

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ



دانشگاه اراک

دانشکده علوم پایه

کارشناسی ارشد ریاضی کاربردی (گرایش آنالیز عددی)

محاسبه انرژی برخی گرافها

پژوهشگر

معصومه امیری

استاد راهنما

دکتر علی محمد نظری

استاد مشاور

دکتر بهنام سپهریان

زمستان 1391

بسم الله الرحمن الرحيم

محاسبه انرژی برخی گرافها

توسط:

معصومه امیری

پایان نامه

ارائه شده به مدیریت تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی از فعالیت های تحصیلی لازم

برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ریاضی کاربردی (گرایش آنالیز عددی)

از

دانشگاه اراک

اراک-ایران

ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته پایان نامه با درجه:
دکتر علیمحمد نظری (استاد راهنما و رئیس کمیته)..... استادیار
دکتر بهنام سپهریان (استاد مشاور)..... استادیار
دکتر مهدی سهرابی حقیقت (داور)..... استادیار

دی ۱۳۹۱

تقدیم بہ پیشگاہ پاک سوگان استقامت و ایثار، پدر و مادرم

و

تقدیم بہ ہمسرم و دختر عزیزم، موبہتی کہ

حضورش موجب رحمت، پاس و شادی زندگیم کردید.

سپاس خدای را

که لایموت است و انسان هم‌پیمانش، حامل روحش و صاحب رسالتش و بالاخره جانشینش در این طبیعت معنی‌دار و مقدس که آینه قدرت و خردمندی خداست و پیکره‌ای است زنده و خودآگاه که بر سنت‌های خدا می‌گردد و می‌روید و می‌زید و می‌زاید و بر زبان هر سنگریزه‌اش دفتر هر برگش، از نطق آب و نطق خاک و نطق گلش سخن عشق می‌روید و شعر خدا می‌تراود.

خدایی که امواجی گوناگون و بی‌شمار از اقیانوس بیکران و بی‌انتهای یک حقیقت، آینه‌ای پاک و وفادار از آیات یک روح، یک وجود، یک شعور که سرچشمه زاینده و تابنده یک حیات است و حرکت و زیبایی و جهت.

تمامی آنچه به جهان روح می‌بخشد و به بودن معنی و به انسان ارزش و به زندگی مسئولیت و با خدایی آنچنان و در جهانی اینچنین انسان اینگونه آزاد و آفریننده که فرشتگان در پایش به سجود افتاده‌اند و زمین و آسمان و هر چه در این میانه است مسخر اویند.

اگر تنهاترین تنها شوم، باز خدا هست

او جانشین همه نداشتن‌هاست...

سپاس‌گزاری

آن‌گاه که لحظه‌ها به یاد اوست لحظه‌ها هم زیباست. بیش از هر چیز پروردگارم را شکرگزارم که به من توفیق داد بهترین سال‌های عمرم در کسب علم و دانش بگذرد.

اگرچه در کلام نمی‌گنجد اما خالصانه‌ترین ارادت قلبیم را تقدیم به استاد راهنمای ارجمندم، دکتر علیمحمد نظری می‌نمایم که با علم و ایمان بی‌پایانشان و با دانش و بردباری بی‌دریغشان هدایت‌م نمودند. طی این مسیر و انجام این پایان‌نامه جز، به راهنمایی و حمایت ایشان میسر نمی‌شد. در نزدشان آموختم که اگر راه دشوار هم باشد به پایداری، هموار می‌گردد و اگر نازیبا، به بردباری تماشا می‌شود. در پرتو روحیه پر از امیدشان بود که تمام دلسردی‌ها رنگ می‌بخت و در سایه وجود خستگی‌ناپذیرشان، پرسش‌ها گاه و بی‌گاه پاسخ می‌یافت.

همچنین بر خود لازم می‌دانم که به عنوان یک شاگرد، از تجربه‌های استاد مشاور خود، دکتر بهنام سپهریان مراتب قدردانی و سپاس را به جای بیاورم

از استاد ارجمند جناب آقای دکتر سهرابی که با وجود مشغله فراوان داوری این پایان‌نامه را پذیرفتند کمال تشکر را دارم.

