



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده علوم پایه

بررسی مقادیر ویژه و پوچی درخت‌ها، دندریمرها و گراف‌های تک دور

نگارش

مهین سنقری

استاد راهنما: دکتر مجتبی قربانی

استاد مشاور: دکتر حمید رضا میمنی

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته ریاضیات محض

شهریور ۹۱

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

باسمه تعالی




تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب مهین سنقری معتمد می‌شوم کسه مطالب منسدرج در این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این پژوهش از آنها استفاده شده است، مطابق مقررات ارجاع و در فهرست منابع و مأخذ ذکر گردیده است. این پایان‌نامه رساله قبلاً برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارایه نشده است. در صورت اثبات تخلف (در هر زمان) مدرک تحصیلی صادر شده توسط دانشگاه از اعتبار ساقط خواهد شد.

کلبه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی می‌باشد.

نام و نام خانوادگی دانشجو
مهین سنقری
اعضای





دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده علوم پایه

بررسی مقادیر ویژه و پوچی درخت‌ها، دندریمرها و گراف‌های تک دور

نگارش

مهین سنقری

استاد راهنما: دکتر مجتبی قربانی

استاد مشاور: دکتر حمید رضا میمنی

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته ریاضیات محض

شهریور ۹۱

شماره: ۱۰۲۹/۵۰۱۴
تاریخ: ۹/۷/۱۴
پیوست:



دانشگاه تربیت مدرس شهید رجایی

بیت

صور تجلسه دفاع پایان نامه تحصیلی دوره کارشناسی ارشد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم مهین سقزی رشته ریاضی محض تحت عنوان بررسی مقادیر ویژه و بوجی درختها، دندیرمها و گرافهای تکدور، که در تاریخ: ۹۱/۶/۲۹ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه تربیت مدرس شهید رجایی برگزار گردید و نتیجه به شرح زیر می باشد.

قبول (بدرجه عالی) امتیاز: ۲۰ (.....) دفاع مجدد مردود

- ۱- عالی (۱۹ - ۲۰)
- ۲- بسیار خوب (۱۸ - ۱۸/۹۹)
- ۳- خوب (۱۶ - ۱۷/۹۹)
- ۴- قابل قبول (۱۴ - ۱۵/۹۹)
- ۵- غیر قابل قبول (کمتر از ۱۴)

اعضای	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
استاد راهنما	دکتر مجتبی قربانی	استادیار	
استاد مشاور	دکتر حمیدرضا میمنی	استاد	
استاد داور داخلی	دکتر علی زعیم باشی	استادیار	
استاد داور خارجی	دکتر علیرضا اشرفی	استاد	
نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر فرزانه نوروژی لرکی	استادیار	

دکتر ابوباسمیل پور
رئیس دانشکده علوم پایه

تهران، لویزان، کد پستی: ۱۵۸۱۱-۱۶۷۸
صندوق پستی: ۱۶۲-۱۶۷۸۵
تلفن: ۹-۲۲۹۷۰۰۶۰ فکس: ۲۲۹۷۰۰۳۳
Email: sru@sru.ac.ir
www.srttu.edu

چکیده

به تعداد تکرار مقدار ویژه‌ی صفر در طیف یک گراف، پوچی گراف گفته می‌شود. تعیین گرافهایی با پوچی بیشتر از صفر، اولین بار توسط کولاتز و سینگویتز مورد بررسی قرار گرفت. در شیمی، حل این مسئله حائز اهمیت است، زیرا پوچی ناصفر در مولکول‌ها، به ویژه هیدروکربن‌ها نشان دهنده‌ی ناپایداری مولکول می‌باشد. این مسئله هنوز به صورت کامل حل نشده است و تنها برای درخت‌ها و گراف‌های دوبخشی نتایج کاملی به دست آمده است. در ادامه، طیف و پوچی کلاس‌های خاصی از گراف‌ها مانند درخت‌ها، گراف‌های تک‌دور، دودور و دندریمرها مورد بررسی قرار می‌گیرند.

کلمات کلیدی: طیف گراف، پوچی گراف، عدد تطابقی، ماتریس مجاورت، گراف‌های تک‌دور، گراف‌های دودور، درخت‌ها، دندریمرها.

