Prebrojavanje savršenih sparivanja u nekim klasama benzenoidnih grafova

Samaržija, Dijana

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU

PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET

MATEMATIČKI ODSJEK

Dijana Samaržija

PREBROJAVANJE SAVRŠENIH SPARIVANJA U NEKIM KLASAMA BENZENOIDNIH GRAFOVA

Diplomski rad

Voditelj rada:
prof. dr. sc. Tomislav Došlić

Zagreb, rujan, 2019

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

Uvod

Cilj ovog rada je izvesti eksplicitne formule za broj savršenih sparivanja u raznim klasama benzenoidnih grafova.

U prvom poglavlju ćemo objasniti osnovne pojmove iz teorije grafova. Dat ćemo definicije sparivanja te savršenog sparivanja čime postavljamo temelj za cijeli rad. Također, iskazat ćemo tvrdnje i teoreme koji nam govore koji grafovi dopuštaju savršena sparivanja te kako izračunati broj savršenih sparivanja.

U drugom poglavlju uvodimo pojam benzenoidnog sustava i benzenoidnog grafa. Benzenoidni grafovi su matematički modeli važne klase kemijskih spojeva poznatih kao policiklički aromatički ugljikovodici. U ovom poglavlju još objašnjavamo i koreliranost stabilnosti tih spojeva s brojem savršenih sparivanja u odgovarajućim grafovima.

Na početku trećeg poglavlja navodimo neke klase benzenoidnih grafova koje će nam biti zanimljive u nastavku izvodimo formule za broj savršenih sparivanja u tim klasama. Također, u ovom poglavlju pokazujemo neke nizove brojeva koje možemo dobiti kao broj savršenih sparivanja nekih klasa benzenoidnih grafova.

Poglavlje 1

Teorija grafova

1.1 Osnovni pojmovi

Grafovi su matematičke strukture koje se pojavljuju u raznim oblicima i situacijama. Dio matematike koji ih proučava naziva se teorija grafova. Prije dubljeg proučavanja teorije grafova, navedimo preciznu definiciju grafa:

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

Definicija 1.1.2. *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 *što označavamo* $H \subseteq G$*.* 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*.*

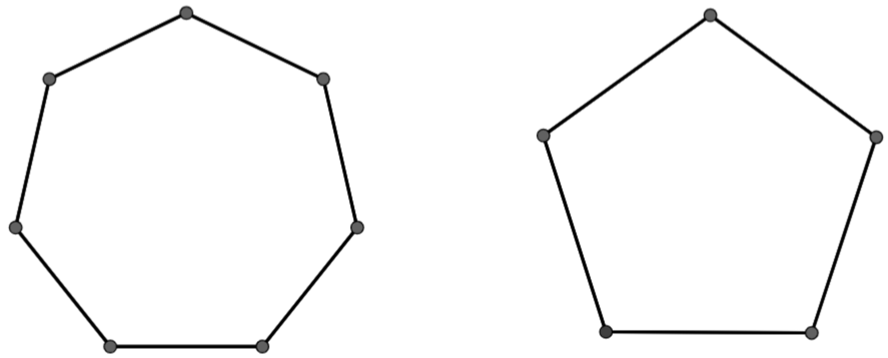
Graf je konačan ako su V i E konačni skupovi, inače je beskonačan. Brid čiji se krajevi podudaraju zove se *petlja*, a ako su krajevi različiti - *pravi brid* ili *karika*. Graf G je *jednostavan* ako nema ni petlja ni višestrukih bridova. U ovom radu isključivo proučavamo konačne jednostavne grafove.

Definicija 1.1.3. *Šetnja* W *u grafu je konačan niz* $W := v_0e_1v_1e_2v_2...v_{n-1}e_nv_n$ *čiji su članovi naizmjence vrhovi i bridovi grafa* G *tako da su krajevi brida* e_i *vrhovi* v_{i-1} *i* v_i*, za svaki* $i=1,...,n$*. Za vrh* v_0 *kažemo da je početak, a za vrh* v_n *kraj šetnje* W*.*

Ako su svi bridovi šetnje W međusobno različiti, onda se W zove *staza*, a ako su na stazi i svi vrhovi različiti, onda govorimo o *putu*. Zatvorena staza pozitivne duljine, čiji su svi vrhovi, osim krajeva, međusobno različiti, zove se *ciklus*.

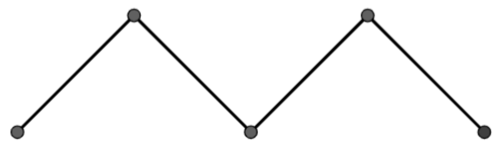
Graf je *povezan* ako se svaka dva vrha mogu povezati nekim putom. U suprotnom, on je *nepovezan*.

Definicija 1.1.4. *Ciklus C_n na n vrhova definiramo skupom vrhova $V = \{1, 2, ..., n\}$ i skupom bridova $E = \{\{i,i+1\} \mid i<n\} \cup \{1,n\}$.*



Slika 1.1: Ciklusi C_7 i C_5

Definicija 1.1.5. *Put P_n na n vrhova definiramo skupom vrhova $V = \{1, 2, ..., n\}$ i skupom bridova $E = \{\{i,i+1\} \mid i<n\}$.*

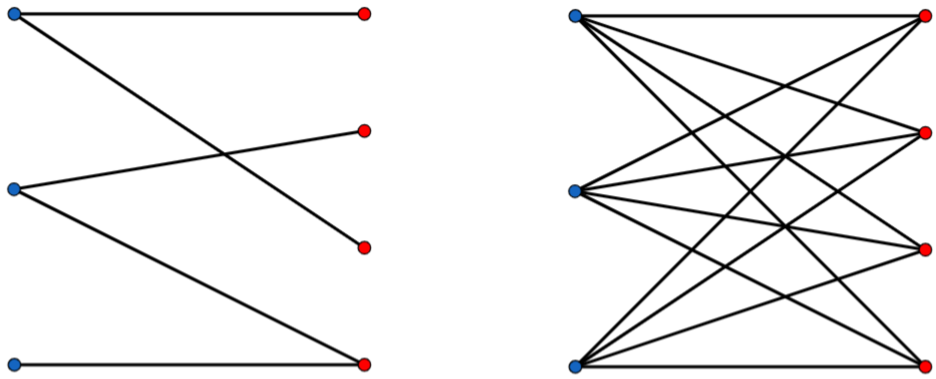


Slika 1.2: PutP_5

Stupanj vrha v, u oznaci $deg(v)$, definiramo kao broj bridova koji su incidentni s v. Ako je vrh petlja, računamo ga kao dva brida koja su incidentna s v. Vrh koji ima stupanj 0 nazivamo *izloirani vrh*, dok je vrh stupnja 1 *krajnji vrh* ili *list*.

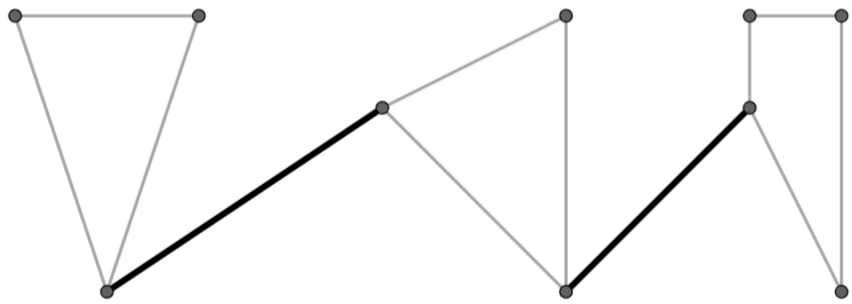
Definicija 1.1.6. *Za graf G kažemo da je regularan ako su svi njegovi vrhovi istog stupnja. Kažemo da je G n-regularan ako $\forall v \in V$ vrijedi $deg(v) = n$. U tom slučaju, n nazivamo stupnjem regularnosti grafa G.*

Graf G je *bipartitan* ako se skup njegovih vrhova može particionirati u dva skupa A i B tako da svaki brid ima jedan kraj u A, a drugi u B. Particiju (A, B) tada zovemo biparticija grafa. Potpuni bipartitni graf je jednostavan bipartitni graf s biparticijom (A, B) u kojem je svaki vrh iz A spojen sa svakim vrhom u B.



Slika 1.3: Bipartitan i potpuni bipartitan graf

Za neki brid grafa G kažemo da je *rezni* ako se njegovim izbacivanjem graf raspada na više komponenti.



Slika 1.4: Rezni bridovi

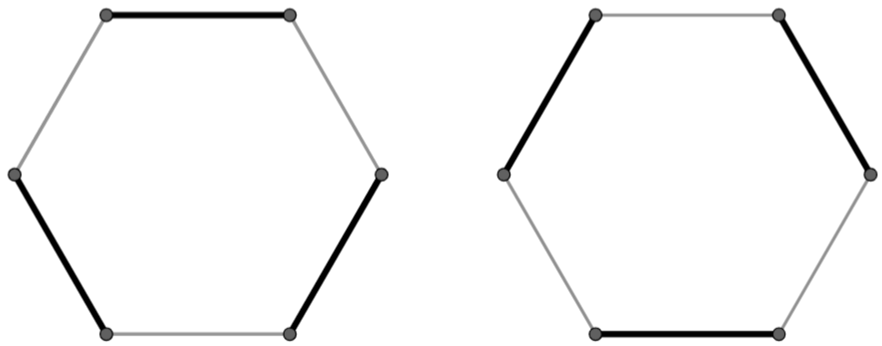
1.2 Sparivanje u grafovima

Definicija 1.2.1. *Sparivanje u grafu $G = (V,E)$ je skup bridova $M \subseteq E$ za koji vrijedi da je svaki vrh iz G incidentan s najviše jednim bridom iz M, tj. dva brida iz sparivanja nemaju zajedničkih vrhova. Kažemo da su vrhovi u i v spareni u M ako su u i v krajevi nekog brida iz M.*

Sparivanje M zasićuje vrh v ako je neki brid iz M incidentan s v. U tom se slučaju još kaže da je vrh v M-zasićen, a inače je v M-nezasićen.

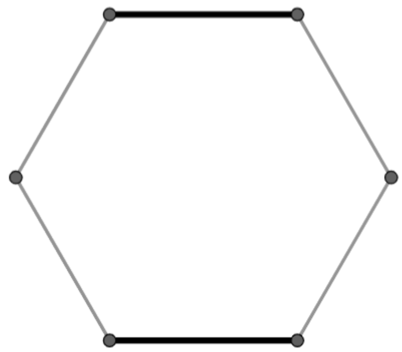
Jedan od osnovnih problema sparivanja je pokazati da postoji sparivanje s dovoljno mnogo bridova ili konstruirati isto.

Definicija 1.2.2. *Ako je svaki vrh iz G M-zasićen, kažemo da je M savršeno sparivanje.*



Slika 1.5: Savršeno sparivanje

M je *maksimalno sparivanje* u G ako ne postoji sparivanje M_1 koje je nadskup od M, tj. sparivanje M je maksimalno ako ne možemo dodati niti jedan brid postojećem skupu. M je *najdulje sparivanje* ako ne postoji sparivanje M_1 takvo da vrijedi $|M_1| > |M|$. Ako postoji savršeno sparivanje, ono je očito i najdulje sparivanje. Svako najdulje sparivanje je ujedno i maksimalno sparivanje iz čega slijedi da je savršeno sparivanje ujedno i maksimalno sparivanje. Obrat ne vrijedi pošto maksimalno sparivanje nije nužno jedinstveno i ne mora biti iste kardinalnosti. Primjer maksimalnog sparivanja, koje nije i najdulje sparivanje, možemo vidjeti na slici ispod. (Slika 1.6)



Slika 1.6: Maksimalno sparivanje koje nije i najdulje sparivanje

Savršena sparivanja

U nastavku opisujemo grafove koji dopuštaju savršena sparivanja te uvodimo pojam metode fragmentacije koju ćemo najćešće koristiti prilikom izvođenja formula za broj savršenih sparivanja.