در اینجا لازم می‌دانم از دوستان عزیزم فاطمه نادی‌زاده، ساحل علیخانی، مریم مهدوی پارسا و غزال قدوسی که در این مدت همواره یاریگر من بودند قدردانی کنم

در پایان، از تمامی اساتید گروه ریاضی از دوره کارشناسی تا به امروز که زمینه رشد و شکوفایی اندیشه‌ام را فراهم نمودند بی‌نهایت سپاسگزارم.

معصومه امیری

۱۳۹۱

چکیده

انرژی یک گراف عبارت است از مجموع قدر مطلق مقادیر ویژه ماتریس مجاورت آن گراف. در این پایان نامه ما به چگونگی محاسبه انرژی انواع مختلف گرافها می پردازیم. در ادامه به معرفی انرژی ماتریس لاپلاسیان یک گراف پرداخته و برای تعدادی از گرافها آن را محاسبه می کنیم. در فصل بعد به بررسی محاسبه انرژی یک گراف بعد از حذف یک یا چند یال آن می پردازیم. در پایان کاربرد انرژی گرافها را در علم شیمی مطرح می نماییم.

واژگان کلیدی

ماتریس مجاورت، ماتریس لاپلاسیان، انرژی گراف، انرژی لاپلاسیان، مقدار تکین.

پیشگفتار

انرژی گراف اولین بار توسط کالسون در سال ۱۹۷۰ مورد استفاده قرار گرفت و بعدها به علم شیمی راه پیدا کرد. همانطور که می‌دانیم امروزه یکی از معضلات جبر خطی پیدا کردن مقادیر ویژه ماتریس‌هاست که ما در این پایان‌نامه با استفاده از شکل خاص ماتریس‌های مجاورت گراف‌های خاص، مقادیر ویژه و در نهایت انرژی آن‌ها را محاسبه می‌کنیم.

انرژی یک گراف عبارت است از مجموع قدرمطلق مقادیر ویژه آن.

در فصل اول انرژی گراف‌های سودار از جمله درخت‌ها، دورها و ... را محاسبه کرده و نشان می‌دهیم که با استفاده از یک نمایش انتگرالی خاص می‌توان بدون داشتن مقادیر ویژه و تنها با داشتن چند جمله‌ای مشخصه انرژی یک گراف را محاسبه کرد.

در فصل بعد به معرفی انرژی لاپلاسیین یک گراف پرداخته و کران‌های متعددی برای گراف‌های خاص به دست آورده و در نهایت به مقایسه انرژی گراف و انرژی لاپلاسیین آن می‌پردازیم.

در فصل سوم بررسی می‌کنیم که انرژی یک گراف با حذف یال‌های مختلف چه تغییری پیدا می‌کند. مثال‌های ارائه شده نشان خواهد داد که انرژی آن ممکن است افزایش، کاهش، یا اینکه بدون تغییر باقی بماند.

در ادامه به چگونگی کاربرد انرژی گراف در علم شیمی می‌پردازیم و در نهایت انرژی متمم و انرژی توان برخی از گراف‌های خاص را به عنوان یافته‌های عددی به دست می‌آوریم.

فهرست مطالب

۱	تعاریف، قضایا و مفاهیم مقدماتی	۱
۱	۱.۱ تعاریف مقدماتی	۱
۱۱	۲.۱ لم‌ها و قضایای مقدماتی	۱۱
۱۳	۳.۱ مفاهیم مقدماتی	۱۳
۱۵	۲ انرژی گراف‌های سودار	۱۵
۱۵	۱.۲ تاریخچه	۱۵
۱۵	۲.۲ مقدمه	۱۵
۱۶	۳.۲ ویژگی‌های اساسی گراف‌های سودار	۱۶
۲۶	۴.۲ انرژی درخت‌ها	۲۶
۳۰	۵.۲ محاسبه انرژی دورها	۳۰
۳۷	۶.۲ نمایش انتگرالی برای گراف‌های سودار	۳۷
۳۹	۳ انرژی لاپلاسیان یک گراف	۳۹
۳۹	۱.۳ مقدمه	۳۹
۳۹	۲.۳ مطالب مورد نیاز	۳۹
۴۱	۳.۳ مفاهیم اولیه	۴۱
۴۵	۱.۳.۳ مفهوم انرژی لاپلاسیان	۴۵
۴۶	۲.۳.۳ نتایج اصلی	۴۶
۵۶	۴ تغییر انرژی گراف‌ها	۵۶
۵۶	۱.۴ تغییر انرژی گراف‌ها در جهت حذف یال	۵۶
۵۶	۱.۱.۴ مقدمه	۵۶
۵۷	۲.۴ نامساوی مقدار تکین	۵۷
۶۰	۳.۴ حذف مجموعه یال	۶۰