فهرست مندرجات

صفحه	عنوان
	فصل ۱. مقدمات و مفاهیم اولیه
۲	۱-۱- تعاریف مقدماتی گراف
۷	۲-۱- مقدماتی از جبر خطی
۱۹	۳-۱- مفهوم پوچی و طیف گراف
	فصل ۲. مطالعه پوچی کلاس‌های خاصی از گراف‌ها
۲۲	۱-۲- معرفی پوچی گراف
۲۶	۱-۲- رابطه‌ی بین پوچی و ساختار گراف
۳۵	۲-۲- بررسی طیف ضرب کرونا
۴۰	۳-۲- بررسی یک ضرب جدید و طیف آن
۴۴	۴-۲- بررسی پوچی گراف‌های دارای رأس برشی
۴۹	۵-۲- محاسبه پوچی چند دسته از دندریمرها
	فصل ۳. پوچی گراف‌هایی با یک درخت آویزان
۵۵	۱-۳- رئوس تطابقی و غیر تطابقی در یک درخت
۵۷	۲-۳- پوچی گراف‌ها همراه با درخت‌های آویزان
۶۰	۳-۳- گراف‌های تک‌دور با پوچی معین
۶۳	۴-۳- تعیین محل مقادیر ویژه‌ی درخت‌ها
۶۳	۱-۴-۳- قطری‌سازی $A + \alpha I$
۶۸	۲-۴-۳- درخت‌های کاتریپیلار

فهرست مندرجات

فصل ۴. بررسی پوچی گراف‌های تک‌دور و دودور

۷۲ ۴-۱- محاسبه‌ی پوچی یک گراف تک‌دور با استفاده از عدد تطابقی آن

۷۴ ۴-۱-۱- پوچی گراف‌های تک‌دور

۸۴ ۴-۲- نتایجی در مورد پوچی گراف‌های دودور

فصل ۵. تعیین گراف‌هایی با پوچی ماکزیمم

۸۷ ۵-۱- گراف‌هایی با پوچی ماکزیمم

۹۴ ۵-۲- درخت‌هایی با پوچی ماکزیمم

۹۷ ۵-۳- ساختار درخت‌هایی با پوچی ماکزیمم

۱۰۰ فهرست مقالات ارائه شده توسط نگارنده

۱۰۱ فهرست منابع و مراجع

۱۰۴ واژه‌نامه

فهرست شکل‌ها

صفحه	شماره شکل
۶	۹-۱. گراف G
۲۷	۱۲-۲. گراف‌های G_1 و G_2
۲۷	۱۵-۲. گراف‌های مقدماتی گراف G
۳۰	۲۴-۲. محاسبه پوچی یک گراف
۳۱	۲۶-۲. یک مثال قضیه برای ۲-۲۵
۳۱	۲۸-۲. حذف دو رأس مجاور در یک چهار دور
۳۱	۳۰-۲. تعیین پوچی یک گراف با استفاده از قضایای ۲-۲۲ تا ۲-۲۴
۳۲	۳۱-۲. گراف pK_2 و گراف خطی آن
۳۲	۳۲-۲. گراف G_r
۳۵	۳۷-۲. حاصلضرب $G \circ H$ برای دو گراف G و H
۴۰	۴۵-۲. حاصلضرب $H(G)$ برای دو گراف G و H
۴۱	۵۰-۲. $H(F)' = H'(F)'$
۴۸	۵۵-۲. دو گراف با پوچی متفاوت و رئوس برشی یکتا
۴۸	۵۶-۲. محاسبه پوچی گراف C
۴۹	۵۸-۲. گراف دندریمر $S[n]$
۵۰	۶۰-۲. گراف دندریمر $D[n]$ برای $n=3$
۵۰	۶۱-۲. محاسبه پوچی $D[n]$ برای $n=3$
۵۱	۶۳-۲. گراف بنزوئید $G[n]$