Definicija 1.2.3. *Komponenta grafa je neparna ako ima neparan broj vrhova, a parna ako ima paran broj vrhova.*

Broj neparnih komponenti nekog grafa G označavamo s $c_0(G)$.

Teorem 1.2.4. *(W. Tutte) Graf G=(V,E) ima savršeno sparivanje ako i samo ako vrijedi*

$$c_o(G - S) \leq |S|, \forall S \subset V \tag{1.1}$$

Kao posljedicu prethodnog teorema navodimo korolar:

Korolar 1.2.5. *3-regularni graf G bez reznih bridova ima savršeno sparivanje.*

U knjizi [6] je navedeno da za bipartitne grafove vrijedi sljedeće:

Teorem 1.2.6. *(Hall) Bipartitni graf G s biparticijom* (X, Y) *ima savršeno sparivanje ako i samo ako je* $|X| = |Y|$ *i* $|N(S)| \geq |S|, \forall S \supseteq X$*, gdje je* $N(S)$ *skup vrhova grafa G koji su susjedni s barem jednim vrhom iz S. Posebno, k-regularni bipartitni graf ima savršeno sparivanje za* $k > 0$.

Postoji više metoda kojima se služimo prilikom izvođenja formule za broj savršenih sparivanja u nekom grafu. U nastavku rada najčešće ćemo koristiti *metodu fragmentacije*. Opišimo navedenu metodu na nekom grafu G:

- Odaberemo jedan brid grafa G i pretpostavimo da je sadržan u nekom savršenom sparivanju. Uklonimo taj brid te sve ostale bridove za koje taj odabir jedinstveno određuje jesu li ili nisu sadržani u savršenom sparivanju. Označimo preostali graf s G_1

- Za odabrani brid pretpostavimo da nije sadržan u nekom savršenom sparivanju. Uklonimo taj brid te sve ostale bridove za koje taj odabir jedinstveno određuje jesu li ili nisu sadržani u savršenom sparivanju. Označimo preostali graf s G_2

- Za broj savršenih sparivanja u G vrijedi

$$\Phi(G) = \Phi(G_1) + \Phi(G_2) \tag{1.2}$$

- Označimo li promatrani brid s $e = uv$, vrijedi

$$\Phi(G) = \Phi(G - uv) + \Phi(G - u - v) \tag{1.3}$$

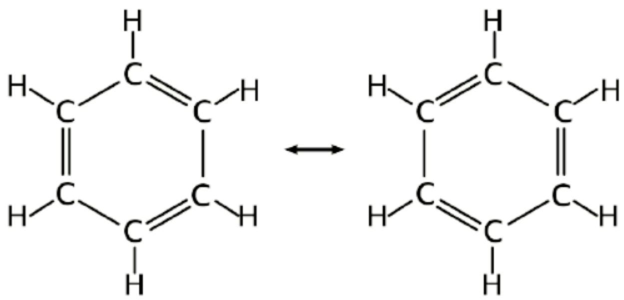
Poglavlje 2

Benzenoidni sustav

2.1 Benzenoidni ugljikovodici

Aromatski spojevi su velika skupina cikličkih organskih spojeva izrazite kemijske stabilnosti. Aromatskima su nazvani zbog oštra mirisa nekih najjednostavnijih benzenskih derivata. Mogu biti benzenoidni, kojima je osnovna jezgra benzen, heterociklički te nebenzenoidni. U ovom radu bavimo se samo benzenoidnim ugljikovodicima koji su ujedno i najbrojniji aromatski spojevi.

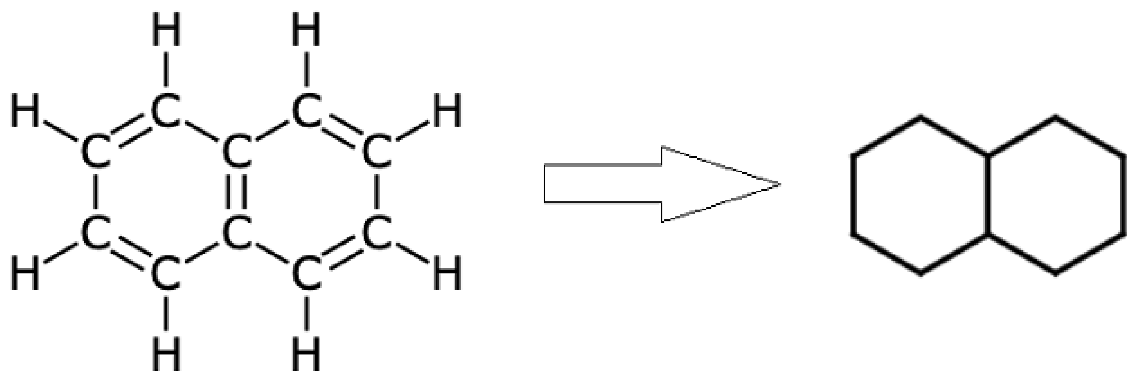
Najjednostavniji benzenoidni ugljikovodik je benzen molekulske formule C_6H_6. Prvi ga je otkrio Faraday 1825. godine, no trebalo je još neko vrijeme da bi se odredila njegova strukturna formula. Do tog otkrića došao je August Kekulé 1865. godine. Njegova formula prikazuje benzen kao šesterokut s naizmjence postavljenim jednostrukim i dvostrukim kovalentnim vezama između atoma ugljika.



Slika 2.1: Benzen

Kekuléova strukturna formula nije jedinstvena što možemo vidjeti na slici 2.1. Budući da benzen ima dvije takve strukturne formule, kažemo da benzen ima dvije Kekuléove strukture.

Spajanjem dvaju ili više benzenskih prstena dobivamo skupinu organskih spojeva koju nazivamo još i policiklički aromatski ugljikovodici. Oni se često, osim kemijskom strukturnom formulom, prikazuju i samo pomoću šeterokuta kao što je prikazano na slici ispod. (Slika 2.2)



Slika 2.2: Prikaz aromatskih ugljikovodika pomoću šesterokuta (naftalen)

Važnost Kekuléovih struktura

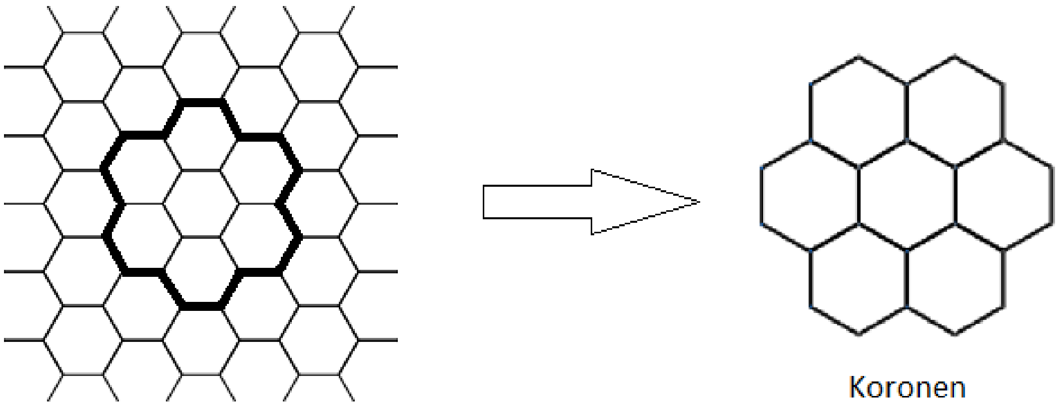
Kekuleove strukture igraju važnu ulogu u kemiji, posebno u teoriji rezonancije te u teoriji valentnih veza. Broj Kekuléovih struktura usko se povezuje sa stabilnošću nekog spoja. Što je broj Kekuléovih struktura veći, spoj je stabilniji. ([4])

2.2 Benzenoidni sustav

Budući da je glavna tema ovog rada prebrojavanje, uvodimo matematičku reprezentaciju ugljikovodika te Kekuléovih struktura. Na početku dajemo definiciju benzenoidnog sustava te zatim postavljamo traženu vezu s policikličkim aromatskim ugljikovodicima.

Definicija 2.2.1. *Benzenoidni sustav je podskup pravilnog šesterokutnog popločenja s 1-povezanim interiorom.*

Drugim riječima, benzenoidni sustav je geometrijski objekt dobiven spajanjem jednakih pravilnih šesterokuta u ravnini te za svaka dva šesterokuta vrijedi da su ili potpuno disjunktna ili dijele cijeli jedan brid. Sada je jasno da svaki policiklički aromatski ugljikovodik možemo prikazati kao neki benzenoidni sustav.



Slika 2.3: Veza između benzenoidnog sustava i policikličkih aromatskih ugljikovodika

Ako svaki šesterokut promatramo kao graf na način da su svi vrhovi šesterokuta zapravo vrhovi u grafu, a sve stranice šesterokuta bridovi grafa, dolazimo do zaključka da svaki benzenoidni sustav možemo također promatrati kao graf. Tada govorimo o *benzenoidnom grafu*.

Prebrojavanje Kekuléovih struktura nekog policikličkog aromatskog ugljikovodika tada možemo poistovjetiti s prebrojavanjem savršenih sparivanja u benzenoidnom grafu budući da u benzenoidima atom ugljika može sudjelovati u najviše jednoj dvostrukoj vezi.

Poglavlje 3

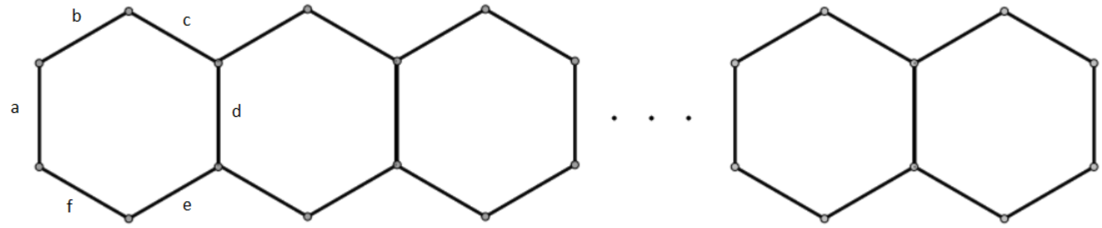
Prebrojavanje savršenih sparivanja

U ovom poglavlju ćemo izvesti formule za broj savršenih sparivanja u nekim klasama benzenoidnih grafova. Prije svega, navodimo koje klase benzenoidnih grafova će nam biti od interesa u nastavku rada:

- Lanac - benzenoidni graf za koji vrijedi da svaki šesterokut ima najviše dva susjedna šesterokuta. Sastoji se od unutarnjih i vanjskih šesterokuta. Svaki unutarnji šesterokut može biti ravan ili lomni. Ravan unutarnji šesterokut je onaj čiji su dijeljeni bridovi međusobno paralelni. Lomni unutarnji šeterokut je onaj koji sa susjedna dva šesterokuta dijeli bridove koji nisu međusobno paralelni. U nastavku rada promatramo:
  - Linearni lanac - svi unutarnji šesterokuti su ravni
  - Nigdje ravan lanac - svi unutarnji šesterokuti su lomni te vrijedi da susjedna dva šesterokuta unutarnjeg šesterokuta ne smiju također biti susjedni. Ovdje posebno promatramo cik-cak lanac.
- Benzenoidni paralelogram
- Benzenoidni trokut
- Koronen s linearnim lancem
- Pahulja s kracima duljine n

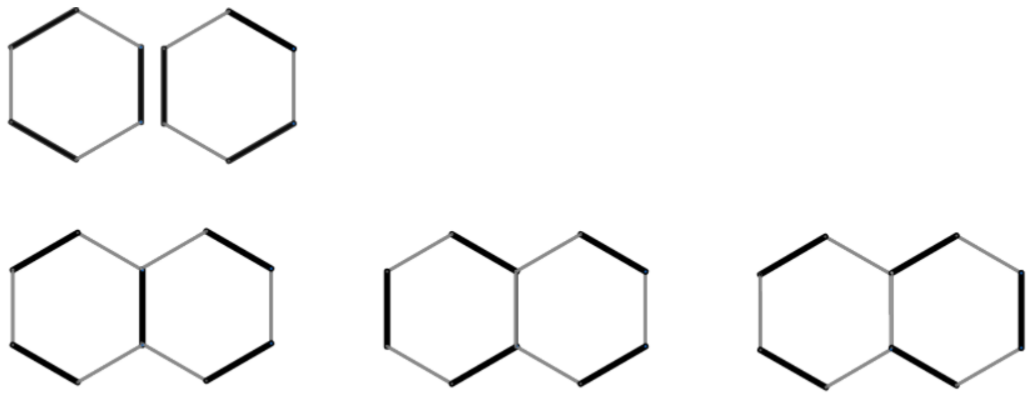
3.1 Linearni lanac

Linearni lanac L_n je graf koji se sastoji od n pravilnih šesterokuta pozicioniranih na način da su svi bridovi koji su dijeljeni između dva šesterokuta međusobno paralelni.



