

**SVEUČILIŠTE U ZAGREBU**  
**PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET**  
**MATEMATIČKI ODSJEK**

Ana Vidaček

**VAŽNOST I ZALIHOST BRIDOVA U**  
**GRAFOVIMA**

Diplomski rad

Voditelj rada:  
prof. dr. sc. Tomislav Došlić

Zagreb, studeni, 2016.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana \_\_\_\_\_ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. \_\_\_\_\_, predsjednik
2. \_\_\_\_\_, član
3. \_\_\_\_\_, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom \_\_\_\_\_.

Potpisi članova povjerenstva:

1. \_\_\_\_\_
2. \_\_\_\_\_
3. \_\_\_\_\_

# Sadržaj

<b>Sadržaj</b>	<b>iii</b>
<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>1 Teorija grafova</b>	<b>3</b>
1.1 Osnovni pojmovi . . . . .	3
1.2 Savršena sparivanja . . . . .	8
1.3 Važnost i zalihost . . . . .	11
<b>2 Važnost i zalihost bridova u nekim klasama grafova</b>	<b>13</b>
2.1 Graf $Z_n$ . . . . .	13
2.2 Graf $L_n$ . . . . .	16
2.3 Graf $\mathbb{R}_n$ . . . . .	20
2.4 Graf $\Pi_n$ . . . . .	23
2.5 Graf $B_n$ . . . . .	25
2.6 Graf $A_n$ . . . . .	27
2.7 Graf $Q_n$ . . . . .	29
<b>3 Primjena važnosti i zalihosti</b>	<b>33</b>
3.1 Benzenoidni paralelogram . . . . .	33
3.2 $\pi$ -elektroni . . . . .	36
<b>4 Zaključak</b>	<b>41</b>
<b>Bibliografija</b>	<b>43</b>

# Uvod

Tema ovog diplomskog rada je *Važnost i zalihost bridova u grafovima*. Cilj nam je odrediti važnost i zalihost bridova u nekim klasama grafova.

U prvom poglavlju ćemo navesti osnovne pojmove iz teorije grafova. Dat ćemo i uvid u neka svojstva grafova te definirati neke vrste grafova koji su nam od interesa. Kako bi došli do definicije važnosti i zalihosti bridova u grafu nužan nam je pojam sparivanja pa ćemo u ovom poglavlju definirati taj pojam. Iskazat ćemo tvrdnje i teoreme koji nam govore u kojim klasama grafova postoji savršeno sparivanje jer su nam samo takve klase grafova od interesa u ovom diplomskom radu. Osim toga ćemo iskazati tvrdnje koje nam govore kako izračunati broj savršenih sparivanja ili kako dati donju i gornju ogradu za broj savršenih sparivanja. Nakon pojma savršenog sparivanja uvest ćemo pojmove važnosti i zalihosti bridova u grafu te navesti relacije za lakše određivanje njihovih vrijednosti ili donjih i gornjih ograda u grafu. Nakon što smo uveli sve pojmove koje su nam od interesa u ovom diplomskom radu, krećemo na određivanje važnosti i zalihosti bridova u nekim zanimljivim klasama grafova. Tome smo posvetili drugo poglavlje. Kao zanimljive klase grafova smo uzeli graf  $Z_n$  koji se sastoji od  $n$  šesterokuta pozicioniranih u cik-cak poziciji, graf  $L_n$  koji se sastoji od  $n$  četverokuta pozicioniranih jedan do drugog, graf  $\Pi_n$  koji je uspravna piramida čija je baza pravilni mnogokut s  $n$  stranica, graf  $R_n$  koji je uspravna prizma, graf  $A_n$  koji se sastoji od  $n$  pravilnih šesterokuta pozicioniranih jedan do drugog, graf  $B_n$  koji je bipiramida i graf  $Q_n$  koji je  $n$ -dimenzionalna hiperkocka. U prethodno navedenim grafovima ćemo prvo odrediti broj savršenih sparivanja, a onda donositi zaključke o važnosti i zalihosti bridova. U trećem poglavlju ćemo vidjeti jednu primjenu pojma važnosti i zalihosti bridova u grafovima. Prvo ćemo definirati graf  $B_{m,n}$  koji se naziva benzenoidni paralelogram. Odredit ćemo broj savršenih sparivanja u njemu te važnost i zalihost njegovih bridova. Dobivene rezultate ćemo zatim primijeniti u kemiji, tj. za računanje sadržaja  $\pi$ -elektrona u prstenovima benzenoidnog paralelograma.



# Poglavlje 1

## Teorija grafova

### 1.1 Osnovni pojmovi

Teorija grafova je dio matematike koji se bavi proučavanjem grafova. Za početak ćemo navesti definiciju grafa.

**Definicija 1.1.1.** Graf je uređeni par  $G = (V, E)$  pri čemu je  $V = V(G) \neq \emptyset$  skup vrhova i  $E = E(G)$  skup bridova. Svaki brid  $e \in E$  spaja dva vrha  $u, v \in V$ . Kažemo da su tada vrhovi  $u$  i  $v$  incidentni s  $e$ , a vrhovi  $u$  i  $v$  su susjedni i pišemo  $e = uv$ .

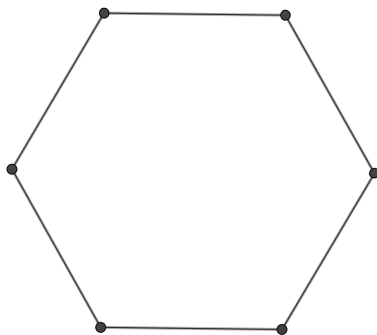
Grafovi se vrlo često opisuju grafičkim prikazom, a on treba biti takav da iz njega možemo rekonstruirati formalni zapis grafa.

U ovom radu ćemo proučavati samo konačne grafove. *Konačan graf* je onaj u kojem su  $V$  i  $E$  konačni skupovi, a ako su oni beskonačni skupovi, onda se radi o *beskonačnom grafu*. Graf se može sastojati od samo jednog vrha. Takav graf nema niti jedan brid, a naziv mu je *trivijalan graf*. U suprotnom je graf *netrivijalan*. Ako je  $E(G) = \emptyset$ , onda je je  $G$  *prazan graf*.

U ovom radu ćemo gledati *jednostavne grafove*, a to su grafovi koji nemaju petlji niti višestrukih bridova. Bridovi čiji se krajevi podudaraju se nazivaju *petlje*. Brid kod kojeg su krajevi različiti nazivamo pravi brid ili karika. *Višestruki bridovi* su dva ili više brida s istim parom krajeva. Jednostavan graf u kojem je svaki par vrhova spojen bridom zove se *potpun graf*, a označavamo ga s  $K_n$ .

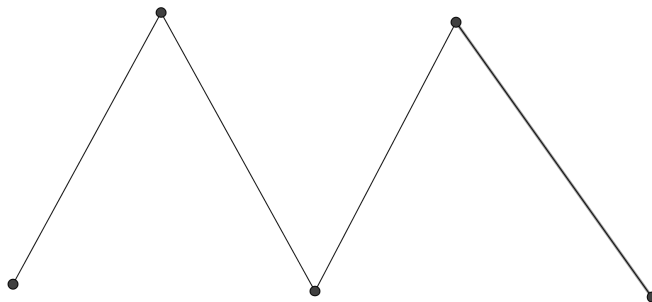
**Definicija 1.1.2.** Grafovi  $G$  i  $H$  su izomorfni i pišemo  $G \approx H$  ako postoje bijekcije  $\theta : V(G) \rightarrow V(H)$  i  $\varphi : E(G) \rightarrow E(H)$  takve da je vrh  $v$  incidentan s bridom  $e$  u  $G$  ako i samo ako je  $\theta(v)$  incidentan s  $\varphi(e)$  u  $H$ . Uređeni par  $f = (\theta, \varphi) : G \rightarrow H$  se zove *izomorfizam iz  $G$  u  $H$* . Jednostavnije, grafovi  $G$  i  $H$  su izomorfni ako je moguće označiti vrhove oba grafa na isti način. Za svaki par vrhova  $u, v$  broj bridova koji spajaju vrhove  $u$  i  $v$  u  $G$  je jednak broju bridova koji spajaju  $u$  i  $v$  u  $H$ .

**Definicija 1.1.3.** Ciklus  $C_n$  s  $n$  vrhova možemo definirati skupom vrhova  $V = \{1, 2, \dots, n\}$  i skupom bridova  $E = \{\{i, i + 1\} | i < n\} \cup \{1, n\}$ . Na primjer,  $C_6$  :



Slika 1.1: Ciklus sa šest vrhova

**Definicija 1.1.4.** Put  $P_n$  s  $n$  vrhova definiramo skupom vrhova  $V = \{1, 2, \dots, n\}$  i skupom bridova  $E = \{\{i, i + 1\} | i < n\}$ . Na primjer,  $P_5$  :

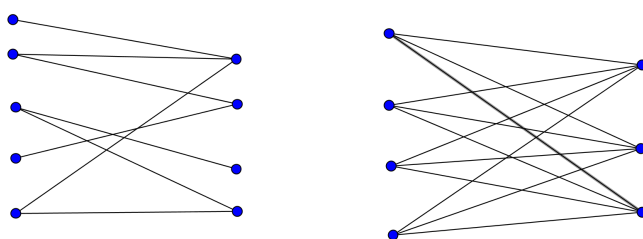


Slika 1.2: Put s pet vrhova

Graf je *povezan* ako se svaka dva vrha mogu povezati nekim putem. U suprotnom, on je *nepovezan*. Za graf kažemo da je *k-povezan* ako ne postoji skup  $k - 1$  vrhova čije uklanjanje rezultira nepovezanim grafom.

**Definicija 1.1.5.** Ako skup vrhova grafa  $G$  možemo razdvojiti u dva disjunktna skupa  $A$  i  $B$  tako da svaki brid od  $G$  spaja neki vrh skupa  $A$  s nekim iz skupa  $B$ , onda kažemo da je  $G$  bipartitan graf. Particija  $(A,B)$  se tada zove biparticija grafa. Potpun bipartitan graf jednostavan je bipartitan graf s particijom skupa vrhova  $V(G)=A\cup B$  kod kojeg je svaki vrh iz skupa  $A$  spojen sa svakim iz  $B$ . Ako je  $|A|=r$  i  $|B|=s$ , onda takav graf označavamo s  $K_{r,s}$ .

Primjere bipartitnog i potpunog bipartitnog grafa dajemo na slici 1.3. Graf određen vrhovima i bridovima kocke se zove *kubni graf*. Uočimo da je svaki put  $P_n$  bipartitan graf.



Slika 1.3: Bipartitni graf i potpun bipartitni graf  $K_{4,3}$

**Definicija 1.1.6.** Stupanj vrha  $v$  u grafa  $G$  je broj bridova koji su incidentni s  $v$ . Označimo ga s  $\deg(v)$ .

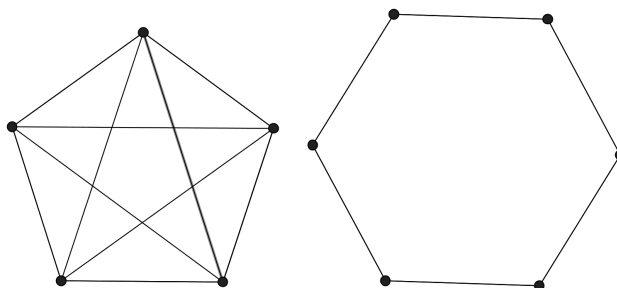
Ako je vrh petlja, onda ona stupnju vrha doprinosi sa 2. Vrh stupnja 0 zovemo izolirani vrh, a vrh stupnja 1 zovemo krajnji vrh.

**Definicija 1.1.7.** Za graf  $G$  kažemo da je regularan ako su svi njegovi vrhovi istog stupnja. Kažemo da je  $G$   $r$ -regularan ako je  $\deg(v)=r, \forall v\in V(G)$ . Cijeli broj  $r$  se zove stupanj regularnosti grafa  $G$ .

Napomenimo kako se graf koji je 3-regularan najčešće zove kubni. Primijetimo da je potpun graf  $K_n$   $(n-1)$ -regularan, a potpun bipartitni graf  $K_{n,n}$  je  $n$ -regularan.

**Definicija 1.1.8.** Neka su  $G$  i  $H$  grafovi. Ako je  $V(H)\subseteq V(G)$  i  $E(H)\subseteq E(G)$ , a svaki brid iz  $H$  ima iste krajeve u  $H$  kao što ih ima u  $G$ , tada kažemo da je  $H$  podgraf od  $G$  i pišemo  $H\subseteq G$ .  $G$  zovemo nadgraf od  $H$ . Ako je  $H\subseteq G$  i  $H\neq G$ , pišemo  $H\subset G$ , onda je  $H$  pravi podgraf od  $G$ .





Slika 1.4: 4-regularni graf i 2-regularni graf

Jednostavan graf  $G = (V, E)$  je vršno-tranzitivan ako grupa  $\text{Aut}(G)$  djeluje tranzitivno na vrhovima, tj. ako  $\forall u, v \in V, \exists g \in \text{Aut}(G)$ , tako da je  $g(u) = v$ . Slično,  $G$  je bridno-tranzitivan ako grupa  $\text{Aut}(G)$  djeluje tranzitivno na bridovima. S  $\text{Aut}(G)$  se označava automorfizam grafa  $G$ , a to je izomorfizam od  $G$  na samog sebe, tj. to je bijekcija  $f : V \rightarrow V$  koju je  $uv \in E \Leftrightarrow f(u)f(v) \in E$ . Ako je  $G$  vršno-tranzitivan graf, onda je regularan. Obrat ne vrijedi. Svaki graf koji je bridno-tranzitivan, a nije vršno-tranzitivan te je bez izoliranih vrhova je bipartitan graf.