فهرست شکل‌ها

۵۲	۶۴-۲. گراف بنزوئید $G[n]$
۵۵	۵-۳. رئوس تطابقی و غیر تطابقی
۵۶	۹-۳. مؤلفه‌های T_1 و T_2
۶۴	۱۷-۳. الگوریتم قطری‌ساز
۶۷	۲۳-۳. دو مقدار ویژه‌ی مثبت
۶۷	۲۴-۳. یک مقدار ویژه‌ی کمتر از ۲
۶۸	۲۵-۳. یک مقدار ویژه‌ی بزرگتر از یک
۶۸	۲۶-۳. یک مقدار ویژه‌ی بزرگتر از $\frac{1}{2}$
۷۰	۳۰-۳. قطری‌سازی گراف کاتریپلار با ورودی $\alpha = 0$
۷۳	۳-۴. سه گراف U_1^* ، U_2^* و U_3^*
۷۹	۱۱-۴. گراف G و ستاره‌ی آویزان H از G
۸۱	۱۵-۴. گراف U_3^* در قضیه‌ی ۱۲-۴
۸۴	۲۱-۴. گراف $\infty(p,l,q)$ و گراف $\theta(p,l,q)$
۸۹	۳-۵. گراف‌های G_1^* و G_2
۹۰	۴-۵. گراف‌های G_2^* و G_3
۹۲	۷-۵. گراف‌های T_i ($1 \leq i \leq 5$)
۹۳	۱۰-۵. گراف‌های U_i ($1 \leq i \leq 5$)
۹۳	۱۳-۵. گراف‌های B_i ($1 \leq i \leq 5$)
۹۷	۲۱-۵. درخت T

۹۸

۲۳-۵. درخت‌های $T \in \mathfrak{T}_r(n, D, \max)$ برای $D=5$ و $n=4, 9, 14$

۹۹

۲۴-۵. درخت‌های $\mathfrak{T}_r(14, 5, \max)$

فصل ۱

مقدمات و مفاهیم اولیه

هدف این فصل، ایجاد یک زمینه‌ی شهودی، برای مطالبی است که در فصل‌های بعد به صورت کامل‌تر ارائه خواهند شد.

۱-۱- تعاریف مقدماتی گراف

یک گراف، عبارت است از دو تایی $G=(V,E)$ ، که در آن V مجموعه‌ای ناتهی و E مجموعه‌ای از زیرمجموعه‌های دو عضوی V است. عناصر E را رئوس G و عناصر E را یال‌های G می‌نامیم. تعداد رئوس و یال‌های G را به ترتیب، مرتبه و اندازه‌ی G نامیده و با $|V|$ و $|E|$ نشان می‌دهیم. گراف G را متناهی گوئیم هرگاه V و E متناهی باشند. همچنین، گرافی که شامل یک رأس باشد، گراف بدیهی نامیده می‌شود. مجموعه‌ی دو عضوی $e=\{u,v\}$ ، یال نامیده می‌شود و $e=\{u,v\}$ دو رأس u و v را به هم وصل می‌کند. اگر $e=\{u,v\}$ یک یال گراف G باشد، آن‌گاه u و v مجاورند. این مطلب با $u \leftrightarrow v$ نیز نشان داده می‌شود. دو یال e_1 و e_2 مجاور نامیده می‌شوند، هرگاه در یک رأس مشترک باشند. در یک گراف، اگر یالی چند بار تکرار شود آن‌گاه یال چندگانه خواهیم داشت. همچنین یال با دو انتهای یکسان را طوقه می‌نامیم. گرافی که در آن طوقه و یال چندگانه وجود نداشته باشد گراف ساده گفته می‌شود. گراف ساده‌ی G با n رأس و m یال متشکل از مجموعه رأس‌های $V(G)=\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ و مجموعه یال‌های $E(G)=\{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ است، که در آن هر یال، یک جفت از رأس‌هاست. به علاوه، منظور از یک (n,m) گرافی است که n رأس و m یال دارد. از این به بعد، یال $e=\{u,v\}$ را با $uv \in E(G)$ نشان می‌دهیم. اگر $uv \in E(G)$ آن‌گاه رئوس u و v مجاورند. تعداد یال‌های گذرا از رأس v را درجه‌ی آن رأس نامیده و با $d_G(v)$ یا $d(v)$ نشان داده می‌شود. یک رأس گراف G زوج یا فرد نامیده می‌شود، هرگاه درجه‌ی آن به ترتیب زوج یا فرد باشد. رأس از درجه‌ی صفر در گراف G را رأس تنها و رأس از درجه‌ی یک در گراف G را رأس آویزان یا برگ می‌نامیم. رأس v را شبه آویزان گوئیم هرگاه با یک رأس آویزان مجاور باشد.