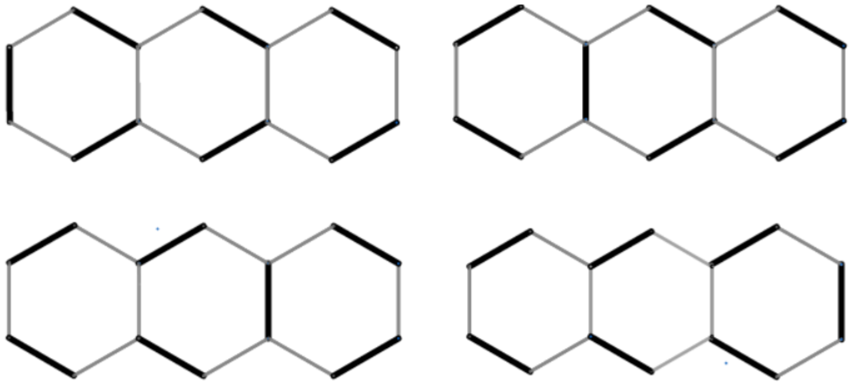
Slika 3.1: Linearni lanac

Odredimo najprije broj savršenih sparivanja u linearnim lancima duljine $n = 1, 2, 3, 4$.

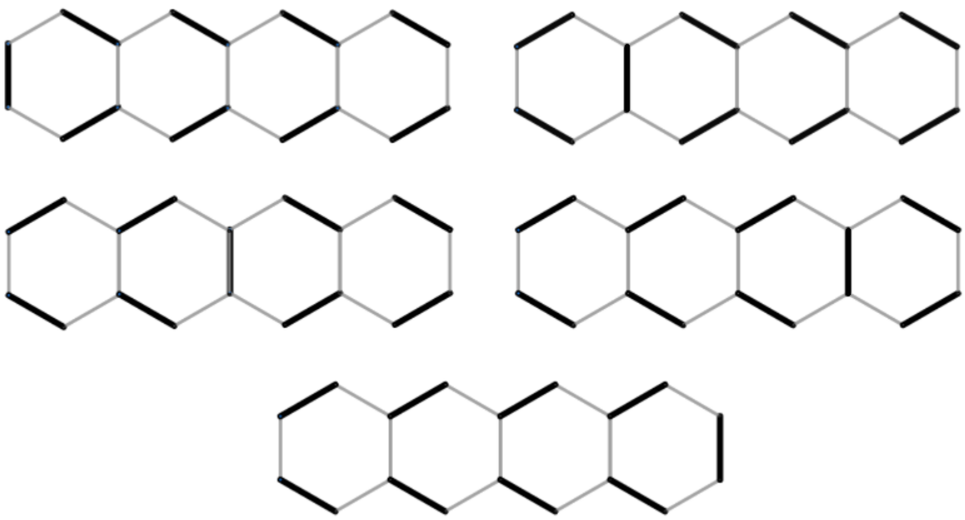


Slika 3.2: Broj savršenih sparivanja u linearnim lancima L_1 i L_2

Na slici 3.2 možemo vidjeti da linearni lanac duljine $n = 1$ ima 2 savršena sparivanja dok linearni lanac duljine $n = 2$ ima 3 savršena sparivanja. Nadalje, na slici 3.3 možemo vidjeti da linearni lanac duljine $n = 3$ ima 4 savršena sparivanja, dok na slici 3.4 vidimo da linearni lanac duljine $n = 4$ ima 5 savršenih sparivanja. Iz toga možemo zaključiti da je broj savršenih sparivanja za linearni lanac duljine n jednak $n + 1$. U nastavku slijedi formalni iskaz te dokaz tvrdnje.



Slika 3.3: Broj savršenih sparivanja u linearnom lancu L_3



Slika 3.4: Broj savršenih sparivanja u linearnom lancu L_4

Propozicija 3.1.1. *Linerni lanac duljine n ima n+1 savršenih sparivanja, tj. vrijedi*

$$\Phi(L_n) = n + 1. \tag{3.1}$$

Tvrdnju ćemo dokazati na dva načina:

- 1. način
  Označimo bridove prvog šesterokuta s a, b, c, d, e, i f kao na slici 3.1. Ako savršeno sparivanje sadrži brid a, onda mora sadržavati i bridove c i e, te sve ostale bridove koji se nalaze s desne strane ostalih šesterokuta, a nisu paralelni s bridom a. Uzmemo li da savršeno sparivanje sadrži brid d, onda mora sadržavati i bridove b i f koji se nalaze lijevo od njega, a desno od njega savršeno sparivanje mora opet sadržavati sve bridove koji se nalaze s desne strane ostalih šesterokuta, a nisu paralelni s bridom d. Sada vidimo da savršeno sparivanje može sadržavati samo jedan vertikalni brid. Ostali bridovi u savršenom sparivanju su gornji i donji lijevi u svakom šesterokutu koji se nalazi s lijeve strane vertikalnog brida, te gornji i donji desni u svakom šesterokutu koji se nalazi s desne strane vertikalnog brida. Kako vertikalnih bridova u grafu A_n ima $n + 1$, onda je i broj savršenih sparivanja također $n + 1$.

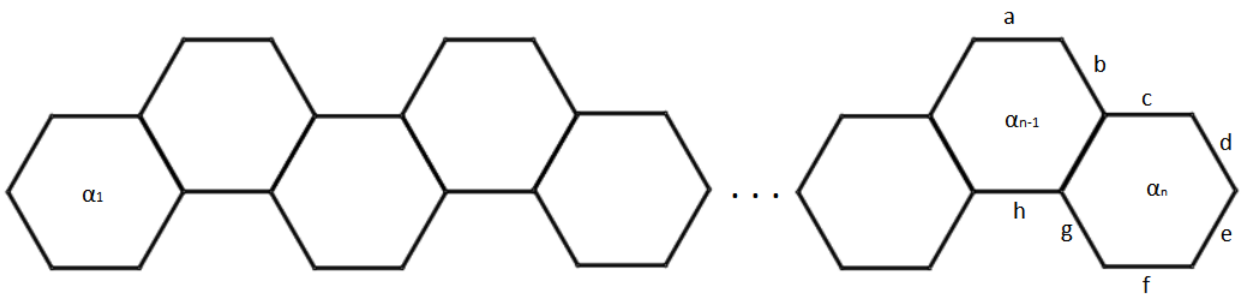
- 2. način
  Označimo bridove prvog šesterokuta s a, b, c, d, e, i f kao na slici 3.1. Skup M svih savršenih sparivanja od L_n se može particionirati kao $M = M_a \cup M_{\setminus a}$, gdje je $M_a \subseteq M$ skup savršenih sparivanja od L_n koji sadrži brid a , a $M_{\setminus a} \subseteq M$ skup savršenih sparivanja od L_n koji ne sadrži brid a. Očito je $|M_a| = 1$. Savršeno sparivanje od L_n koje ne sadrži a, mora sadržavati b i f iz prvog šesterokuta, te promatramo ostalih $n - 1$ šesterokuta. Prema tome vrijedi $|M_{\setminus a}| = \Phi(L_{n-1})$. Iz ovoga slijedi da je

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

  Iz slike 3.2 je jasno da je $\Phi(L_1) = 2$. Prema tome, rješenje navedene rekurzije je $n + 1$.

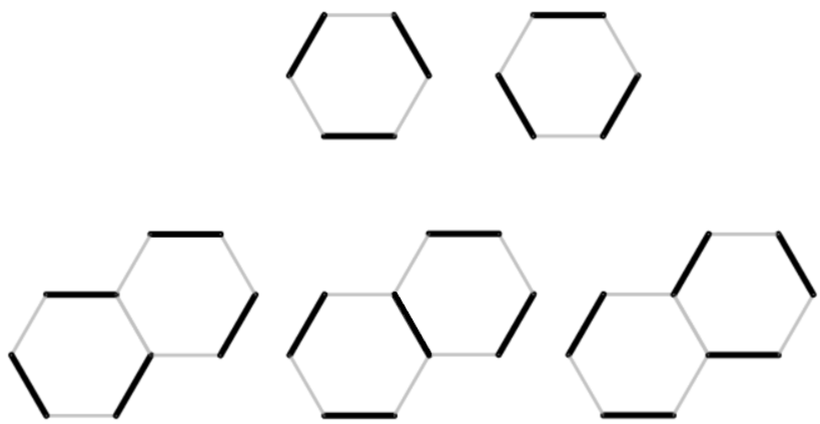
3.2 Cik-cak lanac

Cik-cak lanac Z_n je graf koji se sastoji od n šesterokuta pozicioniranih u cik-cak poziciji.



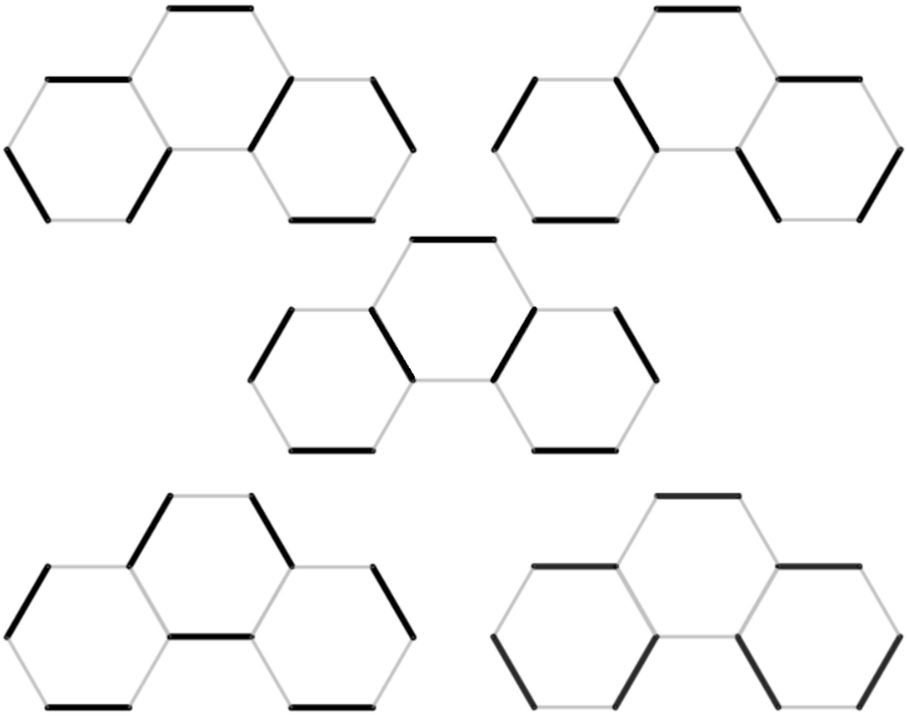
Slika 3.5: Cik-cak lanac Z_n

Odredimo najprije broj savršenih sparivanja u cik-cak lancima duljine $n = 1, 2, 3$.