۶۳ حذف یال منحصر به فرد	۴.۴
۷۳ کاربردها و نتایج	۵
۷۳ چگونگی کاربرد انرژی گراف در علم شیمی	۱.۵
۷۸ نتایج عددی	۲.۵
۷۸ تعاریف و قضایا	۱.۲.۵
۸۱ مراجع	
۸۳ واژه‌نامه فارسی به انگلیسی	
۸۶ واژه‌نامه انگلیسی به فارسی	

فصل ۱

تعاریف، قضایا و مفاهیم مقدماتی

در این فصل مطالبی را که در این پایان نامه به آن نیازمندیم به اختصار توضیح می‌دهیم.

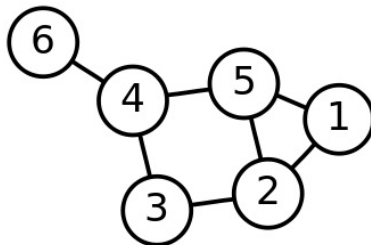
۱.۱ تعاریف مقدماتی

تعریف ۱.۱.۱. گراف: یک گراف یک سه تایی مرتب مانند $G = (V, E, \varphi)$ است که V مجموعه رئوس و E مجموعه یال‌هاست و φ یک تابع از $V \times V \rightarrow E$ است.

تعریف ۲.۱.۱. دو رأس را مجاور گوئیم اگر دو رأس حداقل یک یال مشترک داشته باشند.

تعریف ۳.۱.۱. همسایگی یک رأس مانند v در گراف G برابر است با مجموعه رأس‌های مجاور با v . همسایگی را با $N(v)$ نشان می‌دهیم.

مثال ۴.۱.۱. در گراف شکل (۱.۱) $N(۵) = \{۴, ۲, ۱\}$ و $N(۶) = \{۴\}$



شکل ۱.۱: $N(۵) = \{۴, ۲, ۱\}$ و $N(۶) = \{۴\}$

تعریف ۵.۱.۱. درجه رأس: تعداد یال‌هایی را که از رأس u خارج یا به آن وارد می‌شوند، درجه رأس u گوئیم.

کمترین و بیشترین درجه رئوس G را به ترتیب با $\delta(G)$ و $\Delta(G)$ نمایش می‌دهیم.

تعریف ۶.۱.۱. رأس تنها: یک رأس با درجه صفر، رأس منفرد یا رأس تنها نامیده می‌شود.

تعریف ۷.۱.۱. مسیر: یک مسیر یک گراف غیرتهی $P = (V, E)$ به شکل $V = x_0, x_1, \dots, x_k$ و $E = x_0x_1, x_1x_2, \dots, x_{k-1}x_k$ است که x_i ها همگی متمایز هستند. رأس‌های x_0 و x_k رأس‌های انتهایی و رأس‌های x_1, x_2, \dots, x_{k-1} رأس‌های میانی هستند.

تعریف ۸.۱.۱. گراف همبند: اگر در گراف G بین هر دو رأس دلخواه حداقل یک مسیر وجود داشته باشد گراف همبند است در غیراین صورت، گراف ناهمبند است.

تعریف ۹.۱.۱. طوقه: یالی با دو انتهای یکسان را طوقه گوئیم.