Nakon što smo naveli osnovne pojmove iz teorije grafova prelazimo na pojam sparivanja u grafovima.

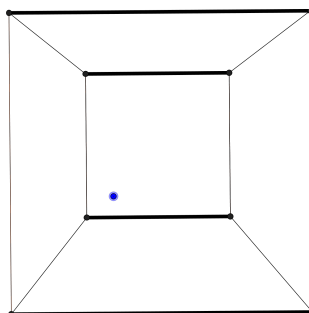
**Definicija 1.1.9.** Sparivanje u grafu  $G = (V, E)$  je podskup  $M \subseteq E$  bridova takvi da je svaki vrh iz  $G$  incidentan s najviše jednim bridom iz  $M$ . Kažemo da su dva kraja brida u  $M$  sparena u  $M$ .

Jednostavnije možemo reći da dva sparena brida nemaju zajedničkih vrhova. Sparivanje od  $M$  zasićuje vrh  $v$  ili se kaže da je vrh  $v$   $M$ -zasićen ako je neki brid iz  $M$  incidentan s  $v$ . Inače je  $v$   $M$ -nezasićen.

Jedan od osnovnijih problema kod sparivanja je pokazati da sparivanje postoji ili konstruirati sparivanje s dovoljno mnogo bridova.

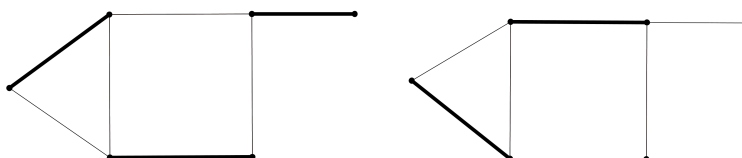
**Definicija 1.1.10.** Ako je svaki vrh iz grafa  $G$   $M$ -zasićen, tada je  $M$  savršeno sparivanje.

Savršeno sparivanje se još ponekad naziva potpuno sparivanje ili 1-faktor. Primijetimo da je savršeno sparivanje sparivanje koje spaja sve vrhove u grafu, tj. svaki vrh grafa je incidentan s točno jednim bridom u sparivanju.



Slika 1.5: Savršeno sparivanje

Sparivanje  $M$  je *maksimalno sparivanje* ako ne postoji sparivanje  $M'$  takvo da je  $M \subset M'$ , tj. ako se ne može proširiti.  $M$  je *najdulje sparivanje* u  $G$  ako ne postoji sparivanje  $M'$  za koje je  $|M'| > |M|$ . Po jedan primjer najduljeg i maksimalnog sparivanja dajemo na slici 1.6.



Slika 1.6: Najdulje i maksimalno sparivanje

Ekvivalentno je: sparivanje je maksimalno ako ne možemo dodati niti jedan brid postojećem skupu. Savršeno sparivanje je, ako postoji, najdulje sparivanje. Svako najdulje sparivanje je očito i maksimalno, a obrat ne vrijedi. Možemo primijetiti da najdulje sparivanje ne mora biti jedinstveno.

Ponekad se o sparivanju govori kao pakiranju bridova, a slično onda govorimo i o pakiranju vrhova, tj. o nezavisnim skupovima vrhova. Pokrivač (ili vršni pokrivač) je skup vrhova  $K \in V$  takvih da svaki brid iz  $G$  ima bar jedan kraj u  $K$ , a bridni pokrivač  $L$  je skup bridova takvih da je svaki vrh incidentan s barem jednim bridom iz tog skupa  $L$ . Sljedeći su parametri grafa  $G$  ovdje od interesa:

$\nu(G)$  = veličina najduljeg sparivanja (tj. pakiranja bridova) u  $G$

$\alpha(G)$  = veličina najduljeg stabilnog skupa (tj. pakiranje vrhova) u  $G$

$\tau(G)$  = veličina minimalnog pokrivača od  $G$

$\rho(G)$  = veličina minimalnog bridnog pokrivača od  $G$

Skup vrhova  $S$  grafa  $G$  je *stabilan* ili *nezavisan* ako nikoja dva vrha iz  $S$  nisu susjedna. Ako je  $K$  pokrivač od  $G$ , a  $M$  sparivanje u  $G$ , onda  $K$  sadrži barem jedan kraj svakog brida od  $M$  pa vrijedi  $|M| \leq |K|$ . Ako je  $M'$  najdulje sparivanje, a  $\bar{K}$  minimalni pokrivač, onda je  $|M'| \leq |\bar{K}|$ , pa je

$$\nu(G) \leq \tau(G) \quad (1.1)$$

Ako je  $|M| = |K|$ , onda zbog  $|M| \leq |M'| \leq |\bar{K}| \leq |K|$  slijedi da je  $M$  najdulje sparivanje, a  $K$  minimalni pokrivač. Slično, ako je  $L$  bridni pokrivač od  $G$ , a  $S$  stabilan skup vrhova, onda je  $|S| \leq |L|$  pa je

$$\alpha(G) \leq \rho(G) \quad (1.2)$$

Jednakosti u (1.1) i (1.2) vrijedi za bipartitne grafove pa je za bipartitne grafove teorija sparivanja puno lakša.

Jedna od osnovnih ideja teorije sparivanja je pojam uvećanog puta. Neka je  $M$  sparivanje u  $G$ .  $M$ -alternirajući put u  $G$  je put čiji bridovi alterniraju u  $M$  i  $E \setminus M$ .  $M$ -alternirajući put  $P$  je  $M$ -uvećani put ako su mu početak i kraj  $M$ -nezasićeni vrhovi.

## 1.2 Savršena sparivanja

Sada ćemo proučavati grafove koji dopuštaju savršena sparivanja. Napisat ćemo nešto više o sparivanju te uvesti nove klase grafova na kojima ćemo promatrati sparivanja.

Očito je svako savršeno sparivanje ujedno i najdulje i maksimalno, a obrati općenito ne vrijede. Broj bridova u savršenom sparivanju je konstantan i iznosi  $\frac{|V|}{2}$ . Za postojanje savršenog sparivanja nužno je da graf ima paran broj vrhova, ali to je samo nužan, a ne i dovoljan uvjet za postojanje savršenog sparivanja.

Komponenta grafa je neparna ili parna ako ima neparan ili paran broj vrhova. Za graf  $G$  označimo s  $c_o(G)$  broj neparnih komponenata od  $G$ .

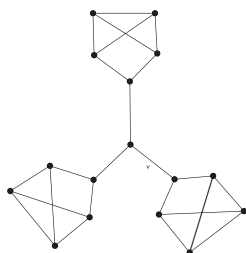
**Teorem 1.2.1.** ("Tutteov uvjet") *Graf  $G = (V, E)$  ima savršeno sparivanje ako i samo ako vrijedi*

$$c_o(G) \leq |S|, \forall S \subseteq V.$$

Posljedica prethodnog teorema je:

**Korolar 1.2.2.** 3-regularni graf  $G$  bez reznih bridova ima savršeno sparivanje.

Rezni brid grafa je onaj čijim se izbacivanjem graf raspada na više komponenti povezanosti. Još se može reći da je brid  $e \in E(G)$  rezni ako i samo ako nije brid niti jednog ciklusa od  $G$ . Napomenimo samo da 3-regularan graf s reznim bridovima (i to barem tri njih) ne mora imati savršeno sparivanje. Kao primjer navodimo graf na slici 1.7.



Slika 1.7: 3-regularan graf s 3 rezna brida

Teorem 1.2.1. je osnova za polinomski algoritam (složenosti  $O(n^3)$ ) koji za dani graf  $G$  ili nalazi savršeno sparivanje ili nalazi  $S \subseteq V$  takvo da je  $c_o(G) \leq |S|$ .

U knjizi [7] je navedeno da za bipartitne grafove vrijedi sljedeće:

**Korolar 1.2.3.** Bipartitni graf  $G$  s biparticijom  $(X, Y)$  ima savršeno sparivanje ako i samo ako je  $|X| = |Y|$  i  $|N(S)| \geq |S|$ ,  $\forall S \subseteq X$ . Posebno,  $k$ -regularni bipartitni graf ima savršeno sparivanje za  $k > 0$ .

$N(S)$  se označava skup susjeda, tj. skup svih vrhova susjednih nekom vrhu iz  $S \subseteq V(G)$ .

Sada ćemo definirati polinom sparivanja. Označimo s  $m(G, k)$  broj sparivanja u  $G$  s točno  $k$  bridova ( $m(G, 0) := 1$ ). Ako graf  $G$  ima  $n$  vrhova, onda se polinom sparivanja od  $G$  definira kao

$$M(G, x) := \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} m(G, k) x^{n-2k}.$$

Postoji problem s prebrojavanjem sparivanja u grafovima i egzaktni rezultati su nam vrlo rijetko na raspolaganju. Zbog toga ima smisla naći netrivialnu gornju i donju granicu za broj sparivanja u grafu.

Označimo s  $\Phi$  broj različitih savršenih sparivanja od grafa  $G$ .

Graf  $G$  čiji se svaki brid  $e$  pojavljuje u nekom savršenom sparivanju od  $G$  se zove *1-proširiv graf*. Svako sparivanje veličine 1 može biti prošireno do savršenog sparivanja. Ako svako sparivanje veličine 2 u  $G$  može biti prošireno do savršenog sparivanja od  $G$ , kažemo da je  $G$  *2-proširiv graf*.

Skup vrhova  $S$  u povezanom grafu  $G$  je *rezni skup* ako  $G - S$  nije povezan. Ako  $G$  nije potpun graf, kardinalni broj reznog skupa točaka u grafu  $G$  se zove povezanost od  $G$  i označuje se s  $\kappa(G)$ . Graf se zove *k-povezan* ako  $k \leq \kappa(G)$ , tj. ako se svaka dva vrha mogu povezati s barem  $k$  unutarnje disjunktnih putova.

Graf  $G$  je *bikritičan* ako  $G - u - v$  ima savršeno sparivanje za svaki par različitih  $u, v \in V$ . 3-povezan bikritičan graf se naziva *opeka* (engl. *brick*). Takvi grafovi služe kao osnovni građevni blokovi u određenim konstrukcijskim procedurama strukturalne teorije sparivanja.

Podgraf  $H$  grafa  $G$  je *zgodan* (engl. *nice*) ako  $G - V(H)$  ima savršeno sparivanje. Drugim riječima, podgraf je zgodan ako njegovo uklanjanje iz grafa ostavlja graf sa savršenim sparivanjem. Očito je da svaki zgodan podgraf grafa sa savršenim sparivanjem mora imati paran broj vrhova.

**Teorem 1.2.4.** *Neka je  $G$   $k$ -povezan ne-bikritičan graf koji sadrži savršeno sparivanje. Tada  $G$  sadrži najmanje  $k!$  savršenih sparivanja.*

Prethodno navedeni zaključci se mogu pronaći u [4], a teorem u [6] kao Teorem 8.6.2. U knjizi [6] autori dolaze do još nekih nama važnih zaključaka o broju savršenih sparivanja u posebnim klasama grafova. U nastavku navodimo te zaključke.

**Teorem 1.2.5.** *Pretpostavimo da je  $G$   $k$ -regularan bipartitni graf s  $2n$  vrhova. Tada*

$$\Phi(G) \geq n!(k/n)^n.$$

**Teorem 1.2.6.** *Neka je  $G$   $k$ -regularan jednostavan bipartitan graf s  $2n$  vrhova. Tada vrijedi*

$$\Phi(G) \leq (k!)^{(n/k)}.$$

**Teorem 1.2.7.** *Neka je  $G$  kubični bipartitni graf s  $2n$  vrhova. Tada*

$$\Phi(G) \geq (4/3)^n.$$

Ako je  $G$  2-povezan graf i sadrži savršeno sparivanje, tada ima i najmanje 2 savršena sparivanja. Za svaki  $n$ -povezan graf koji sadrži savršeno sparivanje vrijedi

$$\Phi(G) \geq n.$$

**Teorem 1.2.8.** *Neka je  $G$   $k$ -povezan graf koji sadrži savršeno sparivanje. Tada je broj savršenih sparivanja u  $G$  najmanje*

$$k!! = \prod_{i=0}^{\lfloor \frac{k-2}{2} \rfloor} (k - 2i).$$

Teoremi 1.2.5.-1.2.7. su iskazani i dokazani u knjizi [6] te se tamo mogu pronaći kao Teoremi 8.1.3., 8.1.4., 8.7. na stranicama 303-314. Teorem 1.2.8. se nalazi u istoj knjizi kao Teorem 8.6.1. na stranici 347.

### 1.3 Važnost i zalihost bridova

Sada uzmimo u razmatranje samo graf  $G$  sa savršenim sparivanjem i brid  $e$  od  $G$  s krajnjim vrhovima  $u$  i  $v$ . Ako želimo pobrojati savršena sparivanja u  $G$ , a ako se  $e$  ne pojavljuje niti u jednom od njih, s pravom zaključujemo da brid  $e$  nije važan. Motivirani tim opažanjem definiramo pojmove važnosti i zalihosti.