Slika 3.6: Broj savršenih sparivanja u cik-cak lancima Z_1 i Z_2

Na slici 3.6 možemo vidjeti da cik-cak lanac duljine $n = 1$ ima 2 savršena sparivanja dok cik-cak lanac duljine $n = 2$ ima 3 savršena sparivanja. Nadalje, na slici 3.7 možemo vidjeti da linearni lanac duljine $n = 3$ ima 5 savršenih sparivanja. Iz toga dolazimo do zaključka da bi broj savršenih sparivanja za cik-cak lanac duljine n mogao biti Fibonaccijev broj F_{n+2}. U nastavku slijedi formalni iskaz te dokaz tvrdnje.



Slika 3.7: Broj savršenih sparivanja u cik-cak lancu Z_3

Propozicija 3.2.1. *Cik-cak lanac duljine n ima F_{n+2} savršenih sparivanja, tj. vrijedi*

$$\Phi(Z_n) = F_{n+2}. \tag{3.2}$$

Dokaz. Označimo najprije šesterokute u cik-cak lancu brojevima $\alpha_1, ..., \alpha_{n-1}, \alpha_n$, te određene bridove slovima a, b, c, d, e, f, g, h kao što je prikazano na slici 3.5. Skup M svih savršenih sparivanja od Z_n se može particionirati kao $M = M_c \cup M_d$ gdje je $M_c \subseteq M$ skup savršenih sparivanja od Z_n koji sadrži brid c , a $M_d \subseteq M$ skup savršenih sparivanja od Z_n koji sadrži brid d.

Vidimo odmah da ako neko savršeno sparivanje sadrži brid c, onda mora sadržavati i bridove a, e i g pa je $|M_c| = \Phi(n-2)$, tj. to je broj savršenih sparivanja početnog cik-cak lanca bez zadnja dva šesterokuta ($Z_n - \alpha_n - \alpha_{n-1}$). S druge strane, ukoliko savršeno sparivanje sadrži brid d, mora sadržavati i brid f pa je $|M_d| = \Phi(n-1)$, tj. to je broj savršenih sparivanja početnog cik-cak lanca bez zadnjeg šesterokuta ($Z_n - \alpha_n$).

Iz napisanog slijedi da je:

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

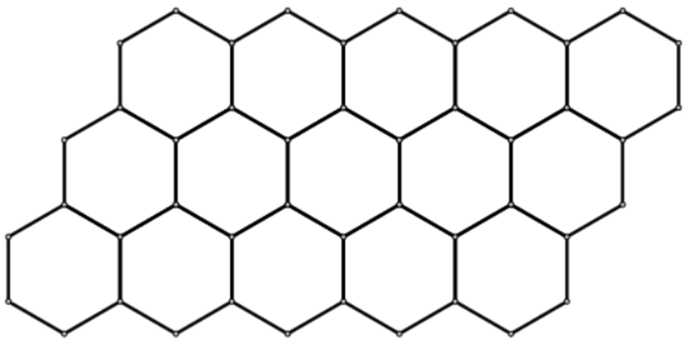
$\square$

Već smo prije vidjeli da je $\phi(Z_1) = 2$. Trebamo još vidjeti koliko savršenih sparivanja ima Z_0. Budući da je to samo jedan brid, vrijedi da je $\phi(Z_0) = 1$. Iz toga slijedi da je $\Phi(Z_n) = F_{n+2}$.

Ista formula za broj savršenih sparivanja vrijedi za svaki nigdje ravan lanac.

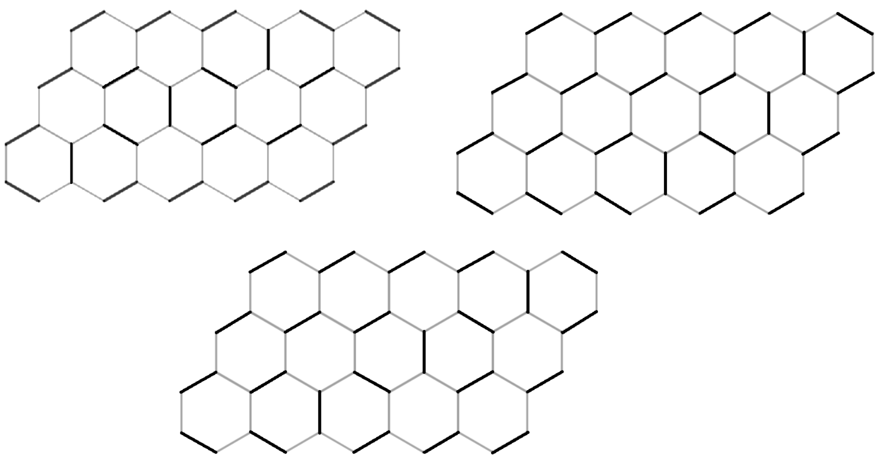
3.3 Benzenoidni paralelogram

Benzenoidni paralelogram $B_{m,n}$ je graf koji se sastoji od $m \times n$ pravilnih šesterokuta poredanih u m redaka. Svaki redak sadrži n šesterokuta koji su pomaknuti za pola šesterokuta udesno u odnosu na prethodni redak. Također, 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.



Slika 3.8: Benzenoidni paralelogram $B_{3,5}$

Promotrimo najprije nekoliko savršenih sparivanja u grafu $B_{3,5}$.

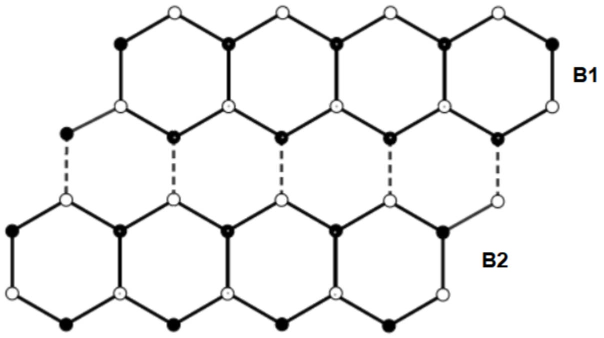


Slika 3.9: Savršena sparivanja u grafu $B_{3,5}$

Na slici 3.9 možemo vidjeti da prikazana savršena sparivanja sadrže točno jedan vertikalni brid u svakom retku. Dokažimo da ta tvrdnja vrijedi za sve benzenoidne paralelograme $B_{m,n}$.

Propozicija 3.3.1. *Svako savršeno sparivanje M u benzenoidnom paralelogramu $B_{m,n}$ sadrži točno jedan vertikalni brid u svakom retku.*

Dokaz. Podijelimo skup vrhova grafa $B_{m,n}$ u dva skupa: V_b(bijeli) i V_c(crni) na način da susjedni vrhovi bijelog vrha moraju biti crni i obratno. Također, u skupu V_b nalaze se svi vrhovi koji su najviši u svakom šesterokutu.



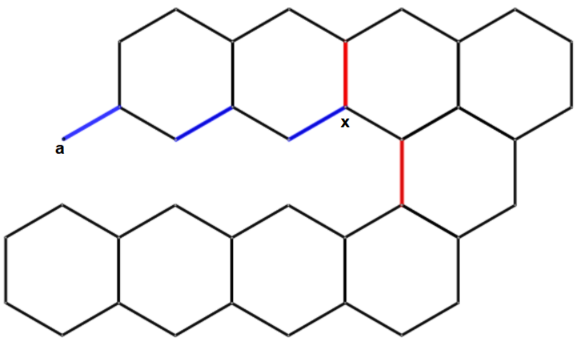
Slika 3.10: Podjela grafa $B_{m,n}$ na komponente B_1 i B_2

Pretpostavimo sada da postoji redak u kojem niti jedan vertikalni brid nije sadržan u savršenom sparivanju M. Označimo ga indeksom i. Ako uklonimo sve vertikalne bridove iz tog retka, rastavljamo graf $B_{m,n}$ na dvije komponente B_1 i B_2 kao što je prikazano na slici 3.10. Svaki od obrisanih bridova spajao je crni vrh komponente B_1 s bijelim vrhom komponente B_2. No sada vidimo da broj crnih vrhova u B_1 premašuje broj bijelih vrhova točno za jedan, dok broj bijelih vrhova u B_2 također premašuje broj crnih vrhova točno za jedan. Iz toga slijedi da u i-om retku mora biti točno jedan vertikalni brid koji je sadržan u savršenom sparivanju M. □

Dakle, svako savršeno sparivanje sadrži točno jedan vertikalni brid u svakom retku grafa $B_{m,n}$. U svakom retku imamo $n + 1$ vertikalni brid pa ih označimo s lijeva na desno brojevima $0, 1, 2...n$. Oznakom i_p označimo vetikalni brid koji je sadržan u M u p-tom retku.

Propozicija 3.3.2. *Za svako savršeno sparivanje M benzenoidnog paralelograma $B_{m,n}$ vrijedi da je $i_p \leq i_{p+1}, \forall p \in 1, ..., m-1$.*

Dokaz. Promotrimo savršeno sparivanje M u $B_{m,n}$ i pretpostavimo da postoji $p \in 1, ..., m-1$ takav da je $i_p > i_{p+1}$. Uklonimo sve vertikalne bridove p-tog retka koji se nalaze s lijeve strane vertikalnog brida i_p. Novonastali graf ima jedan vrh koji je list. Označimo taj vrh slovom a. Promotrimo najkraći put P od a do x gdje x predstavlja niži vrh brida i_{p+1}. Na tom putu niti jedan vrh (isključujući x) nije pokriven nekim vertikalnim bridom iz M, a kako niti jedan uklonjeni brid nije bio iz M, svi vrhovi iz $P \setminus \{x\}$ moraju biti pokriveni nekim drugim bridom, pa tako i vrh a. Ukoliko vrh a pokrijemo nekim bridom iz M, slijedi da u $(p + 1)$-om retku s lijeve strane od i_{p+1} u svakom šesterokutu desni donji brid mora biti sadržan u M. Dolazimo do kontradikcije jer je tada x pokriven s dva brida. Postupak je prikazan na slici 3.11.



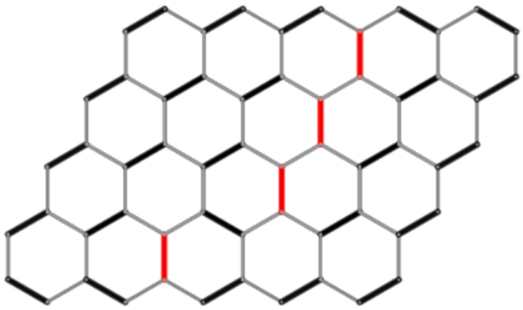
Slika 3.11: Dokaz propozicije 3.3.2

□

Sada je lako vidjeti da vrijedi sljedeće:

- Za svako savršeno sparivanje M benzenoidnog paralelograma $B_{m,n}$ koje sadrži vertikalni brid i_p u retku p vrijedi da je dio grafa koji se nalazi lijevo od i_p u redcima $p + 1, ..., m$ jedinstveno određen i to na način da su u tom dijelu grafa nevertikalni gornji bridovi s lijeve strane svakog šesterokuta sadržani u M.