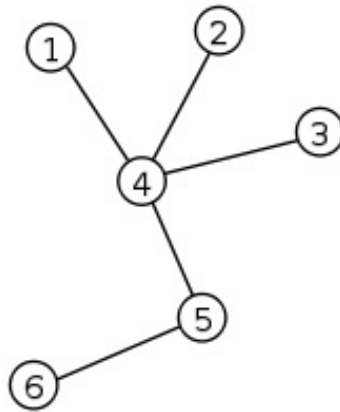
تعریف ۱۰.۱.۱. یال موازی: دو یال بارئوس ابتدا و انتهای یکسان را یال موازی گوئیم.

تعریف ۱۱.۱.۱. دور: اگر $P = x_0x_1\dots x_{k-1}$ یک مسیر و $k \geq 3$ آن‌گاه، گراف $C = P + x_{k-1}x_0$ ، یک دور نامیده می‌شود.

تعریف ۱۲.۱.۱. درخت: گراف همبند بدون دور را درخت گوئیم.

تعریف ۱۳.۱.۱. درخت برچسب‌دار: درخت برچسب‌دار، درختی است که به هر رأسی یک برچسب منحصر به فرد داده شده است.

مثال ۱۴.۱.۱. شکل زیر یک درخت برچسب‌دار با ۶ رأس و ۵ یال می‌باشد.



شکل ۲.۱: درخت برچسب‌دار

تعریف ۱۵.۱.۱. گراف تهی: گراف تهی، گرافی است که هیچ یالی نداشته باشد.

تعریف ۱۶.۱.۱. گراف کامل: گراف ساده K_n را یک گراف کامل می‌نامیم هر گاه دارای n رأس بوده و همه رؤوس با یکدیگر مجاور باشند.

تعریف ۱۷.۱.۱. برگ: رأس درجه یک در درخت را، برگ گوییم

تعریف ۱۸.۱.۱. گراف ستاره: گراف ستاره گرافی است متشکل از یک رأس به عنوان مرکز که با $n - 1$ برگ مجاور است.

تعریف ۱۹.۱.۱. طول مسیر: تعداد یال‌های یک مسیر، طول آن مسیر گفته می‌شود.

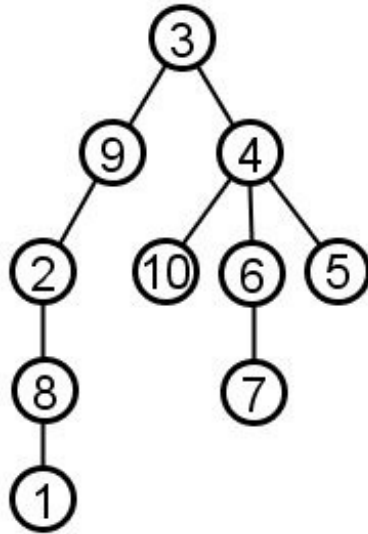
تعریف ۲۰.۱.۱. قطر: قطر G عبارت است از بیشترین فاصله بین دو رأس از G .

تعریف ۲۱.۱.۱. گراف ساده: گراف ساده گرافی است که دارای طوقه و یال موازی نباشد.

تذکر: لازم به ذکر است که کلیه گراف‌های مورد بحث در این پایان‌نامه گراف‌های ساده می‌باشند.

تعریف ۲۲.۱.۱. دو گراف G و H یک‌ریخت گوییم اگر $v(G) = v(H)$ و $E(G) = E(H)$ و $\varphi(G) = \varphi(H)$ که φ یک تابع یک‌به‌یک و پوشا از G به H است.

تعریف ۲۳.۱.۱. درخت سودار ریشه‌دار شده: یک درخت، درخت ریشه‌دار شده نامیده می‌شود اگر یک رأس از آن را به عنوان ریشه نمایش دهیم، به این صورت که یال‌ها جهت‌هایی به سمت ریشه یا به خارج ریشه داشته باشند.



شکل ۳.۱: درخت ریشه‌دار شده با ۳ گره

تعریف ۲۴.۱.۱. گراف منتظم: گراف G منتظم است اگر ثابت r وجود داشته باشد به طوری که درجه هر رأس، r باشد. چنین گرافی را r -منتظم گوییم.

تعریف ۲۵.۱.۱. مکمل (متمم) گراف: متمم گراف ساده G ، که آن را با G^c نمایش می‌دهیم، گراف ساده‌ای است با مجموعه رأس‌های V ، که در آن دو رأس مجاورند، اگر و تنها اگر آن رأس‌ها در G ، مجاور نباشند.