کوچکترین درجه‌ی G ، کوچکترین عدد در میان درجات رئوس G است و با $\delta(G)$ نمایش داده می‌شود. به طور مشابه، ماکزیمم درجه‌ی گراف با $\Delta(G)$ نشان داده می‌شود. گراف G را منتظم از درجه‌ی k می‌نامیم، هرگاه تمام رئوس آن از درجه‌ی k باشند. اگر هر رأس از V_1 با هر رأس از V_2 مجاور باشد، گراف حاصل را دو بخشی کامل نامیده و با $K_{m,n}$ نشان می‌دهند که m و n به ترتیب معرف تعداد رئوس V_1 و V_2 می‌باشند. به همین ترتیب اگر مجموعه‌ی رئوس را بتوان به

زیرمجموعه‌های مجزای V_1, V_2, \dots, V_n چنان افراز کرد که بین رئوس V_i یالی نباشد، گراف حاصل را k -بخشی کامل گویند. به علاوه اگر برای هر V_j, V_i ، که در آن $1 \leq i, j \leq k$ ، همه‌ی رئوس V_i با تمام رئوس V_j مجاور باشند، آن‌گاه گراف حاصل را k -بخشی کامل نامیده و با K_{n_1, n_2, \dots, n_k} نشان می‌دهند که n_i معرف تعداد رئوس V_i است. گراف دو بخشی $K_{1, n-1}$ را گراف ستاره نامیده و با S_n نمایش می‌دهیم.

یک گراف، کامل است هرگاه هر دو رأس آن مجاور باشند. گراف کامل n رأسی با K_n نشان داده

$$m = \frac{n(n-1)}{2} \text{ می‌شود. یک } (n, m) \text{ - گراف کامل یک گراف منتظم از درجه‌ی } n-1 \text{ است که}$$

گراف H را زیرگراف G نامند، هرگاه

$$E(H) \subseteq E(G) \text{ و } V(H) \subseteq V(G).$$

همچنین زیرگراف H از G را زیر گراف سره‌ی G گوئیم هرگاه

$$E(H) \neq E(G) \text{ و } V(H) \neq V(G).$$

زیرگراف H از G را زیرگراف فراگیر گوئیم، هرگاه $V(H) = V(G)$. زیرگراف القایی G با مجموعه رئوس $S \subseteq V(G)$ را زیرگراف القا شده از G توسط S می‌نامیم و با $G[S]$ نشان می‌دهیم.

فرض کنید u و v دو رأس از گراف G باشند. منظور از گراف $G+uv$ گراف حاصل از افزودن یال جدید uv به G است. همچنین دو زیر گراف H_1 و H_2 از گراف G را رأس - مجزا می‌نامیم، هرگاه

$$V(H) \cap V(G) = \emptyset.$$

تعریف ۱-۱. الحاق $G+H$ دو گراف G و H را به دو صورت زیر تعریف می‌کنیم:

فرض کنید G و H دو گراف باشند به طوری که $E(H) \cap E(G) = V(H) \cap V(G) = \emptyset$. در این صورت:

$$V(G+H) = V(G) \cup V(H),$$

$$E(G+H) = E(G) \cup E(H) \cup \{xy : x \in V(G), y \in V(H)\}.$$

تعریف ۱-۲. فرض کنید G_1 و G_2 دو گراف باشند. اجتماع دو گراف G_1 و G_2 ، گراف $G = \{V(G), E(G)\}$ است که آن را با $G = G_1 \oplus G_2$ نشان می‌دهیم و در آن

$$E(G) = E(G_1) \cup E(G_2) \text{ و } V(G) = V(G_1) \cup V(G_2).$$

حاصل ضرب دکارتی دو گراف G و H را با $G \times H$ نشان می‌دهیم که در آن مجموعه‌ی رأس‌ها عبارت است از $V(G \times H) = V(H) \times V(G)$ و دو رأس (a, x) و (b, x) مجاورند اگر و فقط اگر $a = b$ و $xy \in E(H)$ یا $ab \in E(G)$ و $x = y$.