**Definicija 1.3.1.** *Važnost  $\iota(e)$  brida  $e$  u  $G$  je broj savršenih sparivanja od  $G$  koji sadrže  $e$ . Slično, za brid  $e$  od  $G$  definiramo zalihost  $\rho(e)$  kao broj savršenih sparivanja od  $G$  koji ne sadrže  $e$ .*

Formalno prethodnu definiciju zapisujemo na sljedeći način:

$$\begin{aligned}\iota(e) &= \Phi(G - u - v), \\ \rho(e) &= \Phi(G - e).\end{aligned}$$

Nebitni bridovi se obično nazivaju zabranjeni bridovi, a bridovi s  $\iota(e) \neq \emptyset$  se nazivaju dopušteni bridovi. Prema tome, pojam važnosti je kvantitativna dorada koncepta dopustivosti iz strukturne teorije sparivanja.

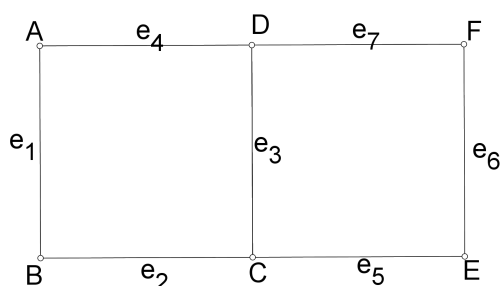
Točne numeričke vrijednosti veličina  $\iota(e)$ ,  $\rho(e)$  i  $\Phi(G)$  se teško određuju pa ćemo u nastavku često koristiti donje ograde za te veličine.

Vrijede i sljedeće dvije relacije:

$$\iota(e) + \rho(e) = \Phi(G), \forall e \in E(G) \quad (1.3)$$

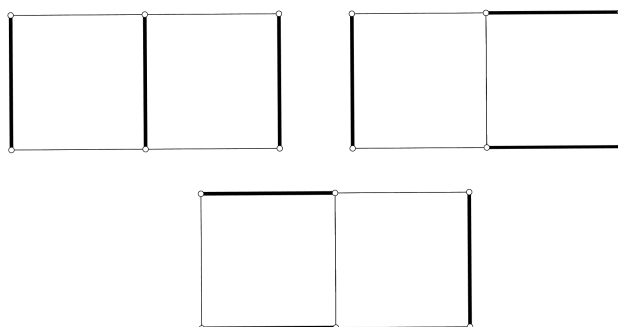
$$\sum_{u \in V, e=uv} \iota(e) = \Phi(G), \forall v \in V(G) \quad (1.4)$$

Pokažimo da one vrijede na jednom jednostavnom primjeru. Uzmimo graf kao na slici 1.8.



Slika 1.8: Graf koji promatramo

Lako se vidi da on ima 3 savršena sparivanja, a ta savršena sparivanja vidmo na slici 1.9. Izračunajmo sad važnost i zalihost brida  $e_1$ . On ima važnost 2, a zalihost 1. Kad zbrojimo te dvije vrijednosti dobijemo 3, a to je broj savršenih sparivanja. Isti zaključak dobijemo uzmemo li bilo koji  $e_i$ ,  $\forall i \in 1, 2, \dots, 7$ .



Slika 1.9: Savršena sparivanja u grafu koji promatramo

Uzmimo vrh  $A$  te pogledajmo s kojim je on vrhovima susjedan. Susjedan je s vrhovima  $B$  i  $D$ , tj.  $e_1=AB$  i  $e_4=AD$ . Izračunajmo važnost bridova  $e_1$  i  $e_4$ . Vidimo sa slike brid  $e_1$  sudjeluje u dva, a  $e_4$  u jednom savršenom sparivanju. Dakle, vrijedi sljedeće

$$\iota(e_1) + \iota(e_4) = \Phi(G), \text{ tj. } 2 + 1 = 3$$

Lako se vidi da i za sve ostale kombinacije vrhova s grafa na slici 1.8 vrijedi relacija (1.4).

## Poglavlje 2

# Važnost i zalihost bridova u nekim klasama grafova

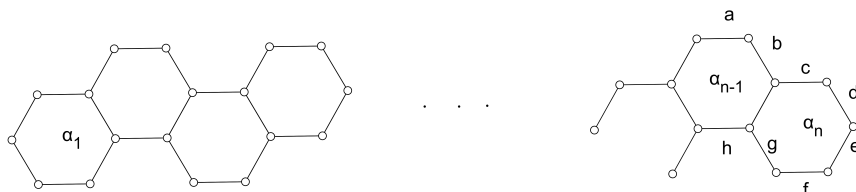
U ovom poglavlju ćemo izračunati broj savršenih sparivanja te važnost i zalihost bridova u nekim posebnim klasama grafova. Uvedimo na početku oznake tih grafova. Oznake su sljedeće:

- $Z_n$  - graf koji se sastoji od  $n$  šesterokuta pozicioniranih u cik-cak poziciji
- $L_n$  - graf koji se sastoji od  $n$  četverokuta pozicioniranih jedan do drugog
- $\Pi_n$  - piramida čija je baza mnogokut s  $n$  stranica
- $R_n$  - uspravna prizma čija je baza pravilni mnogokut s  $n$  stranica
- $A_n$  - graf koji se sastoji od  $n$  pravilnih šesterokuta pozicioniranih jedan do drugog
- $B_n$  - bipiramida čija je baza pravilni mnogokut s  $n$  stranica (poliedar koji nastaje tako da se poveže  $n$ -kutna piramida i njezina zrcalna slika tako da prijanja na baznu površinu)
- $Q_n$  - graf koji je  $n$ -dimenzionalna hiperkocka

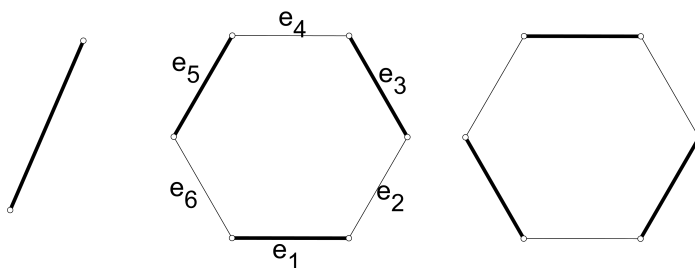
### 2.1 Graf $Z_n$

Kao što smo već napisali, graf  $Z_n$  je graf koji se sastoji od  $n$  šesterokuta pozicioniranih u cik-cak poziciji. Izgled tog grafa možemo vidjeti na slici 2.1. Broj vrhova u tom grafu iznosi  $v(Z_n) = 4n + 2$ , a bridova  $e(Z_n) = 5n + 1$ . Za kemičare je ovo molekularni graf benzenoidnih policikličkih ugljikovodika  $C_{4n+2}H_{2n+4}$ .





Slika 2.1: Graf  $Z_n$



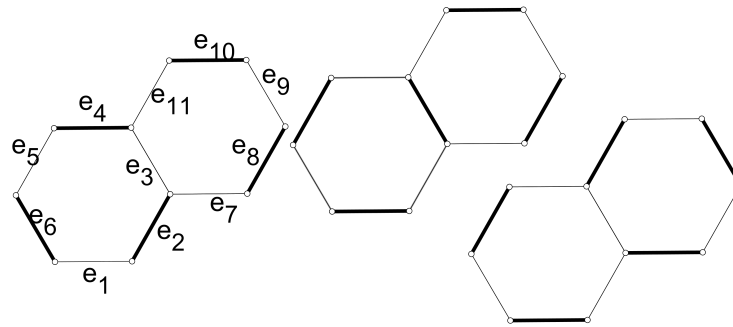
Slika 2.2: Savršena sparivanja u grafovima  $Z_0$  i  $Z_1$

Prvo ćemo izračunati broj savršenih sparivanja u grafu  $Z_n$ .

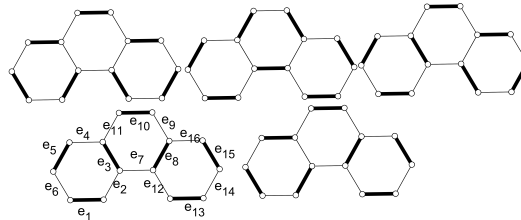
Uzmimo prvo  $n = 0$ . To je samo jedan brid s dva vrha i  $\Phi(Z_0) = 1$ . Uzmimo zatim  $n = 1$ . Sada imamo jedan šesterokut, a broj savršenih sparivanja u njemu iznosi  $\Phi(Z_1) = 2$ . Kad uzmemo  $n = 2$ , lako vidimo da je  $\Phi(Z_2) = 3$ . Za  $n = 3$  vrijedi da je broj savršenih sparivanja  $\Phi(Z_3) = 5$ . Dobiveni rezultati nas navode na to bi da broj savršenih sparivanja u grafu  $Z_n$  mogao biti Fibonaccijev broj  $F_{n+2}$ . To ćemo zato i dokazati.

**Propozicija 2.1.1.** *Neka je  $Z_n$  graf koji se sastoji od  $n$  šesterokuta  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  pozicioniranih u cik-cak poziciji kao na slici 2.1. Tada vrijedi*

$$\Phi(Z_n) = F_{n+2}, \quad (2.1)$$



Slika 2.3: Savršena sparivanja u grafu  $Z_2$



Slika 2.4: Savršena sparivanja u grafu  $Z_3$

gdje je  $F_{n+2}$  Fibonaccijev broj.

*Dokaz.* Označimo u zadnja dva šesterokuta bridove s  $a, b, \dots, h$  kao na slici 2.1. Skup svih savršenih sparivanja  $M$  od  $Z_n$  se može particionirati kao  $M = M_c \cup M_d$ , gdje su  $M_c, M_d \subseteq M$  skupovi savršenih sparivanja od  $Z_n$  koje sadrži brid  $c$ , odnosno  $d$ .

Savršeno sparivanje od  $Z_n$  koje sadrži brid  $c$  mora sadržavati i bridove  $a, e$  i  $g$  pa je  $\Phi(M_c) = \Phi(Z_{n-2})$ , tj. to je broj savršenih sparivanja od grafa  $Z_n - \alpha_{n-1} - \alpha_n$ . Uzmimo sad savršeno sparivanje koje sadrži brid  $d$  i vidimo da onda to savršeno sparivanje mora sadržavati i brid  $f$ . Zaključujemo da je onda  $\Phi(M_d) = \Phi(Z_{n-1})$ , tj. da je to broj savršenih sparivanja od grafa  $Z_n - \alpha_n$ .

Iz prethodnog slijedi da je

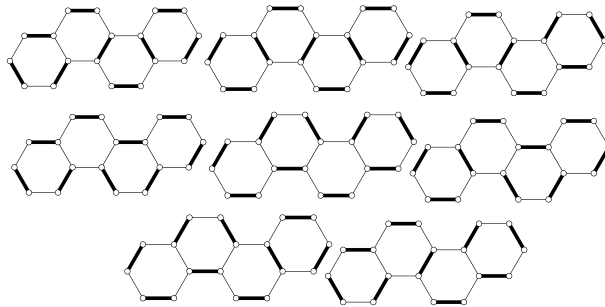
$$\Phi(Z_n) = \Phi(Z_{n-2}) + \Phi(Z_{n-1})$$

Već smo prije vidjeli da vrijedi  $\Phi(Z_0) = 1, \Phi(Z_1) = 2, \Phi(Z_2) = 3$  pa slijedi da vrijedi  $\Phi(Z_n) = F_{n+2}$ .  $\square$

Kad imamo određen broj savršenih sparivanja, idemo izračunati važnost i zalihost bridova u grafu  $Z_n$ . Iz slike 2.2 vidimo da su u grafu  $Z_1$  važnost i zalihost svakog brida jednaki 1,  $\iota(e_i) = 1, \rho(e_i) = 1, \forall i = 1, 2, \dots, 6$ . Na slici 2.3 vidimo da je u grafu  $Z_2$  za bridove  $e_1, e_5, e_8$  i  $e_{10}$  važnost jednaka 2, a zalihost 1. Za ostale bridove je obrnuto.

U grafu  $Z_3$  vrijede sljedeći rezultati za važnost i zalihost bridova:

$$\begin{aligned} \iota(e_i) &= 1, \rho(e_i) = 4, i = 7, 9, 11 \\ \iota(e_i) &= 2, \rho(e_i) = 3, i = 2, 3, 4, 6, 8, 12, 14, 16 \\ \iota(e_i) &= 3, \rho(e_i) = 2, i = 1, 5, 13, 15 \\ \iota(e_i) &= 4, \rho(e_i) = 1, i = 10 \end{aligned}$$

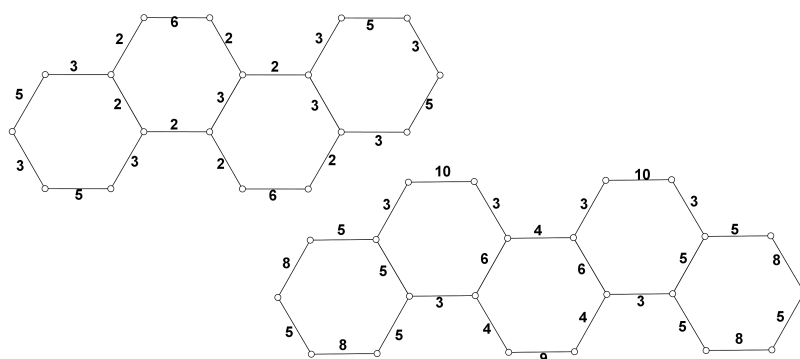
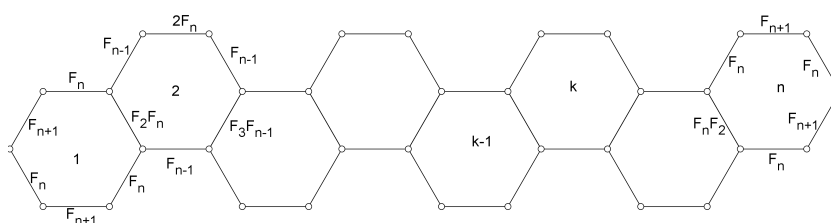


Slika 2.5: Savršena sparivanja u grafu  $Z_4$

Iz prethodnih rezultata i slike 2.6 zaključujemo da je važnost brida koji spaja dva šesterokuta (npr.  $e_3, e_8$  u  $Z_3$ ) jednaka umnošku dvaju Fibonaccijevih brojeva, npr. za  $Z_3$  je  $\iota(e_3) = F_2 F_3 = 1 * 2 = 2$ . Općenito za te bridove vrijedi  $\iota(e) = F_{k+1} F_{n-k+1}$ , gdje za  $k$  uzimamo redni broj šesterokuta. Na slici 2.7 pokazujemo što vrijedi za važnost ostalih bridova u grafu.