تعریف ۲۶.۱.۱. گراف دوبخشی: گراف G را دوبخشی نامیم هر گاه $X \cap Y = \emptyset$ و $V(G) = X \cup Y$ و هیچ دو رأسی در X یا Y با یکدیگر مجاور نباشند.

تعریف ۲۷.۱.۱. گراف دوبخشی کامل $K_{m,n}$ گرافی است که مجموعه رأس‌های آن به دو بخش X با $|X| = m$ و $|Y| = n$ افراز شده باشد و هر رأس X با هر رأس Y مجاور باشد.

تعریف ۲۸.۱.۱. زیرگراف: گراف $G'(V', E', \varphi')$ را زیرگراف (G, E, φ) نامیم هر گاه $V' \subseteq V$ و $E' \subseteq E$.

تعریف ۲۹.۱.۱. زیرگراف فراگیر: در صورتی که زیرگراف H از G در شرط $V(H) = V(G)$ صدق کند، آن را یک زیرگراف فراگیر از G می‌نامیم.

تعریف ۳۰.۱.۱. زیرگراف القایی: زیرگرافی از G که مجموعه رأس‌های آن V' و مجموعه یال‌هایش برابر مجموعه یال‌هایی از G باشد که هر دو سر آن‌ها در V' واقع است، زیرگراف القا شده توسط V' نامیده می‌شود.

تعریف ۳۱.۱.۱. گراف زمینه: اگر در یک گراف ساده، تمام طوقه‌ها را حذف کنیم و همچنین از بین هر دو رأس مجاور، تمام یال‌های موازی را حذف کنیم، به زیرگراف فراگیر ساده‌ای از G می‌رسیم که گراف ساده زمینه G نامیده می‌شود.

تعریف ۳۲.۱.۱. مرتبه گراف: تعداد رأس‌های گراف G را مرتبه گراف G گوئیم و آن را با نماد $|G|$ نمایش می‌دهیم.

تعریف ۳۳.۱.۱. زیرماتریس اصلی: یک زیرماتریس اصلی از یک ماتریس مربعی به وسیله یک مجموعه از سطرها و نظیر به نظیر مجموعه ستون‌ها تشکیل می‌شود.

مثال ۳۴.۱.۱. $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ که به عنوان مثال $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ و $\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ دو زیرماتریس اصلی A می‌باشند.

تعریف ۳۵.۱.۱. ماتریس یکانی: ماتریس مربعی A با عناصر مختلط را یکانی گوئیم، هرگاه ترانهاده ماتریس متشکل از مزدوج مختلط اعضای A با وارون A برابر باشد، یعنی

$$(\bar{A})^T A = I.$$

تعریف ۳۶.۱.۱. ماتریس مجاورت یک گراف: برای یک گراف G ، ماتریس مجاورت $A = A_G$ یک ماتریس $n \times n$ می باشد به طوری که

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{اگر } (i,j) \in E \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

به طور واضح ماتریس مجاورت یک گراف، یک ماتریس متقارن است.

تعریف ۳۷.۱.۱. ماتریس لاپلاسیان: ماتریس لاپلاسیان $L = L_G$ یک ماتریس $n \times n$ است به طوری که

$$L_{i,j} = \begin{cases} -1 & \text{اگر } (i,j) \in E \\ d_i & \text{اگر } i = j \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

که d_i درجه رأس i ام است. به طور واضح ماتریس لاپلاسیان نیز یک ماتریس متقارن می باشد.

تعریف ۳۸.۱.۱. ماتریس کنفرانس: ماتریس کنفرانس یک ماتریس مربعی C با درایه صفر روی قطر اصلی و 1 و -1 خارج قطر می باشد، به طوری که CC^T مضربی از ماتریس همانی است. اگر ماتریس از مرتبه $n \times n$ باشد، آن گاه $C^T C = (n-1)I$

تعریف ۳۹.۱.۱. تورنومنت: یک گراف سودار است که به وسیله قرار دادن یک سو برای هر یال در یک گراف کامل بی سو به دست می آید. به عبارت دیگر، تورنومنت یک گراف سودار است که هر جفت از رأس های آن توسط یک یال سودار به هم متصل می شوند.