- Za svako savršeno sparivanje M benzenoidnog paralelograma $B_{m,n}$ koje sadrži vertikalni brid i_p u retku p vrijedi da je dio grafa koji se nalazi desno od i_p u redcima $1, ..., p - 1$ jedinstveno određen i to na način da su u tom dijelu grafa nevertikalni donji bridovi s desne strane svakog šesterokuta sadržani u M.



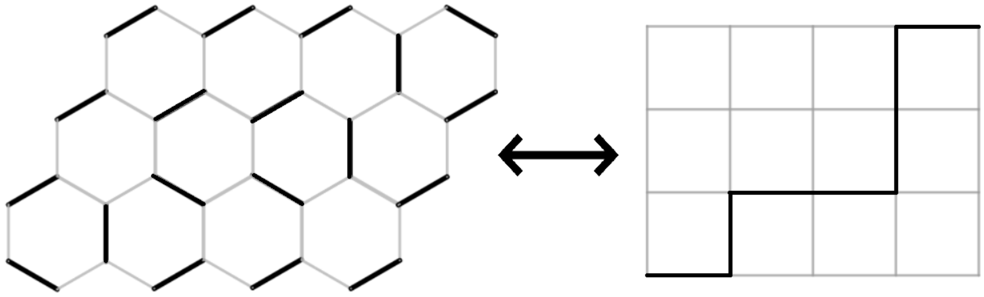
Slika 3.12: Savršeno sparivanje jedinstveno je određeno odabirom vertikalnih bridova

Propozicija 3.3.3. *Postoji bijekcija između skupa svih savršenih sparivanja nekog benzenoidnog paralelograma $B_{m,n}$ i skupa svih neopadajućih nizova duljine m s elementima iz* $\{0, 1, ..., n\}$.

Dokaz. Iz prethodnih razmatranja slijedi da pozicija vertikalnih bridova u savršenom sparivanju jedinstveno određuje neopadajući niz duljine m čiji su elementi iz skupa $\{0, 1, ..., n\}$. Da bi dokazali drugu stranu, promatramo neopadajući niz $(i_1, ...i_m)$, gdje i_p predstavlja vertikalni brid u retku p, $i_p \in \{0, 1, ..., n\}$. Sada konstruiramo sparivanje koje sadrži navedeni niz. Označimo to sparivanje sa S i pretpostavimo da postoje savršena sparivanja M_1 i M_2 takva da vrijedi $S \subset M_1$ i $S \subset M_2$. Razmotrimo njihovu simetričnu razliku $M_1 \triangle M_2$. Niti jedan brid u $M_1 \triangle M_2$ ne smije biti vertikalan. Također, znamo da u $M_1 \triangle M_2$ ne mogu biti niti lijevi gornji bridovi svakog šesterokuta koji je pozicioniran lijevo i iznad svakog brida iz S, te isto tako niti desni donji bridovi svakog šesterokuta koji je pozicioniran desno i ispod svakog brida iz S. Jedino što je još ostalo provjeriti su bridovi koji leže na putu između gornjeg vrha vertikalnog brida i_p i donjeg vrha vertikalnog brida i_{p+1}. No, savršena sparivanja na tim putevima su jedinstvena pa ni ti bridovi ne mogu biti u $M_1 \triangle M_2$ čime dolazimo do zaključka da je $M_1 \triangle M_2 = \emptyset$ tj. $M_1 = M_2$. Dakle, svaki izbor m vertikalnih bridova s neopadajućim vrijednostima jedinstveno određuje savršeno sparivanje M benzenoidnog paralelograma $B_{m,n}$. □

Propozicija 3.3.4. *Postoji 1-1 korespodencija između skupa svih savršenih sparivanja nekog benzenoidnog paralelograma $B_{m,n}$ i skupa svih usmjerenih putova u rešetki od* $(0, 0)$ *do* (n, m) *s koracima* $(0, 1)$ *i* $(1, 0)$.

Dokaz. U prethodnoj propoziciji smo dokazali da postoji bijekcija između skupa svih savršenih sparivanja i skupa svih neopadajućih nizova duljine m s elementima iz $\{0, 1, ..., n\}$.



Slika 3.13: Savršeno sparivanje u $B_{4,3}$ i odgovarajući put u rešetki $P_{4,3}$

Dakle, sada je dovoljno dokazati da postoji 1-1 korespodencija između skupa svih usmjerenih putova u rešetki od $(0,0)$ do (n,m) s koracima $(0,1)$ i $(1,0)$ te skupa svih neopadajućih nizova duljine m s elementima iz $\{0,1,...,n\}$.

Promotrimo neki put u rešetki $P_{n,m}$. Takav put ima $m+n$ koraka, m vertikalnih (tipa $(0,1)$) i n horizontalnih (tipa $(1,0)$). Označimo li svaki vertikalni korak indeksom vertikalne rešetke na kojoj se nalazi, dobijemo neopadajući niz duljine m s elementima iz $0,1,...,n$.

S druge strane, uzmemo neopadajući niz duljine m s elementima iz $0,1,...,n$ i konstruiramo usmjereni put u rešetki $P_{n,m}$ koristeći korake $(0,1)$ i $(1,0)$. To radimo na sljedeći način: vertikalni koraci spajaju točke $(i_j, j-1)$ i (i_j, j) gdje je $j = 1,...,m$. Nakon toga ubacimo horizontalne korake koji spajaju točke (i_j, j) i (i_{j+1}, j), $j = 1,...,m-1$, te, ako je potrebno, dodamo još i korake od $(0,0)$ do $(i_1, 0)$ te od (i_m, m) do (n,m). Na taj način smo dobili odgovarajući put. □

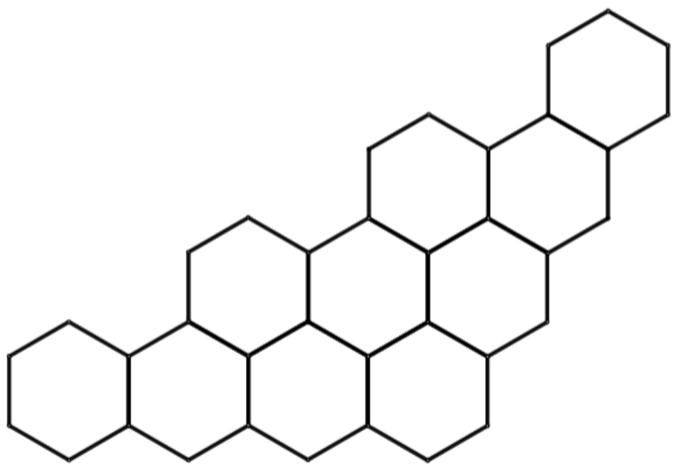
Dokazana korespodencija prikazana je na slici 3.13. Iz propozicije 3.3.4 direktno slijedi:

Propozicija 3.3.5. *Broj savršenih sparivanja u benzenoidnom paralelogramu $B_{m,n}$ jednak je:*

$$\Phi(B_{m,n}) = \binom{m+n}{m} = \binom{m+n}{n}. \tag{3.3}$$

3.4 Benzenoidni trokut

Benzenoidni trokut T_n je graf koji se sastoji od šesterokuta poredanih u n redaka na način da prvi redak sadrži n šesterokuta, a u svakom sljedećem retku se broj šesterokuta smanjuje za jedan dok ne dođemo do zadnjeg retka koji sadrži samo jedan šesterokut. Također, svaki sljedeći redak je pomaknut za šesterokut i pol u desno.



Slika 3.14: Benzenoidni trokut T_4

Koristeći dokaz koji smo izveli za benzenoidni paralelogram, lako vidimo da broj savršenih sparivanja u benzenoidnom trokutu T_n odgovara broju putova od $(0, 0)$ do (n, n) s koracima $(0, 1)$ i $(1, 0)$ koji prolaze ispod pravca $y = x$.

Dakle, od ukupnog broja putova koji je $\binom{2n}{n}$ trebamo oduzeti sve putove koji imaju barem jedan korak s krive strane pravca $y = x$. Na taj način dolazimo do broja

$$\binom{2n}{n} - \binom{2n}{n+1} = \frac{1}{n+1}\binom{2n}{n}. \tag{3.4}$$

Poznato je da se takvi brojevi nazivaju Catalanovi brojevi ([6]) pa vrijedi sljedeća tvrdnja:

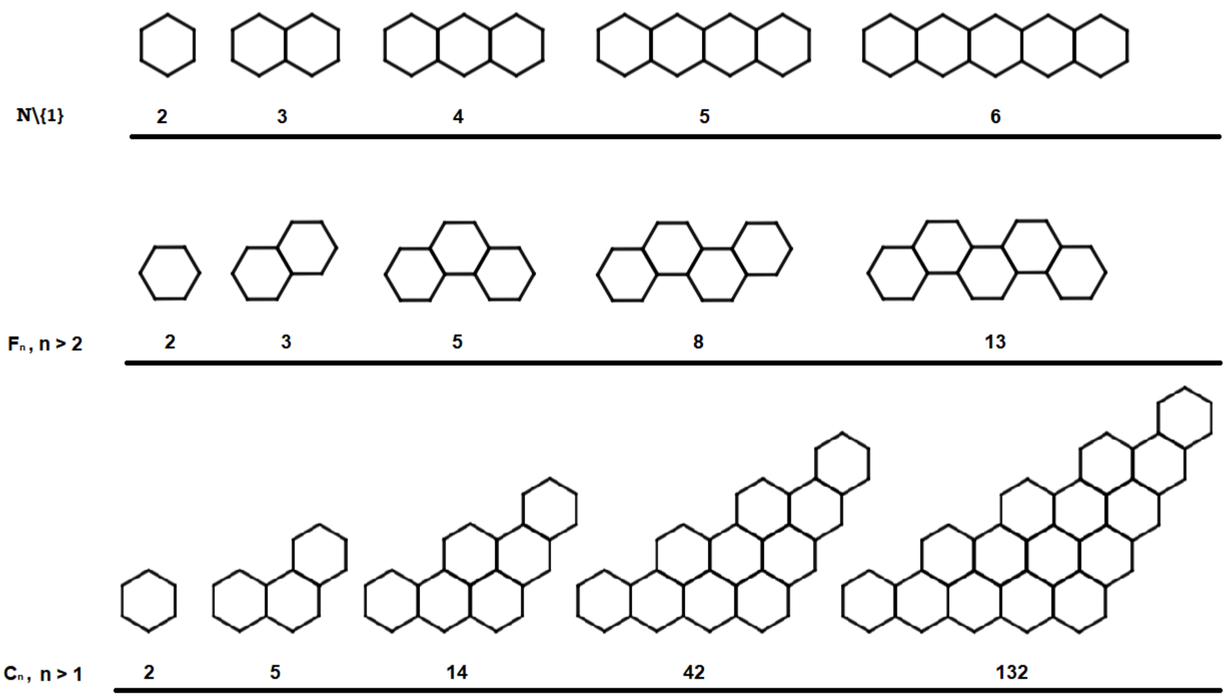
Propozicija 3.4.1. *Broj savršenih sparivanja u benzenoidnom trokutu T_n jednak je*

$$\Phi(T_n) = C_{n+1}. \tag{3.5}$$

3.5 Nizovi brojeva kao broj savršenih sparivanja u nekim klasama benzenoidnih grafova

U prethodnim poglavljima možemo vidjeti da postoje razne klase benzenoidnih grafova čiji su brojevi savršenih sparivanja zapravo poznati cjelobrojni nizovi brojeva koji su većinom kombinatornog karaktera.