## 2.2 Graf $L_n$

Graf  $L_n$  smo definirali kao graf koji se sastoji od  $n$  četverokuta pozicioniranih jedan do drugog, tj. to je graf na slici 2.8. U takvom grafu broj vrhova iznosi  $v(L_n) = 2n + 2$ , a broj bridova  $e(L_n) = 3n + 1$ .

Slika 2.6: Vrijednost važnosti bridova u grafovima  $Z_4$  i  $Z_5$ Slika 2.7: Vrijednost važnosti bridova u grafu  $Z_n$ 

Kao i za prethodni graf, hoćemo prvo izračunati broj savršenih sparivanja. Pogledajmo prvo što vrijedi za  $n = 0, 1, 2, 3, 4$  pa ćemo iz tih rezultata doći do određenih zaključaka.

Opet za  $n = 0$  imamo jedan brid s dva vrha pa vrijedi  $\Phi(L_0) = 1$ . Za  $n = 1$  imamo jedan četverokut, a broj savršenih sparivanja u takvog grafu je  $\Phi(L_1) = 2$ . U grafu  $L_2$  imamo spojena dva četverokuta i u njemu vrijedi  $\Phi(L_2) = 3$ . Na slikama vidimo da za  $L_3$  i  $L_4$  vrijedi  $\Phi(L_3) = 5$ ,  $\Phi(L_4) = 8$ .

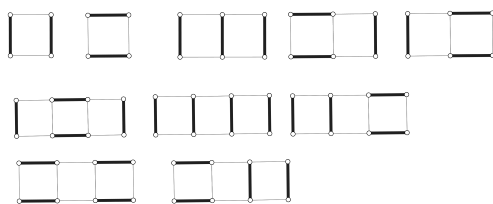
Primijetimo da za smo dobili iste vrijednosti za broj savršenih sparivanja kao kod grafova  $Z_i$ ,  $i = 0, 1, 2, 3, 4$ . To nas opet navodi da bi broj savršenih sparivanja mogao iznositi  $F_{n+2}$ .

Vratimo se na kratko graf  $Z_n$ . Vidimo da sažimanjem bridova koji su prekriveni na slici 2.11 dobijemo graf  $L_n$ .

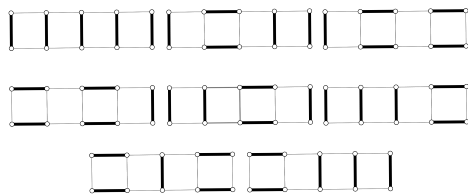
Pokažimo da je broj savršenih sparivanja u grafu  $L_n$  jednak  $F_{n+2}$ .



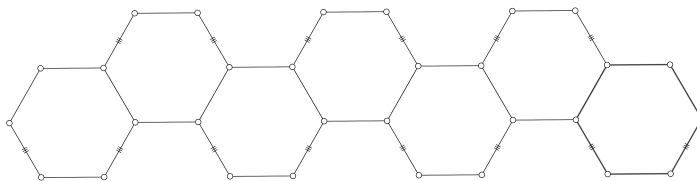
Slika 2.8: Graf  $L_n$



Slika 2.9: Savršena sparivanja u grafovima  $L_1, L_2, L_3$



Slika 2.10: Savršena sparivanja u grafu  $L_4$

Slika 2.11: Graf  $Z_n$ 

**Propozicija 2.2.1.** *Neka je  $L_n$  graf koji se sastoji od  $n$  četverokuta  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  pozicioniranih jedan do drugog po liniji kao na slici 2.8. Tada vrijedi*

$$\Phi(L_n) = F_{n+2}. \quad (2.2)$$

*Dokaz.* Označimo zadnja dva četverokuta s  $\beta_{n-1}$  i  $\beta_n$ , a bridove  $a, b, \dots, f$  kao na slici 2.8.

Skup svih savršenih sparivanja  $M$  od grafa  $L_n$  se može particionirati kao  $M = M_c \cup M_b$ , gdje su  $M_c, M_b \subseteq M$  skupovi savršenih sparivanja od  $L_n$  koji sadrži brid  $c$ , odnosno  $b$ . Savršeno sparivanje od  $L_n$  koje sadrži brid  $b$  mora sadržavati i brid  $d$ . Očito je da vrijedi  $\Phi(M_b) = \Phi(L_{n-2})$ , tj. to je broj savršenih sparivanja od  $L_n - \beta_{n-1} - \beta_n$ . Savršeno sparivanje od  $L_n$  koje sadrži brid  $c$ , mora sadržavati ili brid  $e$  ili bridove  $a$  i  $f$ . Tada vrijedi  $\Phi(M_c) = \Phi(L_{n-1})$ , a to je broj savršenih sparivanja od  $L_n - \beta_{n-1}$ . Iz prethodnog slijedi da je

$$\Phi(L_n) = \Phi(L_{n-2}) + \Phi(L_{n-1}).$$

Iz slike 2.9 se vidi da je  $\Phi(L_0) = 1, \Phi(L_1) = 2, \Phi(L_2) = 3, \Phi(L_3) = 5$ . Slijedi da vrijedi  $\Phi(L_n) = F_{n+2}$ .  $\square$

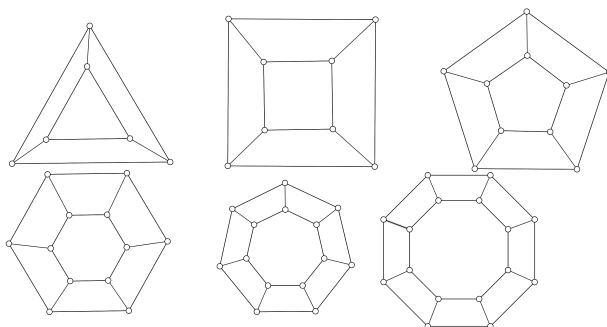
Sljedeće što ćemo napraviti je vidjeti kako se ponašaju vrijednosti važnosti i zalihosti u grafu  $L_n$ .

Pošto smo za ukupan broj savršenih sparivanja dobili da vrijedi ista jednakost, zaključujemo da bi i za vrijednosti važnosti trebao vrijediti isti rezultat kao i kod grafa  $Z_n$ . Važnost bridova koji spajaju dva četverokuta je umnožak dva Fibonaccijeva broja, tj.  $\iota(e) = F_{k+1}F_{n-k+1}$ . Prvi i zadnji brid imaju važnost jednaku  $\iota(e) = F_{n+1}$ . Važnost vodoravnih bridova u prvom i zadnjem četverokutu je jednaka i iznosi  $\iota(e) = F_n$ , a u ostalim bridovima za računanje važnosti vrijedi  $\iota(e) = F_kF_{n-k+1}$ .

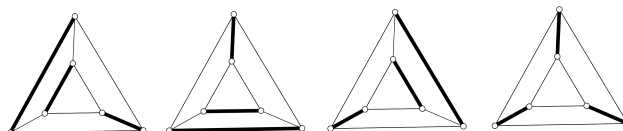
### 2.3 Graf $R_n$

Graf koji smo označili s  $R_n$  je uspravna prizma čija je baza pravilni mnogokut s  $n$  stranica. Graf  $R_n$  ima  $2n$  vrhova i  $3n$  bridova.  $R_n$  je 3-regularan i vršno-tranzitivan graf.

Grafove  $R_n$  prikazujemo kao na slici 2.12.

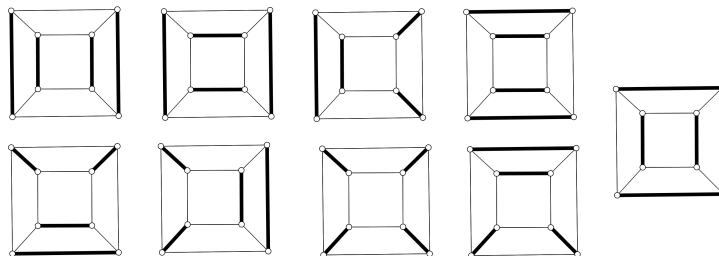


Slika 2.12: Grafovi  $R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8$

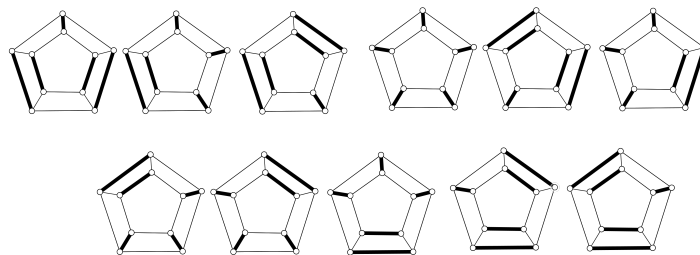


Slika 2.13: Savršena sparivanja u grafu  $R_3$

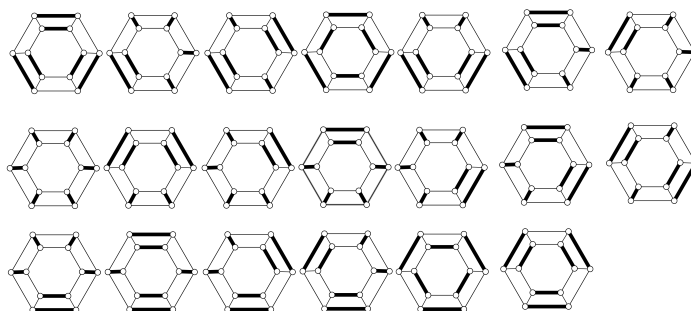
Za početak pogledajmo savršena sparivanja u grafovima  $R_3, R_4, R_5$  i  $R_6$ . Na slici 2.13 u prikazana savršena sparivanja u grafu  $R_3$  je vidljivo da vrijedi  $\Phi(R_3) = 4$ . Savršena sparivanja grafa  $R_4$  su vi vidljiva na slici 2.14. Uočavamo da vrijedi  $\Phi(R_4) = 9$ . Slika 2.15 pokazuje savršena sparivanja u grafu  $R_5$ . Iz te slike vidimo da vrijedi  $\Phi(R_5) = 11$ . Za graf  $R_6$  vrijedi  $\Phi(R_6) = 20$  što je i vidljivo iz slike 2.16.



Slika 2.14: Savršena sparivanja u grafu  $R_4$



Slika 2.15: Savršena sparivanja u grafu  $R_5$



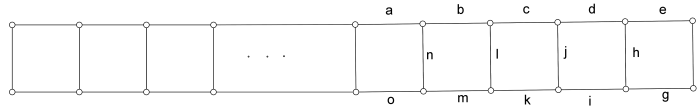
Slika 2.16: Savršena sparivanja u grafu  $R_6$



**Propozicija 2.3.1.** Neka je  $R_n$  graf koji je uspravna prizma čija je baza pravilni mnogokut s  $n$  stranica. Tada vrijedi:

$$\Phi(R_n) = \begin{cases} F_{n-1} + F_{n+1} & \text{za } n = 2k + 1 \\ F_{n-1} + F_{n+1} + 2 & \text{za } n = 2k \end{cases} \quad (2.3)$$

*Dokaz.* Prikažimo graf  $R_n$  kao na slici 2.17. Uočimo da su prvi i zadnji brid jedan te isti brid jer je potrebno zamotati niz četverokuta da bi se dobila prizma.. Označimo bridove u grafu s  $a, b, c, \dots, o$  kao na slici 2.17.



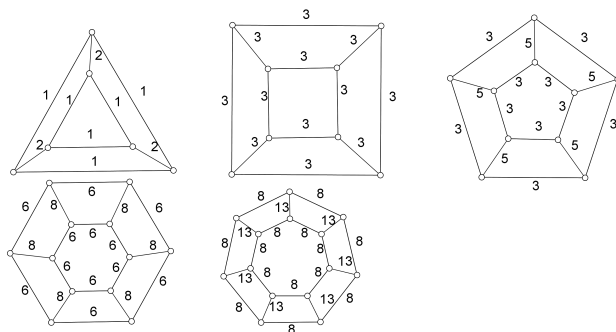
Slika 2.17: Graf  $R_n$

Uzmimo da je  $n = 2k + 1$ . Skup svih savršenih sparivanja  $M$  od  $R_n$  se može particionirati kao  $M = M_c \cup M_d \cup M_j$ , gdje su  $M_c, M_d, M_j \subseteq M$  skupovi savršenih sparivanja od  $R_n$  koji sadrže brid  $c, d$  odnosno  $j$ . Savršeno sparivanje od  $R_n$  koje sadrži brid  $c$  mora sadržavati brid  $k$ . Uklonimo li ta dva brida iz grafa, graf nam se raspadne i dobijemo graf koji je jednak grafu  $L_{n-3}$ , a za taj graf vrijedi  $\Phi(L_{n-3}) = F_{n-1}$ . Savršeno sparivanje koje sadrži brid  $d$  mora sadržavati brid  $i$ . Uklanjanjem ta dva brida iz grafa graf se opet raspadne na graf jednak grafu  $L_{n-3}$ . Uzmimo sad da savršeno sparivanje sadržava brid  $j$ . Uklonimo taj brid iz grafa i graf se raspadne na graf koji je jednak grafu  $L_{n-2}$ . Za graf  $L_{n-2}$  vrijedi  $\Phi(L_{n-2}) = F_n$ . Slijedi da vrijedi  $\Phi(R_n) = 2F_{n-1} + F_n = F_{n-1} + F_{n-1} + F_n = F_{n-1} + F_{n+1}$ .