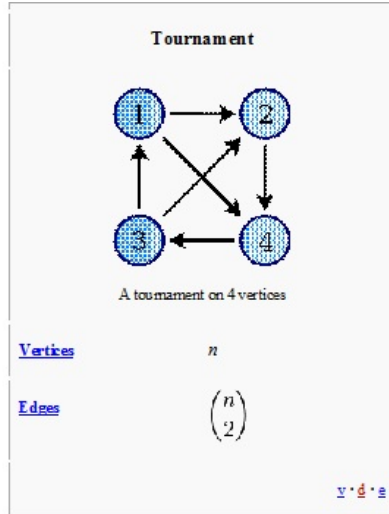
مثال ۴۰.۱.۱. شکل (۴-۱) یک تورنومنت با ۴ رأس می باشد.

تعریف ۴۱.۱.۱. ماتریس متعامد: ماتریس Q متعامد است اگر ترانهاده آن مساوی با معکوس آن باشد، یعنی $Q^T = Q^{-1}$ یا $Q^T Q = Q Q^T = I$

تعریف ۴۲.۱.۱. ماتریس نرمال: ماتریس مربعی A نرمال است اگر $A^* A = A A^*$ که A^* ترانهاده مزدوج A می باشد. برای یک ماتریس A با عناصر حقیقی داریم $A^* = A^T$ و بنابراین نرمال است اگر $A^T A = A A^T$. به عبارت دیگر A نرمال است اگر و تنها اگر بتوانیم آن را به صورت زیر نمایش دهیم

$$A = U \Lambda U^*$$

که $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ و $U^* U = U U^* = I$ ، عناصر λ از ماتریس قطری Λ ، مقادیر ویژه A و ستون های U بردارهای ویژه A می باشند.



شکل ۴.۱: تورنومنت

تعریف ۴۳.۱.۱. ضرب داخلی: ضرب داخلی دو بردار $a = [a_1, a_2, \dots, a_n]^T$ و $b = [b_1, b_2, \dots, b_n]^T$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

$$a \cdot b = \sum_{i=1}^n a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n.$$

تعریف ۴۴.۱.۱. ضرب کرونیکر^۱: فرض کنیم $A \in R^{m \times n}$ و $B \in R^{p \times q}$ بنابراین ضرب کرونیکر A و B به صورت زیر تعریف می‌شود

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix} \in R^{mp \times nq},$$

همچنین $A \otimes B \neq B \otimes A$

تعریف ۴۵.۱.۱. ضرب کرونیکر دو گراف: ضرب کرونیکر $G \times H$ از دو گراف G و H گرافی با مجموعه رئوس $V(G) \times V(H)$ و مجموعه یال‌های زیر می‌باشد.

$$\{(u, x), (v, y) \mid (u, v) \in E(G), (x, y) \in E(H)\}.$$

برای هر دو گراف G و H به ترتیب با ماتریس‌های مجاورت $A(G)$ و $A(H)$ ، ماتریس مجاورت $A(G) \otimes A(H)$ از گراف $G \otimes H$ به صورت زیر داده می‌شود

^۱Kronecker

$$A(G \otimes H) = A(G) \otimes A(H).$$

تعریف ۴۶.۱.۱. فرض کنیم A یک ماتریس مربعی از مرتبه n باشد، عناصر $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ قطر A نامیده می‌شوند. اثر ماتریس A را با $\text{trace} A$ نمایش داده و به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\text{trace} A = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}.$$

تعریف ۴۷.۱.۱. اگر X یک مجموعه ناتهی باشد هر تابع دوسویی $f : X \rightarrow X$ را یک جایگشت عناصر X می‌نامیم.

تعریف ۴۸.۱.۱. دترمینان یک ماتریس $n \times n$ ، A را به صورت زیر نمایش می‌دهیم

$$\det A = \sum_{\sigma} \text{sgn}(\sigma) a_{1\sigma(1)} \dots a_{n\sigma(n)}.$$

که مجموع روی همه جایگشت‌های $\sigma_1, \dots, \sigma_n$ می‌باشد و $\text{sgn}(\sigma)$ نیز بر طبق این که σ زوج یا فرد است، ۱ یا -۱ می‌باشد.

