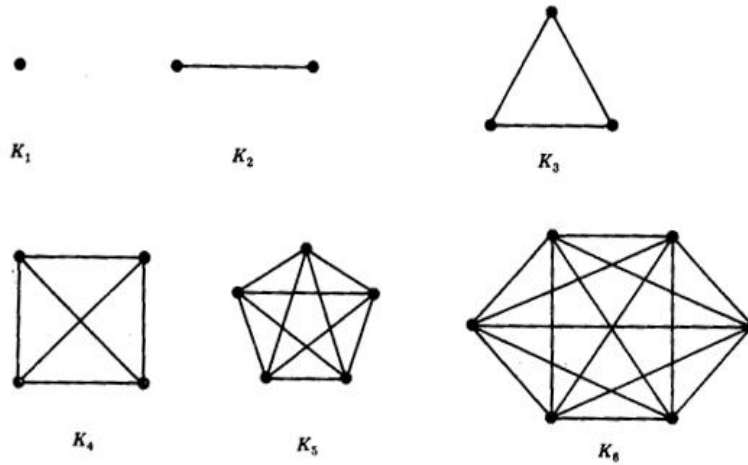
در این قسمت بعضی از گراف‌های مهم را معرفی می‌کنیم.

تعریف ۱.۲.۱. گرافی را که مجموعه‌ی یال آن تهی است یک **گراف تهی** یا **گراف ناهمبند کلی** می‌نامیم. گراف تهی با n رأس را با N_n نشان می‌دهیم.

تعریف ۲.۲.۱. یک گراف ساده را که هر دو رأس متمایز آن مجاور باشد، یک **گراف کامل** می‌نامیم. گراف کامل با n رأس را معمولاً به صورت K_n ، نشان می‌دهیم. نمونه‌هایی از گراف کامل در شکل (۵.۱) ملاحظه می‌شوند. به راحتی می‌توان دید که K_n دارای $\frac{n(n-1)}{2}$ یال است.

تعریف ۳.۲.۱. گرافی که درجه‌ی تمام رأس‌های آن با هم برابر باشد، یک **گراف منتظم**^۱ است. اگر درجه‌ی هر رأس r باشد، گراف را منتظم از درجه‌ی r یا r -منتظم گوئیم. گراف‌های مکعبی و پترسن از جمله گراف‌های منتظم از درجه‌ی ۳ هستند. نمونه‌هایی از گراف‌های منتظم در شکل (۶.۱) ملاحظه می‌شوند.

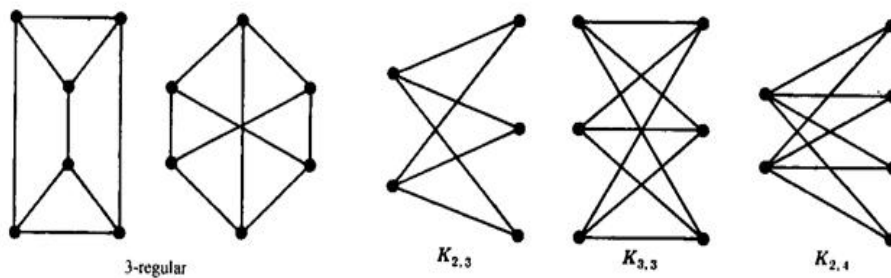
^۱ Regular



شکل ۵.۱: گراف‌های کامل.

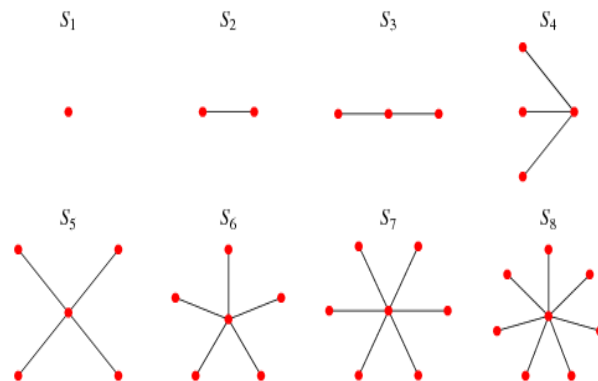
تعریف ۴.۲.۱. فرض می‌کنیم مجموعه رأس یک گراف را بتوان به دو مجموعه مجزای V_1 و V_2 افزایش کرد، به طوری که هر یال G یک رأس از V_1 را به یک رأس از V_2 وصل کند. در این صورت G را یک **گراف دوبخشی** می‌نامیم در صورتی که خواهیم دو مجموعه مربوط را مشخص کنیم آن را به صورت $G(V_1, V_2)$ نشان می‌دهیم.