فرض کنید u و v رئوسی دلخواه از گراف G (نه لزوماً متمایز) باشند. یک $u-v$ گشت از G یک دنباله‌ی متناهی $u = u_0, e_1, u_1, e_2, \dots, u_{k-1}, e_k, u_k = v$ از رئوس و یال‌هاست که با رأس u شروع و به رأس v ختم می‌شود. به طوری که $e_i = u_{i-1}u_i$ برای $i = 1, 2, \dots, k$ ، عدد k طول گشت نامیده می‌شود. یک گشت بدیهی شامل هیچ یالی نیست. دو $u-v$ گشت $u = u_0, u_1, \dots, u_{k-1}, u_k$ و $u = u_0, u_1, \dots, u_{l-1}, u_l = v$ را برابر گوییم هرگاه $k = l$ و $u_i = v_i$ برای $0 \leq i \leq k$ و در غیر این صورت متفاوتند. یک $u-v$ گشت بسته (باز) است هرگاه $u = v$ ($u \neq v$). یک گذر $u-v$ گشتی است که در آن هیچ یالی تکرار نشده است. یک $u-v$ مسیر، یک $u-v$ گشت است که در آن هیچ رأسی تکرار نشده است، بنابراین هر مسیری یک گذر است. یک گذر بسته‌ی غیربدیهی از G یک مدار نامیده می‌شود. همچنین مداری که رئوس آن مجزا باشند را یک دور می‌نامیم.

قضیه ۱-۳. گراف G دو بخشی است اگر و فقط اگر شامل هیچ دوری به طول فرد نباشد.

اثبات. به مرجع [۲۸] مراجعه شود.

گراف G را همبند می‌نامیم هرگاه بین هر دو رأس u و v از این گراف، یک $u-v$ مسیر وجود داشته باشد. رأس v را برشی نامند، هرگاه با حذف آن گراف حاصل ناهمبند شود. به همین ترتیب یال برشی نیز قابل تعریف است.

گراف بدون دور، گرافی است که در آن هیچ دوری وجود ندارد و گراف تک دور، گرافی است که در آن یک دور وجود دارد. گاهی از مفهوم دور برای یک گراف ساده و همبند که درجه‌ی تمام رئوس آن دو باشد استفاده می‌شود. اغلب یک دور n ($n \geq 3$) رأسی را با C_n نشان می‌دهند. اگر n زوج باشد دور را زوج و در غیر این صورت دور را فرد می‌نامیم.

یک گراف بدون دور را جنگل می‌نامیم، همچنین گراف همبند فاقد دور را درخت می‌نامیم. بنابراین هر مؤلفه‌ی جنگل یک درخت است. هر درخت n رأسی که دقیقاً دارای دو رأس از درجه‌ی یک است و بقیه رئوس از درجه‌ی ۲ اند را یک مسیر نامیده و آن را با P_n نشان می‌دهیم.

تعریف ۱-۴. درختی که از یک مسیر و اضافه کردن حداقل یک برگ، به هر رأس مسیر ساخته می‌شود یک گراف کاتریپلار نامیده می‌شود. رئوس روی مسیر را رأس‌های ستونی و برگ‌ها را ساق‌های گراف می‌نامند.

تعریف ۱-۵. گراف G را در نظر بگیرید. گراف دوگان یالی یا گراف خطی G را با $L(G)$ نشان داده و چنین تعریف می‌کنیم، در مرکز هر یال G یک رأس قرار دهید، این رأس‌های جدید رأس‌های $L(G)$ هستند، حال دو رأس $L(G)$ را به هم وصل می‌کنیم اگر یال‌های متناظر در G مجاور باشند.

تعریف ۱-۶. فرض کنیم G یک گراف و $V(G) = \{v_1, \dots, v_n\}$ ، در این صورت منظور از یک خودریختی از G ، جایگشتی روی $V(G)$ مانند π است که $\pi: V(G) \rightarrow V(G)$ به قسمی که v_i به v_j متصل است اگر و تنها اگر $\pi(v_i)$ به $\pi(v_j)$ متصل باشد. به راحتی دیده می‌شود که مجموعه‌ی تمام خودریختی‌های G تحت ترکیب توابع تشکیل یک گروه می‌دهند که آن را با $AutG$ نمایش می‌دهیم. توجه شود که $AutG$ روی $V(G)$ به صورت زیر عمل می‌کند:

$$\begin{aligned} AutG \times V(G) &\rightarrow V(G) \\ (\pi, v_i) &= \pi(v_i) \end{aligned}$$