Neka je  $n = 2k$ . U ovom slučaju skup  $M$  savršenih sparivanja od grafa  $R_n$  možemo particionirati isto kao i  $R_n$  za  $n = 2k + 1$  samo što za skup  $M_c$  i skup  $M_d$  vrijedi nešto drugačija jednakost. Savršeno sparivanje koje sadrži brid  $c$  može uz brid  $k$  sadržavati i brid  $i$ , a ono koje sadrži brid  $d$  može uz brid  $i$  sadržavati i brid  $g$ . Zbog toga trebamo dodati 2 dodana savršena sparivanja izrazu  $2F_{n-1} + F_n$  te dobijemo sljedeće  $\Phi(R_n) = 2F_{n-1} + F_n + 2 = F_{n-1} + F_{n+1} + 2$ .  $\square$

Na slici 2.18 su prikazane vrijednosti zalihosti svih bridova u grafovima  $R_3, R_4, R_5, R_6$  i  $R_7$ . Primjećujemo da za sve grafove osim  $R_4$  vrijedi da su vrijednosti važnosti bridova

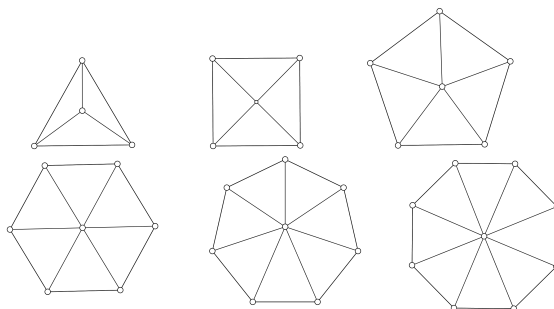
koji su stranice mnogokuta jednake i da su manje od vrijednosti važnosti ostalih bridova u grafu. To su vertikalne stranice prizme pa ćemo ih označiti s  $v$  i važnost tih bridova iznosi  $\iota(v) = F_n$ . Vrijednosti važnosti bridova u bazi također imaju jednake vrijednosti, a za njih vrijedi  $\iota(e) = \Phi(R_n) - \iota(v)$ . Za graf  $R_4$  primjećujemo da je svaki brid iste važnosti i ta važnost iznosi  $\iota(e) = 3, \forall e \in E(R_4)$ .



Slika 2.18: Vrijednosti važnosti bridova u grafovima  $R_3, R_4, R_5, R_6, R_7$

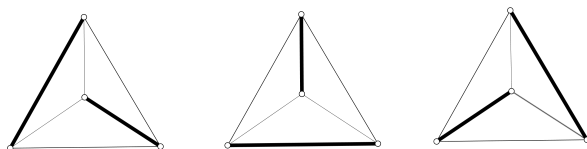
## 2.4 Graf $\Pi_n$

Sljedeći graf koji ćemo promatrati je  $\Pi_n$ , a to je graf u obliku uspravne piramide s čija je baza mnogokut s  $n$  stranica. Na slici 2.19 vidimo kako prikazujemo pojedine uspravne piramide kao grafove. Graf  $\Pi_n$  je 3-povezan graf.



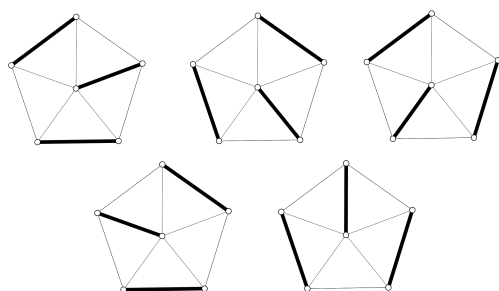
Slika 2.19: Grafovi  $\Pi_3, \Pi_4, \Pi_5, \Pi_6, \Pi_7, \Pi_8$

Izračunat ćemo prvo broj savršenih sparivanja u grafovima  $\Pi_n, \forall n = 1, 2, 3, 4, \dots$ . Pogledajmo prvo savršena sparivanja u grafu  $\Pi_3$ . Iz slike 2.20 je očito da vrijedi  $\Phi(\Pi_3) = 3$ .



Slika 2.20: Savršena sparivanja u grafu  $\Pi_3$

Savršena sparivanja u grafu  $\Pi_4$  ne postoje pa nam takav graf nije od interesa. Sljedeći je na redu graf  $\Pi_5$ . Na temelju slike 2.21 je vidljivo da vrijedi  $\Phi(\Pi_5) = 5$ .



Slika 2.21: Savršena sparivanja u grafu  $\Pi_5$

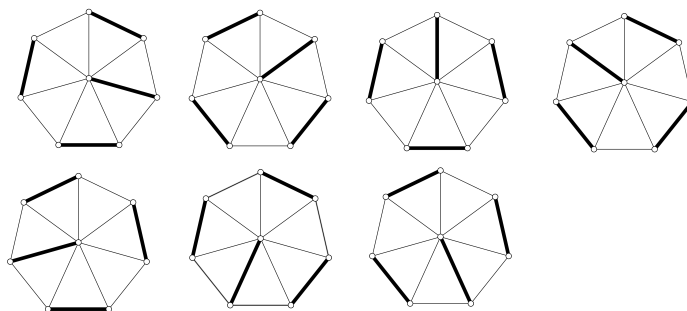
Također ne postoje savršena sparivanja u grafu  $\Pi_6$ , a očito je da ne postoje ni u grafu  $\Pi_8$ . Iz tog razloga takvu vrstu grafova nećemo promatrati.

Pogledajmo još graf  $\Pi_7$  i njegova savršena sparivanja. Iz slike 2.22 vidimo da vrijedi  $\Phi(\Pi_7) = 7$ .

Na temelju prethodnih rezultata zaključujemo da grafovi  $\Pi_n$  nemaju savršena sparivanja ako je  $n$  paran broj. O broju savršenih sparivanja u grafu  $\Pi_n$  bismo mogli reći da iznosi  $n$  pa ćemo to i dokazati.

**Propozicija 2.4.1.** *Neka je  $\Pi_n$  graf koji izgleda kao uspravna piramida čija je baza pravilan mnogokut s  $n$ ,  $n \geq 3$ , stranica i neka je  $n$  neparan broj. Tada vrijedi*

$$\Phi(\Pi_n) = n. \quad (2.4)$$

Slika 2.22: Savršena sparivanja u grafu  $\Pi_7$ 

*Dokaz.* Iz slike 2.19 je vidljivo kako u unutrašnjosti svakog grafa postoji jedan vrh. Svako savršeno sparivanje mora sadržavati brid koji spaja taj vrh iz unutrašnjosti i vrh koji je točka pravilnom mnogokuta. Očito je da savršeno sparivanje može sadržavati samo jedan takav brid. Ostale bridove u savršenom sparivanju biramo na jedinstven način. Iz toga zaključujemo kako broj savršenih sparivanja u grafu  $\Pi_n$  ovisi o broju vrhova pravilnog mnogokuta, tj. da vrijedi  $\Phi(\Pi_n) = n$ .  $\square$

Izračunali smo broj savršenih sparivanja u grafu  $\Pi_n$  pa možemo prijeći na računanje važnosti i zalihosti bridova u tom grafu.

Očito je da važnost svakog brida kojem je jedan od vrhova onaj vrh koji se nalazi u unutrašnjosti grafa jednaka 1. Kako u svakom grafu koji ima savršeno sparivanje vrijedi

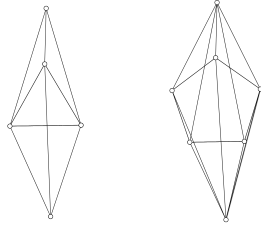
$$\sum_{u \in V, e=uv} \iota(e) = \Phi(G), \quad \forall v \in V(G)$$

zaključujemo da je ukupna važnost preostala dva brida koji imaju zajednički vrh s bridom koji spaja vrh u unutrašnjosti i vrh mnogokuta jednaka  $\Phi(\Pi_n) - 1$ , tj.  $n - 1$ . Kako takva brida dva i svaki ima jednaku važnost, onda je važnost pojedinog brida jednaka  $\frac{n-1}{2}$ .

## 2.5 Graf $B_n$

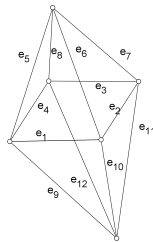
Graf  $B_n$  je graf u obliku uspravne pravilne bipiramide čija je baza mnogokut s  $n$  stranica. Takav graf ima  $3n$  bridova i  $n + 2$  vrhova.

Pošto se bipiramida sastoji od dvije jednake piramide s istom bazom, savršena sparivanja bi trebala ovisiti o  $n$  kao i kod piramide.



Slika 2.23: Grafovi  $B_3$  i  $B_5$

Iz slike 2.23 je vidljivo kako grafovi  $B_3$  i  $B_5$  nemaju savršena sparivanja. Naime, svako savršeno sparivanje u grafu  $B_n$  treba sadržavati brid koji spaja jedan vrh mnogokuta koji je baza i vrh piramide. Pošto imamo dvije piramide, vrhovi na mnogokutu kojima počinje brid koji se spaja s vrhovima piramide umoraju biti susjedni ili za  $2n + 1$  vrhova udaljeni jedan od drugog kako bi postojalo savršeno sparivanje. Zaključujemo kako savršena sparivanja ne postoje u grafu  $B_n$  ako je  $n$  neparan broj.



Slika 2.24: Graf  $B_4$

Pogledajmo sad grafove  $B_n$  gdje je  $n \geq 3$  paran broj. Pogledajmo na slici 2.24 graf  $B_4$ . Uzmimo prvo brid  $e_9$  u savršeno sparivanje. U gornjoj piramidi onda možemo uzeti brid  $e_6$  ili  $e_8$ . Vidimo da nedostaje još jedan brid da bi imali savršeno sparivanje, a to je brid  $e_3$  ili  $e_2$ . Iz toga dolazimo do zaključka da postoje dvije mogućnosti za svaki brid koji spaja vrh piramide i vrh četverokuta koji je baza. Dakle vrijedi sljedeće  $\Phi(B_4) = 8$ .

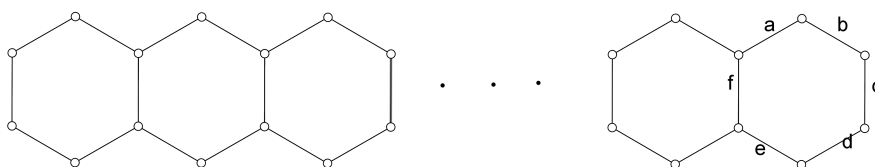
Pogledajmo još graf  $B_6$ . Kod njega postoje 3 mogućnosti za svaki brid koji spaja vrh piramide i šesterokuta. Postoje 3 mogućnosti jer se može uzeti brid čiji vrh je za  $2m + 1$  udaljen od vrh brida koji smo prvog uzeli u savršeno sparivanje. Za  $b_6$  onda vrijedi  $\Phi(B_6) = 3 * 6 = 18$ .

Zaključujemo da onda za  $B_n$  vrijedi  $\Phi(B_n) = \frac{n}{2} * n = \frac{n^2}{2}$ .

Iz činjenice da za svaki brid koji spaja vrh piramide i jedan vrh u mnogokutu imamo  $\frac{n}{2}$  mogućnosti slijedi da je važnost svakog takvog brida jednaka  $\frac{n}{2}$ . Svi bridovi koji su stranice mnogokuta koji je baza su jednako važni, tj. imaju jednaku vrijednost važnosti. Pošto smo već zaključili da je važnost svakog brida koji spaja vrh piramide i vrh mnogokuta jednaka  $\frac{n}{2}$ . Takvih bridova ima dva u svakom vrhu, a zbroj njihovih važnosti je  $n$ . Dakle, za ostala dva brida koja izlaze iz vrha mnogokuta ostaje zalihost u iznosu  $\frac{n^2}{2} - n = \frac{n^2 - 2n}{n}$ . Pošto su oba brida jednake važnosti taj izraz je još potrebno podijeliti s 2 pa dobijemo da vrijedi da je važnost jednaka  $\frac{n^2 - 2n}{4}$ . Iz činjenice da vrijedi  $\iota(e) + \rho(e) = \Phi(G), \forall e \in E(G)$  lako se izračuna vrijednost zalihosti za svaki brid.

## 2.6 Graf $A_n$

Graf koji smo označili kao  $A_n$  je graf koji se sastoji od  $n$  pravilnih šesterokuta pozicioniranih jedan do drugog po liniji, a na slici 2.25 možemo vidjeti kako taj graf izgleda.