تأکید می‌شود که در یک گراف دو بخشی، لزوماً هر رأس از V_1 به هر رأس از V_2 وصل نیست. اما اگر چنین باشد و اگر G ساده باشد، آن‌گاه G را یک **گراف دو بخشی کامل** می‌نامند، و معمولاً به صورت $K_{r,s}$ نشان داده می‌شوند که در آن r, s به ترتیب تعداد رئوس در V_1 و V_2 است. در شکل (۶.۱) مثال‌هایی از گراف‌های دو بخشی کامل ملاحظه می‌شوند.



شکل ۶.۱: گراف‌های منتظم و دوبخشی.

تعریف ۵.۲.۱. به هر گراف G با n رأس، به قسمی که دارای یک رأس از درجه $n - 1$ و $n - 1$ رأس دیگر از درجه یک باشد، گراف ستاره می‌گوییم. گراف ستاره از درجه n را با S_n نشان می‌دهند. در شکل (۷.۱) مثال‌هایی از گراف‌های ستاره ملاحظه می‌شوند.



شکل ۷.۱: گراف‌های ستاره.

تعریف ۶.۲.۱. یک گراف که دارای دور نباشد بی‌دور است. یک جنگل یک گراف بی‌دور است، یک درخت یک گراف همبند بی‌دور است.

یک درخت فراگیر یک زیرگراف فراگیری است که درخت باشد.

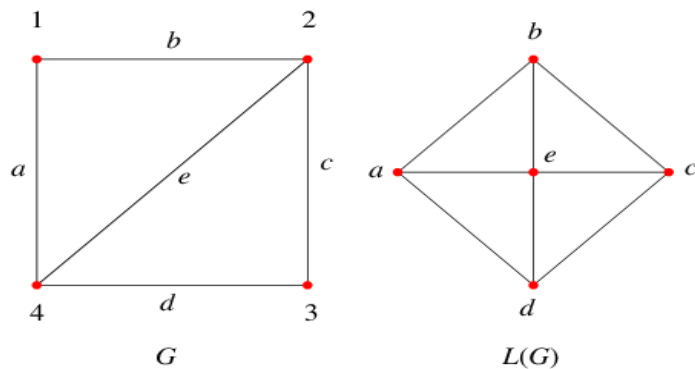
تعریف ۷.۲.۱. گراف یالی G که با $L(G)$ نشان می‌دهیم گرافی است که مجموعه رئوس آن $E(G)$ است و دو رأس به هم وصلند اگر یال‌های متناظرشان در G یک رأس مشترک داشته باشد. در شکل (۸.۱) مثالی از گراف یالی می‌بینید.

تعریف ۸.۲.۱. [۲۸] عنکبوت^۲ درختی است که حداکثر یک رأس از درجه n بزرگ‌تر یا مساوی ۳ داشته باشد. در شکل (۹.۱) نمونه‌هایی از عنکبوت را می‌بینید.

تعریف ۹.۲.۱. [۲۸] هزارپا^۳ که با $W_n = (A, B, E)$ ، $n \geq 1$ ، نشان می‌دهیم، درختی است با مجموعه رئوس $A \cup B$ ، که اگر $A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ و $B = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}$ ، آن‌گاه مجموعه

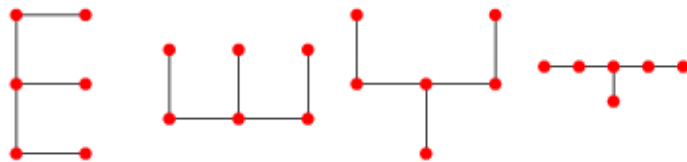
^۲ Spider

^۳ Sentipede



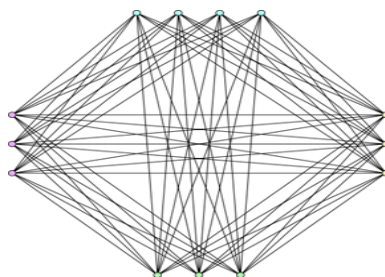
شکل ۸.۱: گراف یالی.