Već smo pokazali da niz prirodnih brojeva većih od 1 možemo dobiti kao broj savršenih sparivanja u linearnim lancima, niz Fibbonacijevih brojeva $F_n, n > 2$ možemo dobiti kao broj savršenih sparivanja u nigdje ravnim lancima te niz Catalanovih brojeva $C_n, n > 1$ možemo dobiti kao broj savršenih sparivanja u benzenoidnim trokutima.



Slika 3.15: Prirodni, Fibbonacijevi i Catalanovi brojevi kao broj savršenih sparivanja u benzenoidnim grafovima

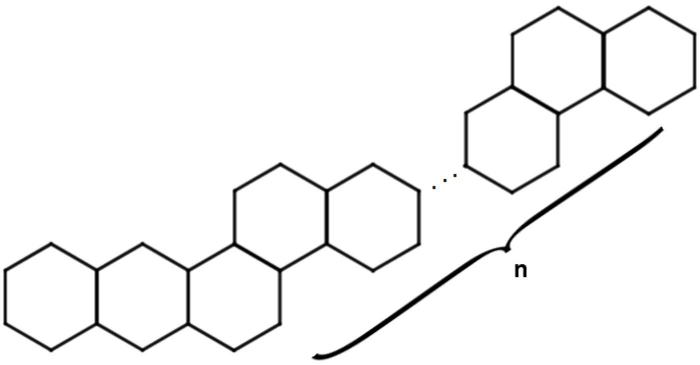
Na sličan način možemo dobiti još neke nizove brojeva. Najprije konstruiramo klasu benzenoidnih grafova čiji će broj savršenih sparivanja dati niz brojeva koji nazivamo Lucasovi brojevi.

Definicija 3.5.1. *Lucasov niz brojeva definiramo rekurzivnom formulom*

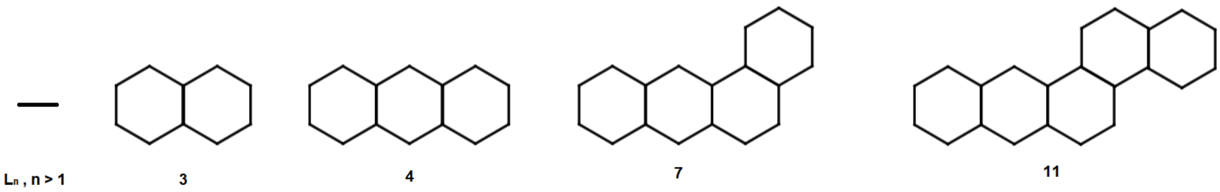
$$L_{n+2} = L_{n+1} + L_n, n \geq 0 \tag{3.6}$$

uz početne uvjete $L_0 = 2$, $L_1 = 1$.

Traženi benzenoidni grafovi sastoje se od jednog linearnog lanca duljine 2 te jednog cik-cak lanca duljine n koji su spojeni kao na slici ispod. (Slika 3.16)



Slika 3.16: Spojeni linearni lanac duljine 2 s cik-cak lancom duljine n

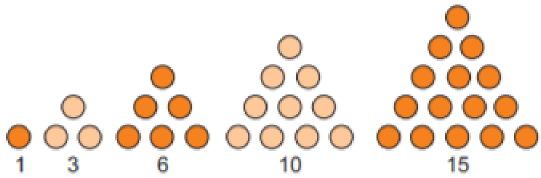


Slika 3.17: Lucasovi brojevi kao broj savršenih sparivanja u benzenoidnim grafovima

Sljedeći nizovi brojeva koje promatramo su niz trokutastih brojeva te niz centralnih binomnih koeficijenata.

Definicija 3.5.2. *Trokutasti brojevi su brojevi oblika:*

$$T_n = \frac{n(n+1)}{2}, n \in \mathbb{N}. \tag{3.7}$$



Slika 3.18: Geometrijska predodžba trokutastih brojeva

Definicija 3.5.3. *Centralni binomni koeficijenti su brojevi oblika:*

$$X_n = \binom{2n}{n}, n \in \mathbb{N}. \tag{3.8}$$

Ukoliko promatramo Pascalov trokut, centralni binomni koeficijenti su brojevi koji su radi lakše identifikacije zaokruženi na slici ispod. (Slika 3.19)

1

1 1

1 2 1

1 3 3 1

1 4 6 4 1

1 5 10 10 5 1

1 6 15 20 15 6 1

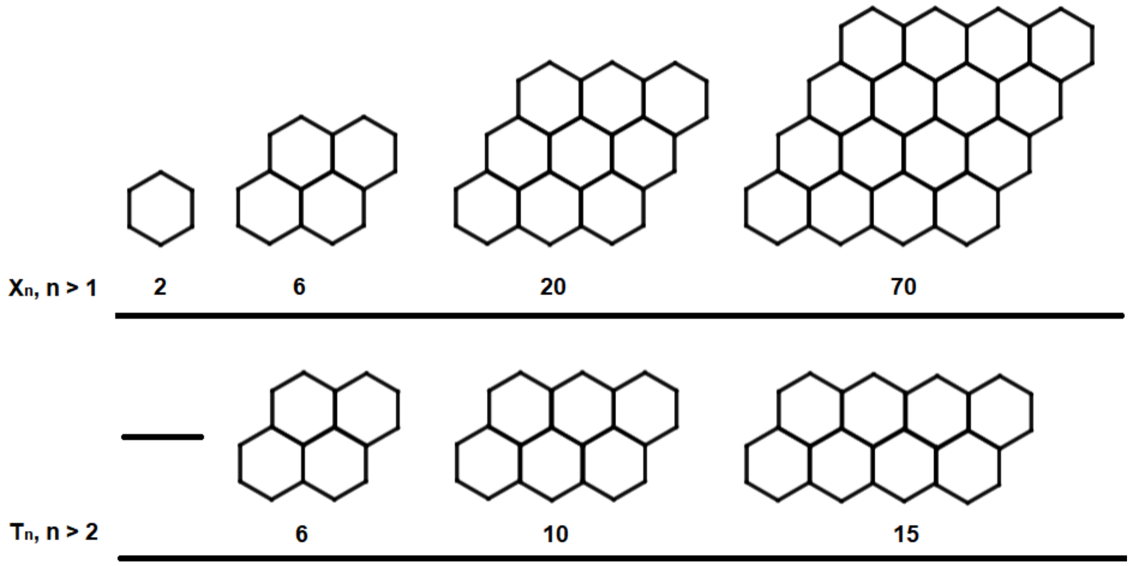
1 7 21 35 35 21 7 1

1 8 28 56 70 56 28 8 1

Slika 3.19: Pascalov trokut

Već smo prije vidjeli da je broj savršenih sparivanja u benzenoidnom paralelogramu $B_{m,n}$ jednak $\phi(B_{m,n}) = \binom{n+m}{n}$. Ukoliko promatramo samo benzenoidne paralelograme koji imaju isti broj redaka i stupaca (benzenoidni rombovi), dobijemo formulu za broj savršenih sparivanja $\phi(B_n) = \binom{2n}{n}$ koja odgovara nizu centralnih binomnih koeficijenata.

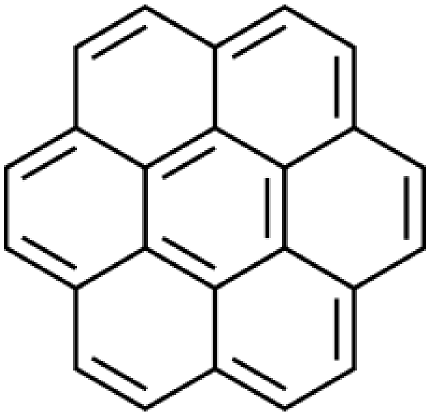
Ukoliko pak promatramo samo benzenoidne paralelograme koji se sastoje od 2 retka i $n-1$ stupaca, dobijemo formulu za broj savršenih sparivanja $\phi(B_{2,n-1}) = \binom{n-1+2}{2} = \binom{n+1}{2} = \frac{n(n+1)}{2}$ koja odgovara nizu trokutastih brojeva.



Slika 3.20: Centralni binomni koeficijenti i trokutasti brojevi kao broj savršenih sparivanja u benzenoidnim grafovima

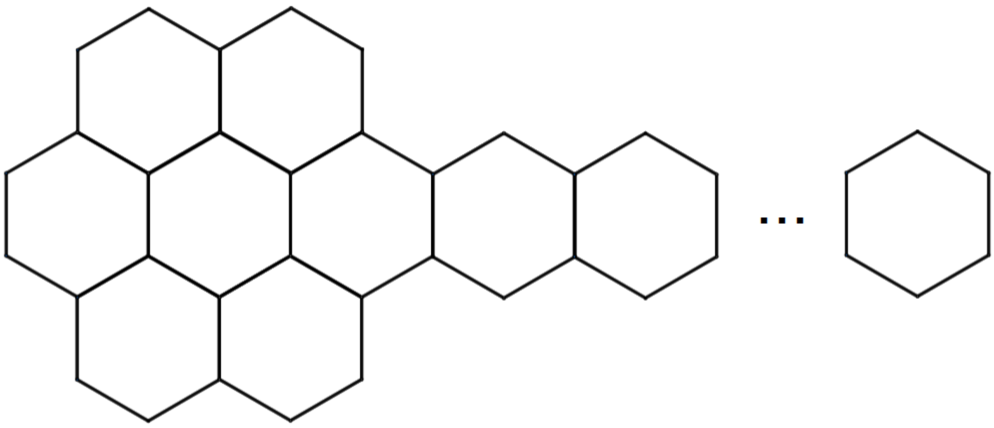
3.6 Koronen s linearnim lancem

Koronen je policiklički aromatski ugljikovodik koji se sastoji od sedam benzenoidnih prstena poredanih kao na slici ispod (Slika 3.21).



Slika 3.21: Koronen

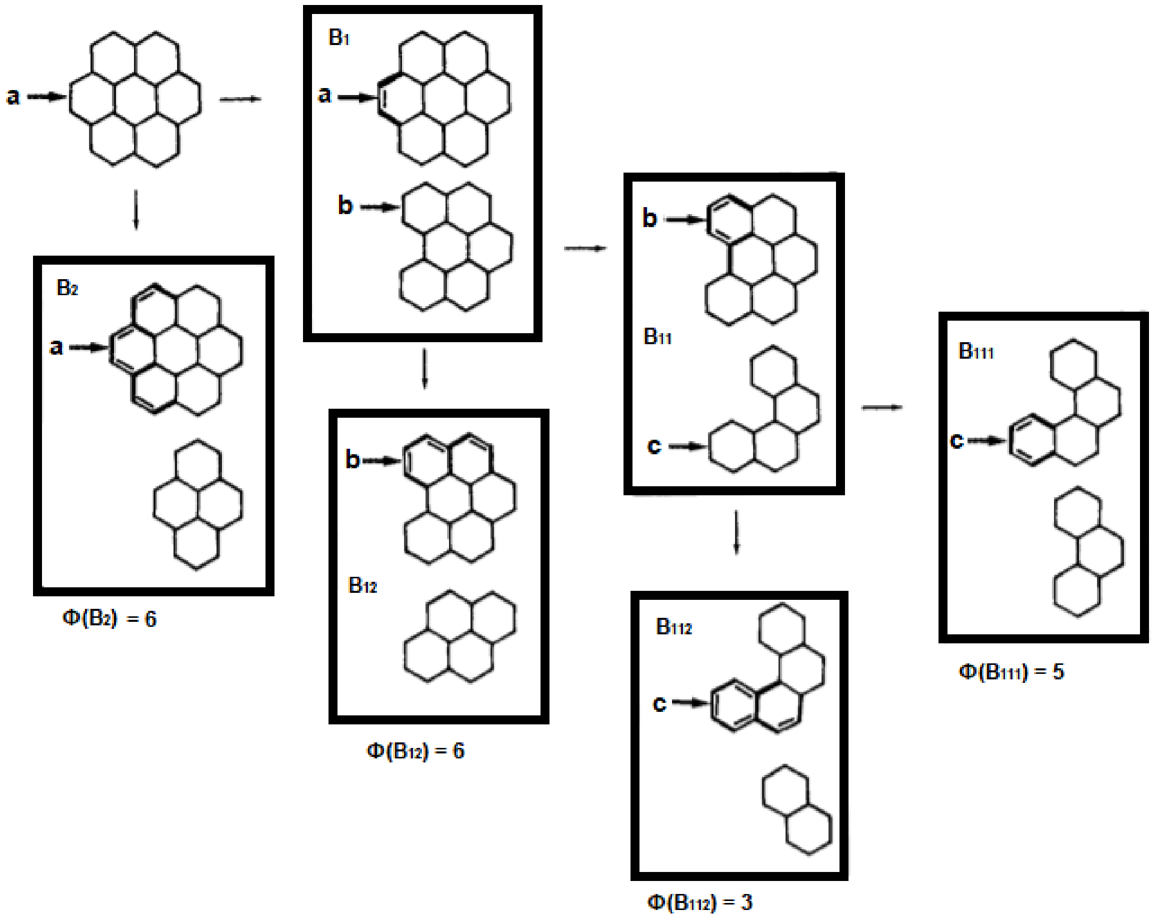
U ovom poglavlju izvest ćemo formulu za broj savršenih sparivanja u koronenu kojem je dodan jedan linearni lanac duljine n (Slika 3.22). Označimo ga s K_n.