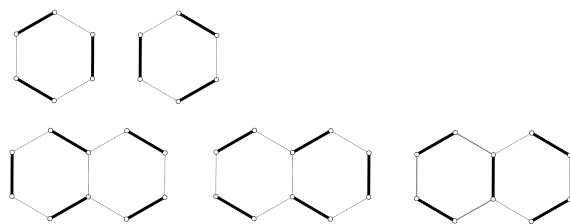


Slika 2.25: Graf  $A_n$

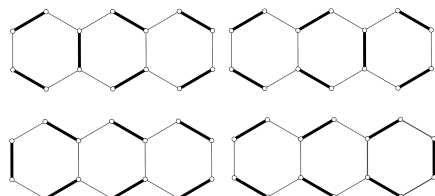
Pogledajmo prvo savršena sparivanja u grafovima  $A_1, A_2, A_3$  i  $A_4$  te pokušajmo nešto zaključiti o broju savršenih sparivanja.

Iz slike 2.26 vidimo da je broj savršenih sparivanja u grafu  $A_1$  jednak 2, a u grafu  $A_2$  3. Za graf  $A_3$  iz slike 2.27 vidimo da vrijedi  $\Phi(A_3) = 4$ . Slika 2.28 nam pokazuje da za graf  $A_4$  vrijedi  $\Phi(A_4) = 5$ .

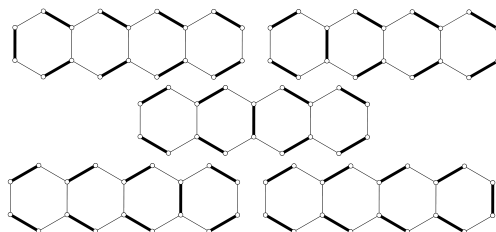
Vidimo da se broj savršenih sparivanja u prethodnim grafovima jednak  $n + 1$ . Taj rezultat ćemo i formalno dokazati.



Slika 2.26: Savršena sparivanja u grafovima  $A_1$  i  $A_2$



Slika 2.27: Savršena sparivanja u grafu  $A_3$



Slika 2.28: Savršena sparivanja u grafu  $A_4$

**Propozicija 2.6.1.** *Neka je  $A_n$  graf koji se sastoji od  $n$  pravilnih šesterokuta pozicioniranih jedan do drugog kao na slici 2.25. Tada vrijedi*

$$\Phi(A_n) = n + 1. \quad (2.5)$$

*Dokaz.* Označimo bridove zadnjeg šesterokuta s  $a, b, c, d, e$  i  $f$  kao na slici 2.25.

Uzmemo li da savršeno sparivanje sadrži brid  $c$ , onda mora sadržavati i bridove  $a$  i  $e$ , kao i sve ostale bridove koji se nalaze s lijeve strane, a nisu paralelni s bridom  $c$ .

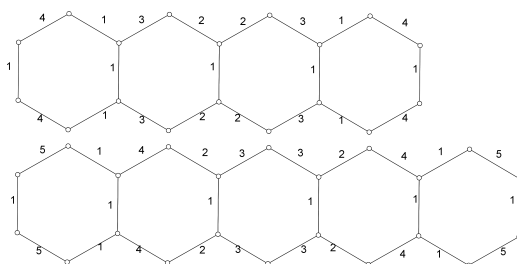
Ako savršeno sparivanje sadrži brid  $f$ , onda mora sadržavati i bridove  $b$  i  $d$  koji se nalaze desno od njega, a lijevo od njega opet sve bridove koji se nalaze s lijeve strane, a nisu paralelni s bridom  $f$ .

Vidimo da svako savršeno sparivanje sadrži samo jedan brid tipa  $c$  i  $f$ , a ostali bridovi koje sadrži su gornji i donji desni ako je ima još koji šesterokut desno od tog uspravnog brida te gornji i donji lijevi ako ima još koji šesterokut lijevo od uspravnog brida.

Kako uspravnih bridova u grafu  $A_n$  ima  $n + 1$ , onda i savršenih sparivanja ima  $n + 1$ .  $\square$

Izračunali smo broj savršenih sparivanja u grafu  $A_n$  pa sad možemo nešto napisati i o važnosti i zalihosti bridova u tim grafovima.

Očito je da je važnost svakog okomitog brida jednaka 1, a zalihost je onda  $n$ .



Slika 2.29: Vrijednosti važnosti svakog brida u grafovima  $A_4$  i  $A_5$

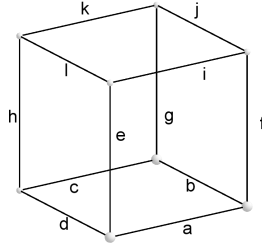
Na slici 2.29 su prikazane važnosti svakog brida u grafovima  $A_4$  i  $A_5$ . Iz slika se da zaključiti da važnost gornjih i donjih lijevih bridova pada kako idemo s lijeva na desno. Vrijednost važnosti prvog brida je  $n$  i onda svaka sljedeća pada za jedan sve dok ne dođe do 1. Važnost gornjih i donjih desnih bridova pak raste kako idemo s lijeva na desno. Prvi brid ima važnost vrijednosti 1, a svaki sljedeći ima za jedan veću važnost i vrijednosti se penju do  $n$ . Za zalihost bridova vrijedi obrnuto od onoga za vrijednosti važnosti bridova.

## 2.7 Graf $Q_n$

Graf  $Q_n$  je graf formiran iz vrhova i bridova  $n$ -dimenzionalne hiperkocke. Hiperkubične grafove  $Q_n$  ne smijemo nikako zamijeniti za kubične grafove. Jedini hiperkubični graf koji je i kubični je  $Q_3$ . Kubični graf  $Q_3$  je graf nastao od 8 vrhova i 12 bridova 3-dimenzionalne kocke.  $Q_n$  ima  $2^n$  vrhova i  $2^{n-1}n$  bridova i to je  $n$ -regularan graf.

Određivanje ukupnog broja savršenih sparivanja u grafu  $Q_n$  je otvoren problem u kombinatorici. Iz tog razloga ćemo dati samo donje i gornje ograde za broj savršenih sparivanja.





Slika 2.30: Graf  $Q_3$

Za graf  $Q_3$  ćemo odrediti točan broj savršenih sparivanja te točnu vrijednost važnosti i zalihosti bridova. Primijetimo da je graf  $Q_3$  jednak grafu  $R_3$ . Za taj graf ćemo dokazati da je broj sparivanja u njemu jednak 9.

**Propozicija 2.7.1.** *Neka je  $Q_3$  kubični graf kao na slici 2.30. Broj savršenih sparivanja u tom grafu je jednak*

$$\Phi(Q_3) = 9.$$

*Dokaz.* Označimo bridove u grafu  $Q_3$  s  $a, b, c, \dots, l$  kao na slici.

Skup svih savršenih sparivanja od  $Q_n$  se može particionirati kao  $M = M_a \cup M_b \cup M_f$ , gdje su  $M_a, M_b, M_f \subseteq M$  skupovi savršenih sparivanja od  $Q_3$  koji sadrže brid  $a, b$ , odnosno  $f$ .

Savršeno sparivanje od  $Q_3$  koje sadrži brid  $a$  mora sadržavati bridove  $c, i, k$  ili  $g, h, j$  ili  $c, j, l$  pa je  $|M_a| = 3$ . Savršeno sparivanje koje sadrži brid  $b$  mora sadržavati bridove  $e, h, j$  ili  $d, i, k$  ili  $d, j, l$  pa vrijedi isto i za  $|M_b|$ , tj.  $|M_b| = 3$ . Savršeno sparivanje od  $Q_3$  koje sadrži brid  $f$  mora sadržavati bridove  $d, g, l$  ili  $c, e, k$  ili  $e, g, h$  pa vrijedi  $|M_f| = 3$ . Slijedi da vrijedi  $\Phi(Q_3) = 3 + 3 + 3 = 9$ , a to smo trebali i dokazati.  $\square$

Primijetimo kako je važnost svakog brida u grafu  $Q_3$  jednaka i iznosi  $\iota(e) = 3, \forall e \in E(Q_3)$ . Također je i zalihost svakog brida u grafu jednaka te iznosi  $\rho(e) = 6, \forall e \in E(Q_3)$ .

Možemo primijetiti kako je graf  $Q_n$  bipartitan i  $n$ -regularan. Broj vrhova u grafu je paran broj pa zaključujemo da se za određivanje broja savršenih sparivanja u grafu  $Q_n$  mogu primijeniti Teoremi 1.2.5. i 1.2.6. Oni nam kažu da za  $k$ -regularni bipartitni graf s  $2m$  vrhova vrijedi

$$\Phi(G) \geq n!(k/m)^m, \Phi(G) \leq (k!)^{m/k}.$$

Kod grafa  $Q_n$  je  $k = n$ , a  $2m = 2^n$  pa iz toga slijedi da je  $m = 2^{n-1}$ . Dakle, vrijedi

$$\Phi(G) \geq (2^{n-1})!(n/2^{n-1})^{2^{n-1}}, \Phi(G) \leq (n!)^{2^{n-1}/n}.$$

Iako je određivanje ukupnog broja savršenih sparivanja u grafu  $Q_n$  otvoren problem, ipak je poznat broj savršenih sparivanja u grafovima  $Q_1, Q_2, \dots, Q_7$ . Broj savršenih sparivanja u tim grafovima i izračunate donje i gornje ograde po prethodnim formulama prikazujemo u tablici 2.1. Zaključujemo da su donje i gornje ograde dobre.

Tablica 2.1: Donje i gornje ograde za broj savršenih sparivanja u  $Q_n$

$n$	donja ograda	gornja ograda	$\Phi(Q_n)$
1	1	1	1
2	2	2	2
3	7.59375	10.9027	9
4	157.5	576	272
5	173069	$4.50174 \times 10^6$	589185
6	$1.43289 \times 10^{12}$	$1.73423 \times 10^{15}$	16332454526976
7	$3.92801 \times 10^{27}$	$7.0924 \times 10^{33}$	391689748492473664721077609089

Graf  $Q_n$  je i vršno tranzitivan graf, a u vršno tranzitivnim grafovima vrijedi

$$\Phi(G) = nu(e), \forall e \in E(G).$$

Dakle, vrijedi sljedeće

$$\iota(e) \geq (2^{n-1})!(n/2^{n-1})^{2^{n-2}}, \forall e \in E(G),$$

$$\iota(e) \leq \frac{(n!)^{2^{n-1}/n}}{n}, \forall e \in E(G).$$



## Poglavlje 3

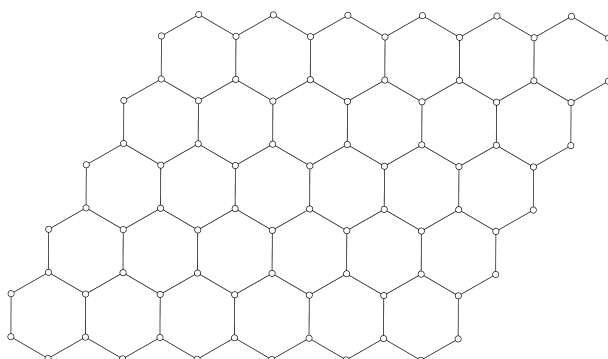
# Primjena važnosti i zalihosti

U ovom poglavlju ćemo napisati ponešto o primjeni pojma važnosti i zalihosti u kemiji, točnije u računanju sadržaja  $\pi$ -elektrona u prstenovima benzenodnih paralelograma. Elektroni u  $\pi$  vezama se nazivaju  $\pi$  elektroni.  $\pi$  veze su kovalentne veze u kojima se dva reznja jedne od uključenih atomskih orbitala preklapa sa dva reznja druge od uključenih atomskih orbitala. Za početak ćemo definirati graf  $B_{m,n}$  i odrediti broj savršenih sparivanja u njemu te vrijednosti važnosti i zalihosti bridova.

### 3.1 Benzenoidni paralelogram

Benzenoidni paralelogram se sastoji od  $m \times n$  kongruentnih pravilnih šesterokuta koji su poredani u  $m$  redaka, a svaki redak s  $n$  šesterokuta je pomaknut za pola šesterokuta udesno od retka točno ispod. Raspored je takav da dva šesterokuta ili dijele brid ili su potpuno disjunktni (razdvojeni). Benzenoidni paralelogram ćemo prikazati kao graf tako da vrhove šesterokuta uzmemo za vrhove grafa, a stranice šesterokuta za bridove grafa. Takav graf je planaran i bipartitan, a označavamo ga s  $B_{m,n}$ . Sastavljen je od  $mn$  šesterokutnih prstenova i ima  $2(mn + 3 + n)$  vrhova te  $3mn + 2m + 2n - 1$  bridova. Kad su  $m$  i  $n$  jednaki dobije se benzenoidni romb u oznaci  $B_m$ . Na slici 3.1 je prikazan graf  $B_{5,6}$ .

Neka je  $B_{m,n}$  dan kao na slici 3.1. Svakom njegovom šesterokutu ćemo dodijeliti dvije cjelobrojne oznake koje označuju njegov položaj u grafu. Prva oznaka označava redak, a druga stupac. Oznake se povećavaju od nižeg prema višem retku i slijeva na desno u stupcima. Označit ćemo i bridove. Uočavamo da su bridovi podijeljeni u tri klase -  $v$  (vertikalni),  $d$  (silazni) i  $a$  (uzlazni). Svakom vertikalnom bridu ćemo dodijeliti dvije oznake: prva označava redak, a druga broj šesterokuta u tom retku lijevo od promatranog brida. Određivanjem  $1 \leq i \leq m$  i  $0 \leq j \leq n$  položaj brida  $v_{i,j}$  je potpuno određen. Značenje oznaka  $i, j$  je slično i za ostala dva brida.  $d_{i,j}$  označava silazni brid u  $j$ -tom stupcu s  $i$  šesterokuta ispod njega, a  $a_{i,j}$  označava uzlazni brid tako da je  $i$  šesterokuta ispod njega i  $j$

Slika 3.1: Graf  $B_{5,6}$ 

lijevo od njega. Vrijednosti oznaka su  $0 \leq i \leq m$ ,  $1 \leq j \leq n$  za silazne bridove, a  $0 \leq i \leq m$ ,  $0 \leq j \leq m$  za uzlazne.