یالی آن عبارت است از: $E = \{a_i b_i : 1 \leq i \leq n\} \cup \{b_i b_{i+1} : 1 \leq i \leq n-1\}$. در شکل (۹.۱) نمونه‌هایی از هزارپا را می‌بینید.



شکل ۹.۱: گراف‌های هزارپا و عنکبوت.

تعریف ۱۰.۲.۱. گراف توران^۴ که با $T_{m,n}$ نشانمی‌دهیم گراف m بخشی کامل از مرتبه n است به طوری که اندازه‌ی بخش‌های آن تا حد امکان به هم نزدیک باشند. بنابراین $T_{m,n}$ همان گراف K_{n_1, n_2, \dots, n_m} است به طوری که $n_1 + n_2 + \dots + n_m = n$ و به ازای هر $i, j \in \{1, 2, \dots, m\}$ داشته باشیم $|n_i - n_j| \leq 1$. به طور مثال $K_{4,3,4}$ یک گراف توران $T_{3,11}$ است و در شکل (۱۰.۱) گراف $T_{4,13}$ را می‌بینید.



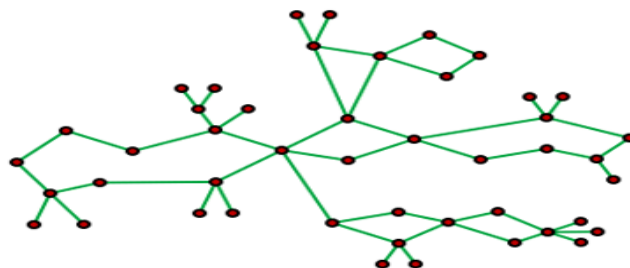
شکل ۱۰.۱: گراف توران.

^۴Turan

تعریف ۱۱.۲.۱. [۲۸] گراف G یک گراف فاقد چنگال^۵ است اگر و تنها اگر شامل گراف دو بخشی کامل $K_{۱,۳}$ به عنوان زیر گراف القائی نباشد. هر گراف یالی یک گراف فاقد چنگال است.

تعریف ۱۲.۲.۱. گراف همبند G ، که در آن هر دو دور ساده حداکثر در یک رأس با هم مجاور هستند را گراف کاکتوس^۶ می‌نامیم. هر یال در یک گراف کاکتوس حداکثر در یک دور قرار دارد و یا به عبارتی هر بلوک (زیرگراف ماکسیمال بدون رأس برشی) یک گراف کاکتوس یک یال و یا یک دور است. به طور مثال در شکل (۱۱.۱) یک گراف کاکتوس نشان داده شده است.

در ادامه‌ی این بخش ساختار گرافی دو نوع از مولکول‌های شیمیایی که در فصل سوم از آن استفاده



شکل ۱۱.۱: گراف کاکتوس.

خواهد شد را معرفی می‌کنیم.

تعریف ۱۳.۲.۱. گراف کاکتوس G که هر بلوک آن یک شش‌ضلعی و یا یک یال است را یک زنجیر شش‌ضلعی پلی‌فنیل^۷ می‌نامیم هرگاه هر شش‌ضلعی در آن حداکثر دو رأس برشی داشته باشد و هر رأس برشی با یک یال و یک شش‌ضلعی سهیم باشد.

تعداد شش‌ضلعی‌ها در هر زنجیر را طول آن زنجیر می‌نامیم. واضح است که تعداد رأس‌ها در یک زنجیر به طول n ، برابر با $۶n$ و تعداد یال‌ها برابر با $۷n - ۱$ است. انواع زنجیرهای شش‌ضلعی پلی‌فنیل عبارتند از \bar{O}_n و \bar{M}_n و \bar{P}_n ، که در شکل (۱۲.۱) نشان داده شده است.

تعریف ۱۴.۲.۱. یک نانو لوله‌ی کربن^۸ از مرتبه‌ی $m \times n$ عبارت است از یک لوله متشکل از شش‌ضلعی‌های

^۵Claw-free

^۶Cactus

^۷Polyphenyl hexagonal chain

^۸Carbon nanotube