Slika 3.22: Koronen s linearnim lancem K_n

Izračunajmo najprije broj savršenih sparivanja u koronenu. Za to ćemo koristiti metodu fragmentacije koju smo opisali u Poglavlju 1.

Navedena metoda za izračunavanje broja savršenih sparivanja u koronenu prikazana je na slici 3.23.

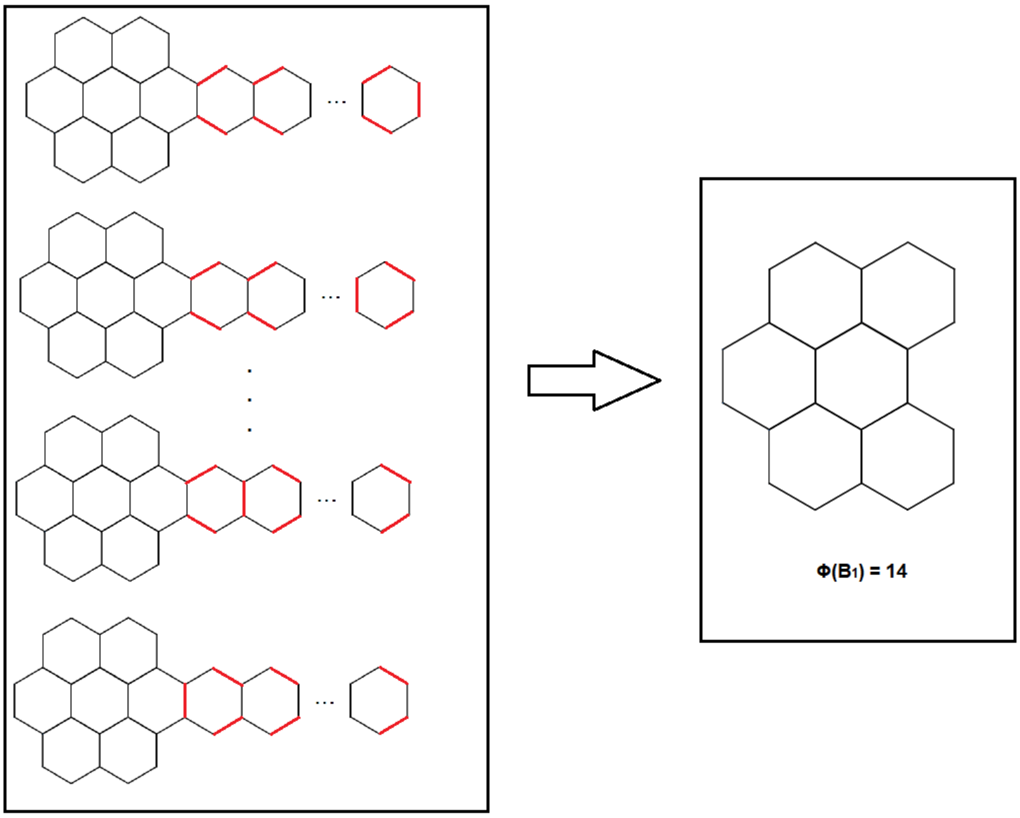


Slika 3.23: Izračunavanje broja savršenih sparivanja u koronenu metodom fragmentacije

Sa slike 3.23 možemo vidjeti da je taj broj jednak :

$$
\begin{aligned}
\Phi(K_0) &= \Phi(B_1) + \Phi(B_2) \\
&= 6 + \Phi(B_{12}) + \Phi(B_{11}) \\
&= 6 + 6 + \Phi(B_{111}) + \Phi(B_{112}) \\
&= 6 + 6 + 5 + 3 = 20.
\end{aligned}
\tag{3.9}
$$

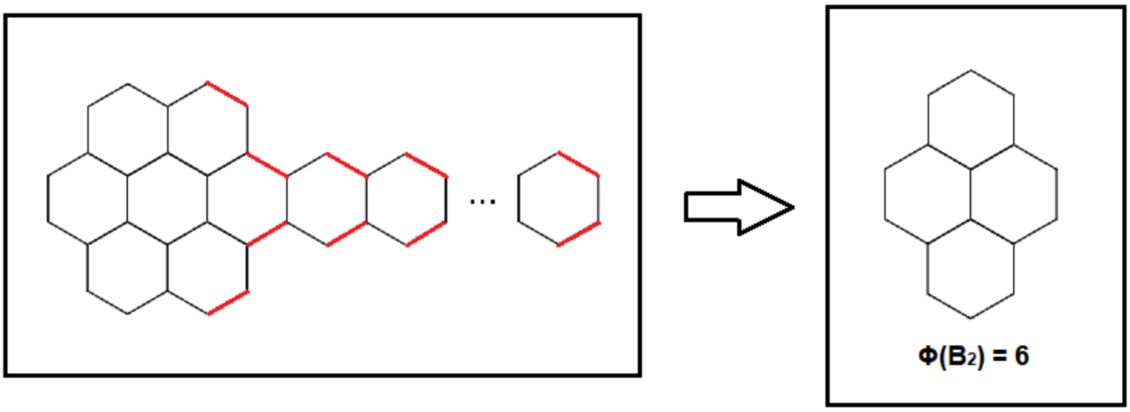
Na sličan način odredit ćemo i broj savršenih sparivanja u K_n. Pretpostavimo najprije da je u savršeno sparivanje uključen jedan vertikalni brid u linearnom lancu. Od prije znamo da možemo odabrati samo jedan vertikalni brid u linearnom lancu te da on jedinstveno određuje savršeno sparivanje za cijeli taj lanac. Vertikalni brid možemo odabrati na $n + 1$ načina. Uklanjanjem svih forsiranih bridova metodom fragmentacije, dolazimo do podgrafa kojeg ćemo označiti s B_1.



Slika 3.24: B_1

Za B_1 lako možemo izračunati broj savršenih sparivanja, a to je 14. Dakle, u ovom slučaju imamo ukupno $14(n+1)$ savršenih sparivanja.

U drugom slučaju, pretpostavimo da niti jedan vertikalni brid nije sadržan u savršenom sparivanju. Ovaj slučaj prikazan je na slici 3.25. Uklanjanjem svih forsiranih bridova metodom fragmentacije, dolazimo do podgrafa kojeg ćemo označiti s B_2.



Slika 3.25: B_2

Za B_2 lako možemo izračunati broj savršenih sparivanja, a to je 6.

$$\Phi(K_n) = (n+1)\Phi(B_1) + \Phi(B_2) = 14(n+1) + 6. \tag{3.10}$$

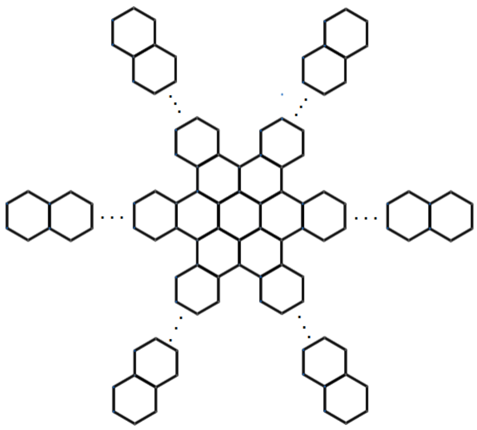
Dakle, vrijedi sljedeća propozicija:

Propozicija 3.6.1. *Broj savršenih sparivanja u K_n, koronenu kojem je dodan linearni lanac duljine n, jednak je:*

$$\Phi(K_n) = 14n + 20. \tag{3.11}$$

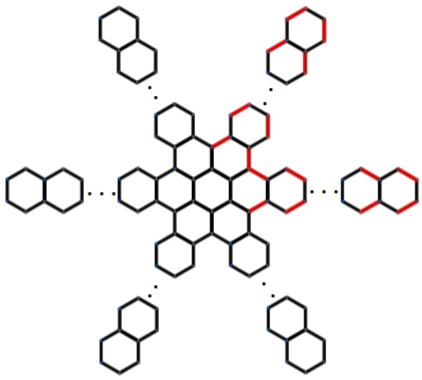
3.7 Pahulja s kracima duljine n

U ovom poglavlju izvest ćemo formulu za broj savršenih sparivanja u koronenu kojem je dodano šest linearnih lanaca duljine n (Slika 3.26). Označimo ga s ${}_6K_n$.



Slika 3.26: ${}_6K_n$

Kao što smo već vidjeli u prethodnom poglavlju, za svaki linearni lanac možemo promatrati je li neki njegov dijeljeni brid sadržan u nekom savršenom sparivanju ili nije. Primijetimo najprije da je nemoguće savršeno sparivanje M u kojem niti jedan od dva susjedna linearna lanca ne sadrži dijeljeni brid koji je u M. (Slika 3.27)



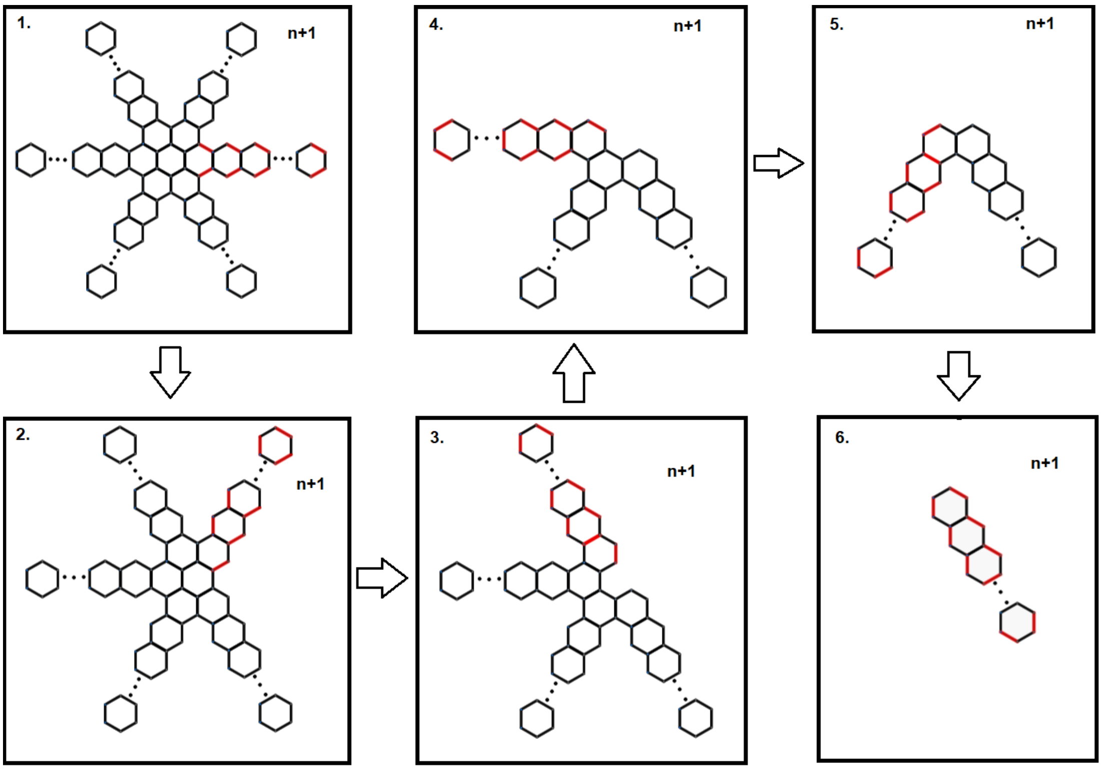
Slika 3.27: Dva susjedna lanca ne sadrže niti jedan dijeljeni brid koji je u M