Neka je  $F$  strana planarnog grafa  $G$ . Skup svih bridova grafa  $G$  incidentnih s  $F$  se zove njegova *granica* i označava se s  $\partial F$ . Za svaku šesterokutnu stranu  $H_{i,j}$  od  $B_{m,n}$  njegova granica se može opisati na jedinstven način upotrebom gore opisane sheme označavanja,

$$\partial H_{i,j} = v_{i,j-1}, v_{i,j}, d_{i-1,j}, d_{i,j}, a_{i-1,j}, a_{i,j-1}.$$

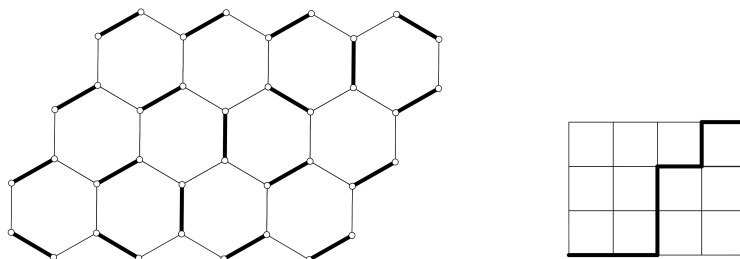
Prije nego odredimo važnosti bridova koje smo podijelili u tri klase, napisat ćemo nešto o povezanosti važnosti, zalihosti i Paulingovog reda veze. Paulingov red veze  $p(e)$  brida  $e$  se dobije dijeljenjem njegove važnosti ukupnim brojem savršenih sparivanja u  $G$ ,  $p(e) = \frac{t(e)}{\Phi(G)}$ .

Broj savršenih sparivanja u grafu  $B_{m,n}$  je dan s  $\Phi(B_{m,n}) = \binom{m+n}{m}$ . Navedena formula je direktna posljedica poveznice između savršenih sparivanja u  $B_{m,n}$  i usmjerenih putova u rešetki s koracima  $(1,0)$  i  $(0,1)$  od  $(0,0)$  do  $(n,m)$  u  $\mathbb{Z}_2$ . Put je usmjeren ako se udaljenost do ciljne točke nikad ne povećava. Primjer savršenog sparivanja u  $B_{m,n}$  i odgovarajućeg puta u rešetki je prikazan na slici 3.2.

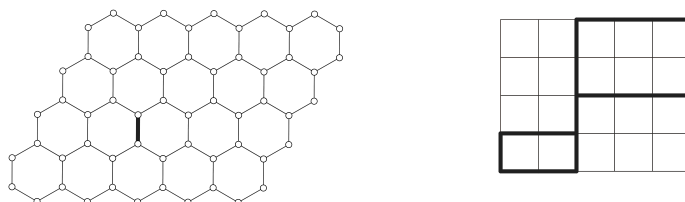
Pretpostavit ćemo da je  $m > 1$ . Važnosti bridova ovise o vrsti brida ( $v$ ,  $d$  ili  $a$ ) i poziciju u  $B_{m,n}$ . Slučaj okomitih bridova je najjednostavniji pa krećemo od njega.

**Lema 3.1.1.**  $t(v_{i,j}) = \binom{i+j-1}{i-1} \binom{m+n-(i+j)}{m-i}$

*Dokaz.* Okomiti bridovi u savršenom sparivanju odgovaraju okomitim koracima na rešetki. Broj savršenih sparivanja od  $B_{m,n}$  koja sadrže dani okomiti brid  $v_{i,j}$  je jednak broju putova u rešetki koje sadrže okomit brid koji odgovara  $v_{i,j}$ . To je pak jednako umnošku broja putova

Slika 3.2: Graf  $B_{3,4}$ 

u rešetki u dva manja pravokutnika. Ovisno o položaju  $v_{i,j}$  u  $B_{m,n}$ , jedan od pravokutnika može biti degeneriran. Tvrdnja slijedi iz poznatih formula za broj usmjerenih putova u rešetki u takvim pravokutnicima. Na slici 3.3 je prikazana važnost jednog okomitog brida po prethodno opisanom postupku.  $\square$



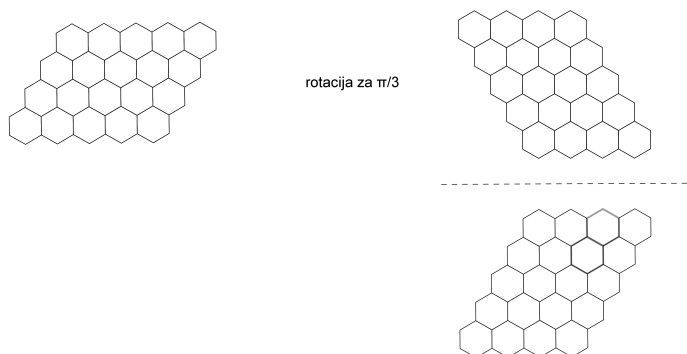
Slika 3.3: Važnost vertikalnog brida

Važnosti silaznih bridova su povezane s važnostima okomitih bridova pomoću transformacije  $B_{m,n}$  u  $B_{n,m}$ .

**Lema 3.1.2.**  $\iota(d_{i,j}) = \binom{i+j-1}{j-1} \binom{m+n-(i+j)}{n-j}$

*Dokaz.* Rotacijom  $B_{m,n}$  u smjeru kazaljke na satu za  $\frac{\pi}{3}$  i zrcaljenjem dobivenog rezultata preko vodoravne linije na način prikazan na slici 3.4, dobijemo benzenoidni paralelogram

$B_{n,m}$ . Silazni bridovi od  $B_{m,n}$  su označeni kao okomiti bridovi od  $B_{n,m}$  tako da  $d_{i,j}$  postaje  $v_{j,i}$ . Tvrdnja slijedi iz prethodne leme.  $\square$



Slika 3.4: Postupak dobivanja benzenoidnog paralelograma  $B_{5,4}$  iz  $B_{4,5}$

Iako se sličan trik ne može primijeniti za označavanje uzlaznih bridova od  $B_{m,n}$  kao okomitih bridova nekih drugih benzenoidnih paralelograma, njihove važnosti se još uvijek mogu izraziti preko važnosti okomitih bridova.

**Lema 3.1.3.**  $\iota(a_{i,j}) = \binom{m+n}{m} - \iota(v_{i,j}) - \iota(v_{j,i})$

*Dokaz.* Bridovi  $v_{i,j}$ ,  $d_{i,j}$  i  $a_{i,j}$  se sastaju u vrhu u gornjem desnom kutu od  $H_{i,j}$ . Kako se važnosti svih bridova incidentnih u bilo kojem vrhu moraju zbrojiti do ukupnog broja savršenih sparivanja u grafu, tvrdnja slijedi iz prethodne dvije leme.  $\square$

## 3.2 $\pi$ -elektroni

Benzenoidni grafovi su uvedeni kao matematički modeli za prikazivanje spojeva poznatih kao policiklički aromatski ugljikovodici ili benzenoidi. Ugljikovi atomi takvih spojeva predstavljaju vrhove, a kemijske veze među njima bridove grafa. Svaki ugljikov atom je susjedan ili s do 3 atoma ugljika ili dva atoma ugljika i jednim vodikom. To ostavlja po jedan  $\pi$ -elektron po svakom atomu ugljika za formiranje dvostruke veze ugljik - ugljik. Uzorak dvostrukih veza se zove Kekuléova struktura. Budući da u benzenoidima ugljikov atom može sudjelovati u najviše jednoj dvostrukoj vezi, Kekuléova struktura matematički predstavlja savršeno sparivanje.

Broj  $\pi$ -elektrona koji sudjeluje u Kekuléovoj strukturi je jednak broju atoma u spoju. Uzorak njihove raspodjele među vezama je određen Paulingovim redom veza. Dakle,

možemo gledati na tu vrijednost kao mjeru  $\pi$ -elektrona sadržanih u danoj vezi. Paulingov red veze nam također omogućuje mjerenje  $\pi$ -elektrona sadržanih u šesterokutnim prstenovima benzenoidnih spojeva.

Neka je  $G$  planarni graf sa savršenim sparivanjem i  $H$  jedna od njegovih strana. Označimo s  $U$  ne-graničnu stranu od  $G$ . Brid  $e \in \partial H$  može biti zajednički s  $U$  ili s drugom stranom od  $G$ . Neka je  $M$  savršeno sparivanje od  $G$ . Svaki brid od  $\partial H$  koji sudjeluje u  $M$  nosi dva elektrona. Ako  $e$  nije zajednički brid s drugom stranom od  $G$ , oba njegova elektrona su dodijeljena  $H$ . Ako je brid zajednički s dvije strane, svaki od njih dobije jedan od njegovih elektrona. Po toj shemi ukupan broj elektrona koje  $M$  daje  $H$  se dobije brojanjem bridova od  $\partial H$  u  $M$ . Ukupan sadržaj  $\pi$ -elektrona od  $H$ ,  $\pi(H)$  je dobiven zbrajanjem doprinosa po svim savršenim sparivanjima od  $G$ . Prosječan sadržaj  $\pi$ -elektrona u stranici  $H$ ,  $\bar{\pi}(H)$ , se onda dobije dijeljenjem njegovog ukupnog sadržaja  $\pi$ -elektrona brojem savršenih sparivanja u  $G$ , tj.  $\bar{\pi}(H) = \frac{\pi(H)}{\Phi(G)}$ .

Dvostrukim brojanjem rubova može se dobiti jednostavan izraz za ukupan sadržaj  $\pi$ -elektrona u stranici u terminima važnosti bridova iz  $\partial H$ .

**Teorem 3.2.1.**  $\pi(H) = \sum_{e \in \partial H} \iota(e) + \sum_{e \in \partial H \cup \partial U} \iota(e)$

Postoje i drugi načini definiranja sadržaja  $\pi$ -elektrona strane od  $G$ . Najjednostavnije je pretpostaviti da atom (npr. vrh) koji je zajednički s  $k$  prstenova daje  $1/k$  od svog  $\pi$  elektrona svakom prstenu. Ova formula je vrlo gruba. Npr. daje dva elektrona svim unutarnjim prstenovima. Budući da je to raspodjela temeljena na doprinosima atoma, označimo sadržaj  $\pi$ -elektrona prstena  $H$  na temelju toga s  $\pi_a(H)$ . Višak  $\pi$ -elektrona strane  $H$  od  $G$  definiramo kao razliku između  $\pi(H)$  i  $\pi_a(H)$ . Označimo to s  $\varepsilon_\pi(H)$ . Stoga je  $\varepsilon_\pi(H) = \pi(H) - \pi_a(H)$ . Za izračunavanje  $\pi(H)$  i  $\varepsilon_\pi(H)$  je potrebno znati vrijednosti važnosti bridova. Njih smo izračunali u prethodnom dijelu.

Sad možemo odrediti ukupan sadržaj  $\pi$ -elektrona unutarnjeg šesterokuta od  $B_{m,n}$ .

**Lema 3.2.2.** Neka je  $H_{i,j}$  unutarnji šesterokut od  $B_{m,n}$ . Tada je

$$\pi(H) = 2 \binom{m+n}{m} + \iota(v_{i,j}) - \iota(v_{i-1,j}) + \iota(v_{i,j-1}) - \iota(v_{i+1,j-1})$$

Dijeljenjem gornjeg izraza s  $\binom{m+n}{m}$  dobijemo eksplicitnu formulu za prosječnu vrijednost sadržaja  $\pi$ -elektrona unutarnjeg šesterokuta.

**Teorem 3.2.3.** Neka je  $H_{i,j}$  unutarnji šesterokut od  $B_{m,n}$ . Tada

$$\bar{\pi}(H) = 2[\iota(v_{i,j}) - \iota(v_{i-1,j}) + \iota(v_{i,j-1}) - \iota(v_{i+1,j-1})] / \binom{m+n}{m}.$$



Odmah dobijemo sljedeći izraz za izračun viška  $\pi$ -elektrona unutarnjeg šesterokuta.

**Korolar 3.2.4.** *Neka je  $H_{i,j}$  unutarnji šesterokut od  $B_{m,n}$ . Tada je*

$$\varepsilon_{\pi}(H) = \iota(v_{i,j}) - \iota(v_{i-1,j}) + \iota(v_{i,j-1}) - \iota(v_{i+1,j-1}).$$

Pogledajmo sad granične šesterokute. Dovoljno je razmatrati  $H_{1,1}, H_{1,n}$  i  $H_{1,j}$ ,  $j = 2, \dots, n-1$ .

**Lema 3.2.5.**  $\bar{\pi}(H_{1,1}) = 4 + 2\frac{mn}{(m+n)(m+n-1)}$

$$\bar{\pi}(H_{1,n}) = 3 + (m+n-mn+2) / \binom{m+n}{m}$$

Primijetimo da je nekonstantni dio desne strane formule za  $\bar{\pi}(H_{1,n})$  negativan za  $m+n > 5$ .