تعریف ۱-۷. یک گراف G با مجموعه رئوس $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ و مجموعه یال‌های $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ می‌تواند توسط ماتریس مجاورت نشان داده شود. ماتریس مجاورت یک گراف n رأسی، ماتریس $n \times n$ است که $A(G) = [a_{ij}]$ به طوری که:

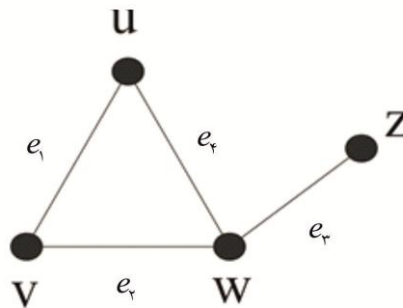
$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & v_i v_j \in E(G) \\ 0 & v_i v_j \notin E(G) \end{cases}$$

بنابراین ماتریس مجاورت گراف G یک ماتریس متقارن است که عناصر روی قطر اصلی آن صفر است. ماتریس دیگری به نام ماتریس وقوع ماتریس $B(G) = [b_{ij}]$ که به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$b_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{اگر } v_j \text{ واقع بر یال } e_i \text{ باشد} \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

مثال ۸-۱. ماتریس مجاورت و ماتریس وقوع شکل ۹-۱ به صورت زیر اند:

$$A(G) = \begin{matrix} & \begin{matrix} u & v & w & z \end{matrix} \\ \begin{matrix} u \\ v \\ w \\ z \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad \text{و} \quad B(G) = \begin{matrix} & \begin{matrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 \end{matrix} \\ \begin{matrix} u \\ v \\ w \\ z \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}.$$



شکل ۹-۱. گراف G .

تعریف ۱۰-۱. گرافی را که ماتریس مجاورت آن دارای دترمینان ناصفر باشد، گراف نامنفرد می نامند.

برای گراف همبند G می توانیم فاصله $d(u, v)$ بین دو رأس u و v را مینیمم طول $u-v$ مسیر در G تعریف کنیم و اگر هیچ مسیری از u به v وجود نداشته باشد قرار می دهیم $d(u, v) = \infty$. خواص زیر برای تابع فاصله برقراراند:

$$۱. \quad d(u, v) \geq 0, \text{ برای همه ی جفت های } u \text{ و } v \text{ از رئوس } G \text{ و } d(u, v) = 0 \text{ اگر و فقط اگر } u = v$$

$$۲. \quad d(u, v) = d(v, u), \text{ برای همه ی جفت رأس های } G,$$

$$۳. \quad d(u, v) + d(v, w) \geq d(u, w), \text{ برای همه ی سه تایی ها از رئوس } G.$$

دو یال در گراف G را مستقل گوییم، هرگاه مجاور نباشند. یک مجموعه ی دو به دو مستقل از یال های G یک تطابق در G نامیده می شوند. اگر تطابق M در بین تطابق های G دارای بیشترین اندازه

باشد M را تطابق ماکزیمم می‌نامیم. به علاوه هرگاه همه‌ی رئوس G توسط یال‌های M آغشته شوند، آن‌گاه M را یک تطابق کامل در گراف G می‌نامیم. به وضوح یک تطابق کامل یک تطابق ماکزیمم نیز می‌باشد. تعداد اعضای یک تطابق ماکزیمم در G را عدد تطابقی می‌نامند و آن را با $\mu(G)$ نشان می‌دهیم.

تعریف ۱-۱۱. گراف شیمیایی (مولکولی) گراف همبندی است که درجه‌ی هر رأس آن حداکثر ۴ می‌باشد. به همین ترتیب درخت شیمیایی نیز قابل تعریف است.

۲-۱- مقدماتی از جبر خطی

ماتریس A را می‌توان به ماتریس‌های کوچکتر، با اضافه کردن خطوط افقی و عمودی به مجموعه‌ی سطرها و ستون‌ها تقسیم کرد. چنین ماتریسی را یک ماتریس بلوکی نامیده و ماتریس‌های کوچک‌تر، بلوک‌های A نامیده می‌شوند.