تعریف ۴۹.۱.۱. رتبه یک ماتریس: فرض کنیم A یک ماتریس از مرتبه $m \times n$ باشد. آن‌گاه زیر فضای به وجود آمده به وسیله بردارهای سطری A فضای سطری A نامیده می‌شود. زیر فضای به وجود آمده به وسیله ستون‌های A فضای ستونی A نامیده می‌شود. رتبه یک ماتریس A بعد فضای ستونی A یا بعد فضای سطری آن می‌باشد و با $\text{rank} A$ نمایش داده می‌شود.

تعریف ۵۰.۱.۱. دو ماتریس A و B را مشابه گوییم، اگر یک ماتریس نامنفرد T وجود داشته باشد به قسمی که $T^{-1}AT = B$ ، یک خاصیت مهم ماتریس‌های مشابه این است که دو ماتریس مشابه دارای مقادیر ویژه یکسان هستند.

تعریف ۵۱.۱.۱. ماتریس نامنفرد: یک ماتریس A از مرتبه $n \times n$ نامنفرد نامیده می‌شود اگر $\text{rank} A = n$ ، در غیر این صورت ماتریس، منفرد است.

اگر A نامنفرد باشد، آن‌گاه یک ماتریس $n \times n$ ، A^{-1} وجود دارد که معکوس A نامیده می‌شود به طوری که $A^{-1}A = AA^{-1} = I$ ، در واقع یک ماتریس نامنفرد است اگر و تنها اگر دترمینان آن مخالف صفر باشد.

تعریف ۵۲.۱.۱. ماتریس جایگشت: یک ماتریس مربعی مخالف صفر مانند P را یک ماتریس جایگشت گوئیم اگر تنها یک عنصر مخالف صفر که یک است در هر سطر و ستون یافت شود و بقیه همگی برابر صفر باشند.

تعریف ۵۳.۱.۱. یک ماتریس مربعی A بالا هسنبرگی است اگر $a_{ij} = 0$ به ازای $i > j + 1$. ترانهاده یک ماتریس بالا هسنبرگی یک ماتریس پایین هسنبرگی است، یعنی $a_{ij} = 0$ به ازای $j > i + 1$.

یک ماتریس بالا هسنبرگی به شکل زیر می باشد

$$\begin{bmatrix} * & . & . & . & * & * \\ * & . & . & . & * & * \\ . & & & & . & . \\ & . & & & . & . \\ & . & . & & . & . \\ . & & & & * & * \end{bmatrix}.$$

یک ماتریس بالا هسنبرگی کاهش ناپذیر است اگر

$$a_{i,i-1} \neq 0, \quad i = 2, 3, \dots, n.$$

تعریف ۵۴.۱.۱. ماتریس همراه: یک ماتریس بالا هسنبرگی کاهش ناپذیر به شکل

$$C = \begin{bmatrix} . & . & . & . & a_1 \\ ۱ & . & . & . & a_2 \\ . & ۱ & . & . & a_3 \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & ۱ & a_n \end{bmatrix}.$$

را یک ماتریس بالا همراه گوئیم. ترانهاده یک ماتریس بالا همراه یک ماتریس پایین همراه است.

تعریف ۵۵.۱.۱. فرض کنیم A یک ماتریس $n \times n$ باشد، معادله $\det(A - \lambda I) = 0$ چندجمله‌ای مشخصه A می باشد. با استفاده از قضیه اساسی جبر معادله n ریشه موهومی دارد که این ریشه‌ها مقادیر ویژه A نامیده می شوند.

تعریف ۵۶.۱.۱. ماتریس مربعی A متقارن نامیده می شود اگر $A = A^T$. همچنین مقادیر ویژه یک ماتریس متقارن، حقیقی می باشند.

تعریف ۵۷.۱.۱. مقدار $\rho(A)$ که به صورت $\rho(A) = \max |\lambda_i|$ تعریف می شود که در آن $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ مقادیر ویژه A هستند، شعاع طیفی A نامیده می شود.