**Lema 3.2.6.** *Neka je  $2 \leq j \leq n-1$ . Tada je*

$$\bar{\pi}(H_{1,j}) = 3 + \frac{m+2n+1}{m-1} \binom{m+n-j-1}{m-2} / \binom{m+n}{m}.$$

Nekonstantni dio desne strane je jednak  $\varepsilon_{\pi}(H_{1,j})$ . Označimo njen brojnik s  $p(j)$  pa je onda  $p(j) = \frac{m+2n+1}{m-1} \binom{m+n-j-1}{m-2}$ . To je polinom u  $j$  stupnja  $m-1$ . On ima točno  $m-1$  realnih nultočaka; najmanja je  $\frac{m+2n-1}{m-1}$ , sljedeća  $n+2$ . Između njih mora biti točno jedna nultočka od  $p'(j)$ , gdje  $p(j)$  ima lokalni minimum. Stoga,  $j_0$  mora biti između 2 i  $n-1$  tako da je  $p(j_0) \leq p(j_0+1)$ . Direktno iz izračuna slijedi da  $j_0$  mora zadovoljavati  $j_0 \geq \frac{(m-2)(m+2n+1)+(m+1)(n+1)}{m^2-1}$ . Postavljanjem  $m=n$  dobijemo  $j_0 = \lceil \frac{4m+1}{m-1} \rceil$ . Za velike  $m$  on teži prema 4, dakle, minimum sadržaja  $\pi$ -elektrona se ostvaruje na  $H_{1,4}$  za sve dovoljno velike  $m$ . To je u skladu s položajem subdijagonalnog jarka za unutarnje šesterokute. Doista, slična analiza pokazuje  $\varepsilon_{\pi}(H_{2,j})$  je minimiziran za  $j_0 \geq \frac{7m+1+\sqrt{25m^2-34m-23}}{2(m+1)}$ , to teži prema 6 za velike  $m$ .

Sve u svemu, naša analiza pokazuje da za velike  $m \approx n$  unutarnji i granični šesterokuti koji nisu u kutovima od  $B_{m,n}$  primaju otprilike isti udio  $\pi$ -elektrona kao što im je dodijeljeno s raspodjelom  $\pi_a$ . Situacija je drugačija s kutnim šesterokutima. Lako je vidjeti da je  $\pi_a(H_{1,1}) = \frac{13}{3}$  i  $\pi_a(H_{1,n}) = \frac{11}{3}$ . Uzevši sve zajedno, četiri kutna šesterokuta primaju 16 elektrona na temelju bazne atomske distribucije. S druge strane, iz naših formula slijedi da oni sve zajedno primaju samo 15 elektrona. Šesterokuti  $H_{1,1}$  i  $H_{n,n}$  primaju 4.5 elektrona svaki, dok ostala dva kutna šesterokuta primaju 3 elektrona svaki. Dakle, to je netto migracija  $4/3$  elektrona iz šesterokuta na krajevima kraće dijagonale od  $B_{m,n}$ . Jedna trećina

jednog elektrona se dijeli između dva kutna šesterokuta, a preostali elektron se distribuira među ne-kutnim šesterokutima. Stvarna priroda ove distribucije ovisi o omjeru  $m$  i  $n$ .

Postavimo  $n = km$ . Dovoljno je uzeti u obzir  $k \geq 1$ . Lako je vidjeti da prosječan sadržaj elektrona u kutnom šesterokutu ostaje 4.5 i 3, u limesu za velike  $m$  i  $n$ . Pogledajmo sad ne-kutne šesterokute na dužoj dijagonali od  $B_{m,n}$ . Zbrajanjem  $\pi(H_{1,j})$  po  $2 \geq j \geq n - 1$  dobijemo

$$\sum_{j=0}^{n-1} \pi(H_{1,j}) = 3(n - 2) + \frac{(m^2+n)(m+2n+1)}{(m-1)(n+1)(m+n)} - \frac{2mn}{(m+n)(m+n+1)} - \frac{m+1}{m-1} + R(m, n).$$

$R(m, n)$  ima najveću potenciju 2 i linearan je u  $m$  i  $n$ , a podijeljen s  $\binom{m+n}{m}$  nestaje za velike  $m$  i  $n$ . Postavljanjem  $m = n$  dobijemo da  $\sum_{j=0}^{n-1} \pi(H_{1,j})$  teži prema  $3(m - 2)$ , stoga ne-kutni šesterokuti duže strane ne profitiraju od migracije elektrona iz  $H_{1,n}$ . Međutim, za opće  $k > 1$ , pojednostavljuvanjem desne strane gornjeg izraza dobije se ukupan sadržaj  $\pi$ -elektrona duže strane kao  $\frac{3k+1}{k(k+1)^2} - 1$ . Ta vrijednost je negativna za svaki  $k \geq q$  i teži prema -1 kad  $k \rightarrow \infty$ . Stoga je i za duge benzenoidne paralelograme to netto migracija elektrona s njihove duže strane. To je intuitivno jasno, budući da je u skladu s našim prethodnim rezultatima, jer paralelogram je ispružen, više i više šesterokuta iz donjih redaka pada dublje u subdijagonalni redak. Elektroni ne mogu ići prema šesterokutima na kraćim stranama jer oni padaju ili u jarak ili u stranu, ali i dalje u neko negativno područje. Stoga oni moraju završiti u dijagonalnom grebenu, posebno u blizini svojih krajnjih šesterokuta.

Sve o gore navedenom se može pročitati u [5].



# Poglavlje 4

## Zaključak

Pojmovi važnost i zalihost bridova su vezani uz grafove sa savršenim sparivanjima. Savršeno sparivanje je sparivanje koje spaja sve vrhove u grafu, tj. svaki vrh grafa je incidentan s točno jednim bridom u sparivanju. Važnost brida je broj savršenih sparivanja grafa koja sadrže taj brid, a zalihost je broj savršenih sparivanja koja ne sadrže taj brid.

Za broj savršenih sparivanja u grafovima koje smo promatrali smo zaključili sljedeće:

- $\Phi(Z_n) = F_{n+2}$
- $\Phi(L_n) = F_{n+2}$
- $\Phi(R_n) = \begin{cases} F_{n-1} + F_{n+1} & \text{za } n = 2k + 1 \\ F_{n-1} + F_{n+1} + 2 & \text{za } n = 2k \end{cases}$
- $\Phi(\Pi_n) = n$
- $\Phi(B_n) = \frac{n^2}{2}$
- $\Phi(A_n) = n + 1$
- $(2^{n-1})!(n/2^{n-1})^{2^{n-1}} \leq \Phi(Q_n) \leq (n!)^{2^{n-1}/n}$

Nakon određivanja broja savršenih sparivanja odredili smo važnost i zalihost bridova u grafovima te zaključili sljedeće:

- U grafu  $Z_n$  za brid koji zasićuje dva šesterokuta vrijedi  $\iota(e) = F_{k+1}F_{n-k+1}$ , gdje je  $k$  redni broj šesterokuta na slici. Za ostale bridove smo na slici 2.7 prikazali što smo zaključili.
- Važnost bridova koji spajaju dva četverokuta je umnožak dva Fibonaccijeva broja, tj.  $\iota(e) = F_{k+1}F_{n-k+1}$ . Prvi i zadnji brid imaju važnost jednaku  $\iota(e) = F_{n+1}$ . Važnost

vodoravnih bridova u prvom i zadnjem četverokutu je jednaka i iznosi  $\iota(e) = F_n$ , a u ostalim bridovima za računanje važnosti vrijedi  $\iota(e) = F_k F_{n-k+1}$ .

- Kod grafa  $R_n$  za sve grafove osim za  $R_4$  vrijedi da su vrijednosti važnosti bridova koji su stranice mnogokuta jednake i da su manje od vrijednosti važnosti ostalih bridova u grafu. Važnost vertikalnih bridova  $v$  iznosi  $\iota(v) = F_n$ . Vrijednosti važnosti bridova u bazi također imaju jednake vrijednosti, a za njih vrijedi  $\iota(e) = \Phi(R_n) - \iota(v)$ . Za graf  $R_4$  primjećujemo da je svaki brid iste važnosti i ta važnost iznosi  $\iota(e) = 3, \forall e \in E(R_4)$ .
- U grafu  $\Pi_n$  važnost bridova kojem je jedan od vrhova onaj vrh koji se nalazi u unutrašnjosti grafa jednaka je 1. Važnost ostalih bridova je  $\frac{n-1}{2}$ .
- Kod grafa  $B_n$  je važnost bridova koji spajaju vrh piramide i jedan vrh u mnogokutu jednaka  $\frac{n}{2}$ . Važnost ostalih bridova je  $\frac{n^2-2n}{4}$ .
- U grafu  $A_n$  je važnost svakog okomitog brida jednaka je 1. Važnost gornjih i donjih lijevih bridova pada kako idemo s lijeva na desno. Vrijednost važnosti prvog brida je  $n$  i onda svaka sljedeća pada za jedan sve dok ne dođe do 1. Važnost gornjih i donjih desnih bridova pak raste kako idemo s lijeva na desno. Prvi brid ima važnost vrijednosti 1, a svaki sljedeći ima za jedan veću važnost i vrijednosti se penju do  $n$ .
- Za važnost u grafu  $Q_n$  vrijedi  $(2^{n-1})!(n/2^{n-1})^{2^{n-2}} \leq \iota(e) \leq \frac{(n!)^{2^{n-1}/k}}{n}, \forall e \in E(G), \forall e \in E(Q_n)$ . Važnost svakog brida u grafu  $Q_3$  iznosi 3.

Zalihost brida se lako izračuna kad imamo izračunat broj savršenih sparivanja i važnost brida. Trebamo samo primijeniti formulu  $\rho(e) = \Phi(G) - \iota(e), \forall e \in E(G)$ .

Pojmovi važnosti i zalihosti imaju primjenu u kemiji, tj. u računanju sadržaja  $\pi$ -elektrona u prstenovima benzenoidnih paralelograma pa smo u zadnjem poglavlju objasnili tu primjenu i izračunali sadržaj  $\pi$ -elektrona.

# Bibliografija

- [1] <https://hr.wikipedia.org>.
- [2] <http://mathworld.wolfram.com/>.
- [3] <http://http://oeis.org/>.
- [4] T. Došlić, *Importance and Redundancy in Fullerene Graphs*, Croatica Chemica Acta (2002), br. 75, <http://hrcak.srce.hr/131741>.
- [5] ———, *On the  $\pi$ -Electron Content of Rings in Benzenoid Parallelograms*, Z. Naturforsch. (2010), br. 65a, 1–6.
- [6] L. Lovasz i M. D. Plummer, *Matching Theory*, Elsevier Science Publishers B. V. and Akademiai Kiado Budapest, 1986.
- [7] D. Veljan, *Kombinatorna i diskretna matematika*, Algoritam, 2001.



# Sažetak

U ovom diplomskom radu smo izračunali važnost i zalihost bridova u nekim klasama grafova. Na početku smo naveli osnovne pojmove vezane uz teoriju grafova te definirali savršeno sparivanje u grafu, važnost i zalihost bridova. Nakon toga smo uzeli sedam klasa grafova pa odredili broj savršenih sparivanja i važnost i zalihost bridova u tim grafovima. Grafovi koje smo promatrali su  $Z_n$  koji se sastoji od  $n$  šesterokuta pozicioniranih u cik-cak poziciji,  $L_n$  koji se sastoji od  $n$  četverokuta pozicioniranih jedan do drugog,  $\Pi_n$  koji je uspravna piramida,  $R_n$  koji je uspravna prizma,  $A_n$  koji se sastoji od  $n$  pravilnih šesterokuta pozicioniranih jedan do drugog,  $B_n$  koji je bipiramida i  $Q_n$  koji je  $n$ -dimenzionalna hiperkocka. Na kraju smo naveli primjenu pojma važnosti i zalihosti u kemiji, točnije u računanju sadržaja  $\pi$ -elektrona prstenova u benzenoidnim paralelogramima.





# Summary

In this graduate thesis we calculated the importance and redundancy of edges in some classes of graphs. At the beginning we mentioned the basic concepts related to graph theory and define the perfect matching in a graph, and the importance and redundancy. After that we took seven classes of graphs and determine the number of perfect matchings and importance and redundancy in these graphs. Graphs that we observed are  $Z_n$  which consists of  $n$  hexagons positioned in zigzag position,  $L_n$  which consists of  $n$  quadrilaterals positioned next to each other,  $\Pi_n$  which is a pyramid,  $R_n$  which is a prism graph,  $A_n$  which consists of  $n$  hexagons positioned next to each other,  $B_n$  which is a bipyramid, and  $Q_n$  which is a hypercube graph. At the end of this thesis we make use of terms importance and redundancy in chemistry, more specifically for  $\pi$ -electron content of rings in benzenoid parallelograms.



# Životopis

Rođena sam 30. siječnja 1990. godine u Bjelovaru. Pohađala sam OŠ Rovišće gdje sam prva četiri razreda išla u PO Predavac, a zadnja četiri u matičnu školu u Rovišću. Nakon završene osnovne škole, upisala sam opći smjer Gimnazije u Bjelovaru. Maturirala sam 2008. godine i te iste godine upisala sam Preddiplomski studij matematike na Prirodoslovno - matematičkom fakultetu u Zagrebu. Godine 2014. upisujem Diplomski sveučilišni studij Matematičke statistike. Za vrijeme studiranja radila sam studentski posao u Hrvatskom Telekomu na odjelima Teleprodaja, Zadržavanje korisnika i Online služba za korisnike. U slobodno vrijeme volim čitati knjige koje me opuštaju.