مثال ۱-۱۲. فرض کنید

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 8 & 7 & 6 & 5 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

می‌توان A را به طریق زیر به بلوک‌هایی تقسیم کرد:

$$A = \begin{pmatrix} \boxed{1} & \boxed{3 \ 2} & \boxed{4} \\ \boxed{5} & \boxed{6 \ 7} & \boxed{8} \\ \boxed{8} & \boxed{7 \ 6} & \boxed{5} \\ \boxed{4} & \boxed{3 \ 2} & \boxed{1} \end{pmatrix}$$

بلوک‌های A عبارتند از:

$$B_1 = [1], B_2 = [2, 3], B_3 = [4],$$

$$B_{\gamma} = \begin{bmatrix} 5 \\ 8 \\ 4 \end{bmatrix}, B_{\delta} = \begin{bmatrix} 6 & 7 \\ 7 & 6 \\ 3 & 2 \end{bmatrix}, B_{\epsilon} = \begin{bmatrix} 8 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

$$\Rightarrow A = \begin{pmatrix} B_{\gamma} & B_{\delta} & B_{\epsilon} \\ B_{\gamma} & B_{\delta} & B_{\epsilon} \end{pmatrix}.$$

ماتریس A می‌تواند به صورت یک ماتریس $m \times n$ باشد که درایه‌های آن خود ماتریس‌های $r \times s$ می‌باشند. به عبارت دیگر

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix}_{m \times n}$$

که در آن A_{ij} ها ماتریس‌های بلوکی هستند. اکنون فرض کنید A و B ماتریس‌های بلوکی از یک نوع باشند، در این صورت

$$A+B = \begin{pmatrix} A_{11}+B_{11} & \dots & A_{1n}+B_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}+B_{m1} & \dots & A_{mn}+B_{mn} \end{pmatrix}_{m \times n}.$$

به طور مشابه، می‌توان حاصل ضرب AB را نیز تعریف کرد که A ماتریسی $m \times n$ و B ماتریسی $n \times s$ است.

توان‌های یک ماتریس مانند A از حاصل ضرب ماتریس A در خودش حاصل می‌شوند. همچنین چندجمله‌ای‌های ماتریس را می‌توان به صورت زیر تعریف کرد:

اگر $\chi(x) = a_k x^k + a_{k-1} x^{k-1} + \dots + a_1 x + a_0$ یک چندجمله‌ای از درجه‌ی k باشد که در آن a_0, a_1, \dots, a_k عناصر میدان F هستند و A یک ماتریس مربعی روی میدان F ، آن‌گاه چندجمله‌ای ماتریسی $\chi(A)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\chi(A) = a_k A^k + a_{k-1} A^{k-1} + \dots + a_1 A + a_0 I.$$

مثال ۱-۱۳. فرض کنید $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$ و $\chi(x) = 2x^2 - x + 3$. در این صورت:

$$\chi(A) = 2A^2 - A + 3.$$

اکنون فرض کنید A یک ماتریس مربعی از مرتبه n باشد و $1 \leq i, j \leq n$. همچنین فرض کنید A_{ij} زیرماتریسی مربعی از مرتبه $n-1$ باشد که از حذف سطر i ام و ستون j ام A حاصل می شود. در این صورت قضیه ی زیر نتیجه خواهد شد:

قضیه ۱-۱۴.

$$\det A = \sum_{j=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det A_{ij} = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det A_{ij}.$$

مثال ۱-۱۵. فرض کنید

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

با بسط سطر دوم داریم:

$$\begin{aligned} \det A &= (-1)^4 \cdot 3 \cdot \det \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix} + (-1)^5 \cdot 2 \cdot \det \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 4 \\ 1 & 3 & 0 \end{pmatrix} \\ &= (-1)^4 \cdot 3 \cdot 1 + (-1)^5 \cdot 2 \cdot \det(-7) = 17. \end{aligned}$$

قضیه ۱-۱۶. فرض کنید $A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ B & A_2 \end{pmatrix}$ که در آن A_1, A_2, B و A_1 زیرماتریس های مربعی A هستند. در این صورت داریم:

$$\det A = \det A_1 \cdot \det A_2.$$

قضیه ۱-۱۷. فرض کنید A یک ماتریس از مرتبه n باشد. در این صورت:

$$\det(A + \lambda I) = \sum_{p=0}^n \lambda^p c_{n-p},$$

که در آن c_{n-p} برابر است با جمع کاهدهای اصلی مرتبه $n-p$ از A

نتیجه ۱-۱۸.