Iz toga zaključujemo da jedno savršeno sparivanje grafa ${}_6K_n$ može sadržavati najviše tri linearna lanca čiji dijeljeni bridovi nisu u tom savršenom sparivanju. Prema tome, izvod formule za broj savršenih sparivanja podijelit ćemo na četiri slučaja:

1. Savršena sparivanja u kojima je sadržan po jedan dijeljeni brid iz svakog linearnog lanca
2. Savršena sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid jednog linearnog lanca
3. Savršena sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid dva linearna lanca
4. Savršena sparivanja koja koji ne sadrže niti jedan dijeljeni brid tri linearna lanca

1. slučaj

Broj savršenih sparivanja u kojima je sadržan po jedan dijeljeni brid iz svakog linearnog lanca izvest ćemo pomoću metode fragmentacije.



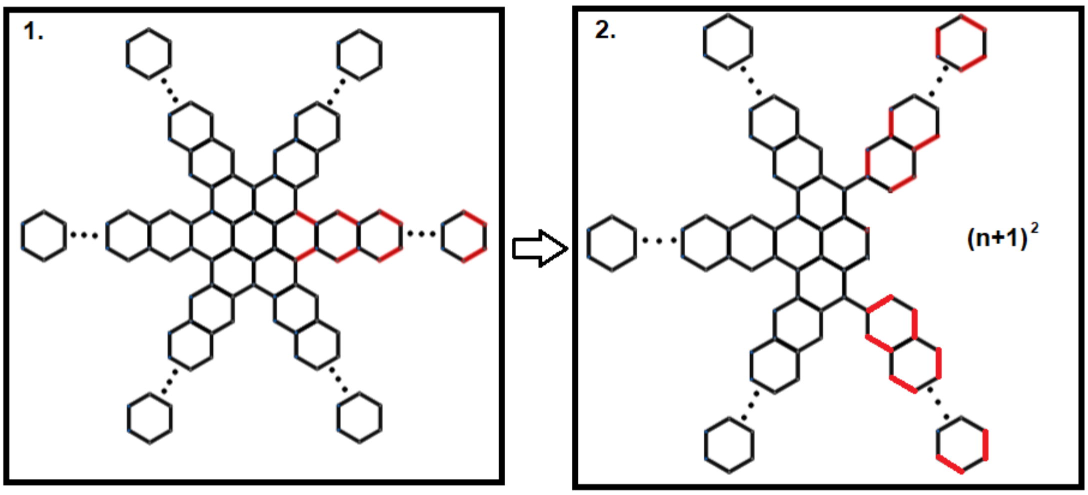
Slika 3.28: Metoda fragmentacije za 1. slučaj

Od prije znamo da odabir dijeljenog brida koji se nalazi u savršenom sparivanju jedinstveno određuje koji se preostali bridovi toga lanca nalaze u savršenom sparivanju, a koji ne. Taj dijeljeni brid možemo odabrati na $(n + 1)$ načina u svakom od šest koraka metode fragmentacije. Iz toga slijedi da je broj savršenih sparivanja grafa ${}_6K_n$ u kojima je sadržan po jedan dijeljeni brid iz svakog linearnog lanca jednak $(n + 1)^6$.

2. slučaj

U drugom slučaju izvodimo formulu za broj savršenih sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid jednog linearnog lanca te sadrže po jedan dijeljeni brid iz preostalih pet linearnih lanaca. Za izvod formule opet koristimo metodu fragmentacije.

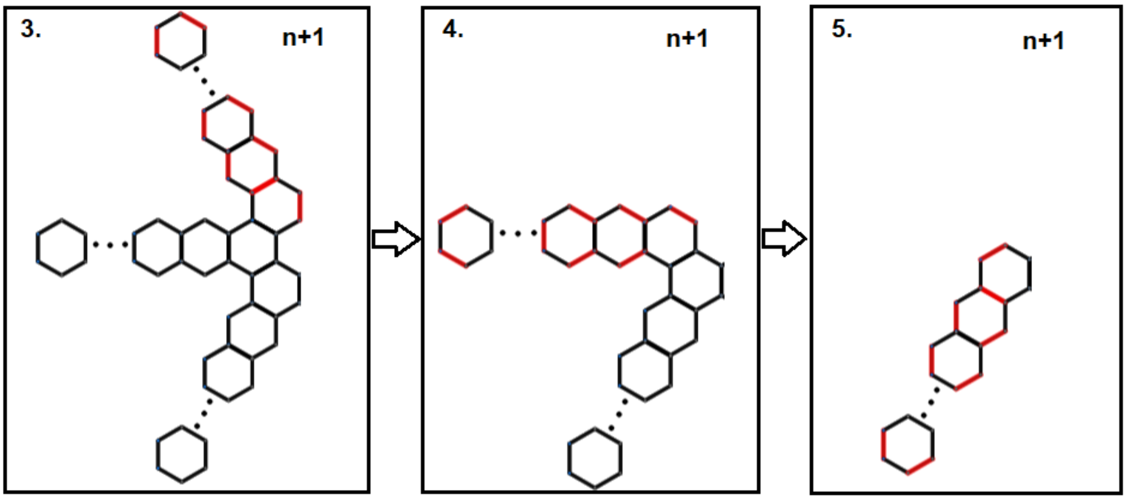
Promatramo najprije linearni lanac čiji dijeljeni bridovi nisu sadržani u savršenom sparivanju. Imamo 6 mogućnosti za odabir tog lanca.



Slika 3.29: Metoda fragmentacije za 2. slučaj

Za sve bridove u odabranom lancu je jedinstveno određeno jesu li sadržani u savršenom sparivanju ili nisu tj. samo je jedna mogućnost da niti jedan dijeljeni brid u određenmo lancu ne bude u savršenom sparivanju. Uklanjanjem svih forsiranih bridova dobijemo sliku 2. Sada svi preostali lanci moraju imati po jedan dijeljeni brid u savršenom sparivanju.

U svakom od preostalih 5 linearnih lanaca dijeljeni brid možemo odabrati na $(n + 1)$ načina. Preostali koraci metode fragmentacije prikazani su na sljedećoj slici. (Slika 3.30)



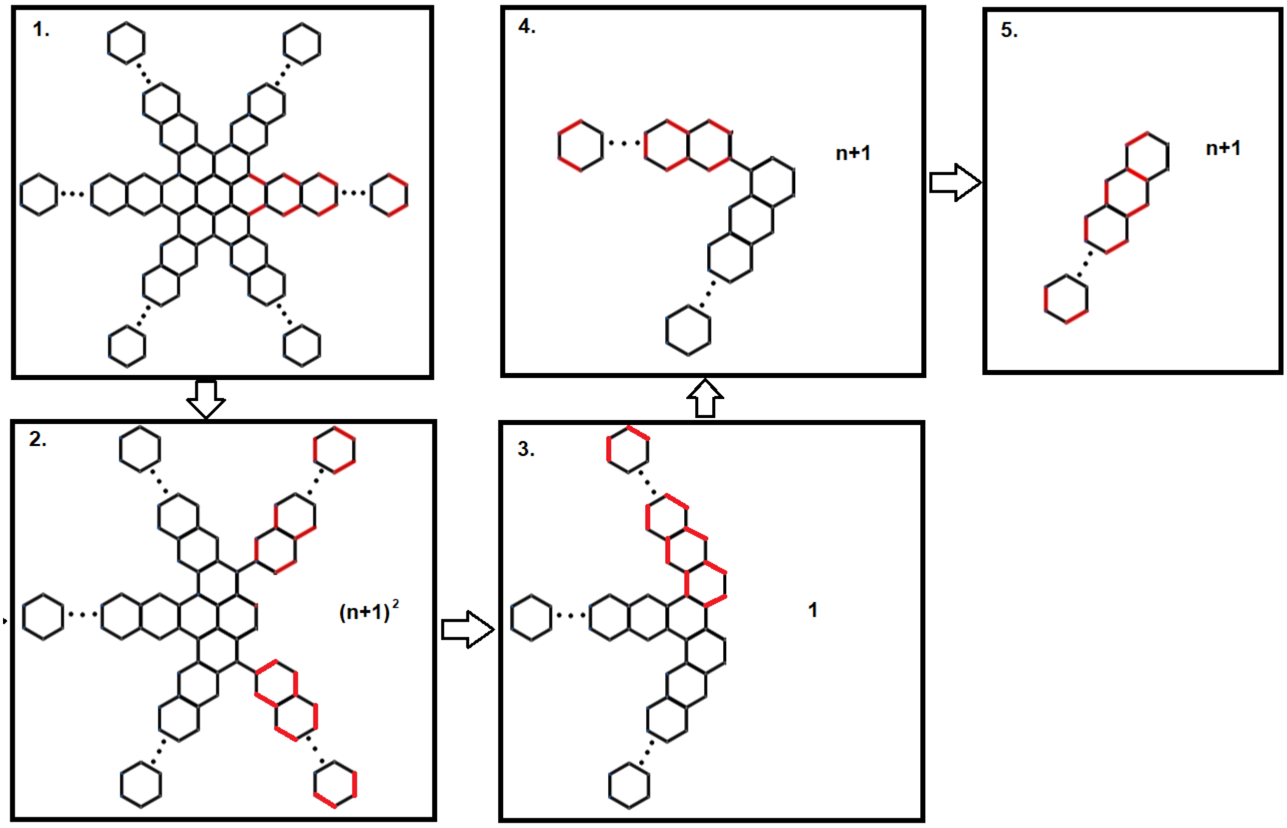
Slika 3.30: Metoda fragmentacije za 2. slučaj

Iz svega navedenog slijedi da je broj savršenih sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid jednog linearnog lanca te po jedan dijeljeni brid iz preostalih pet linearnih lanaca jednak $6(n + 1)^5$.

3. slučaj

U trećem slučaju izvodimo formulu za broj savršenih sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid dva linearna lanca te sadrže po jedan dijeljeni brid iz preostala četiri linearna lanca. Kao i u prethodna dva slučaja, opet koristimo metodu fragmentacije.

Već smo uočili da je nemoguće savršeno sparivanje M u kojem dva susjedna linearna lanca ne sadrže niti jedan dijeljeni brid koji je u M. Prema tome, imamo $\frac{6 \cdot 3}{2} = 9$ mogućnosti kako odabrati ta dva lanca. Za sve bridove u odabrana dva lanca je jedinstveno određeno jesu li sadržani u savršenom sparivanju ili nisu tj. samo je jedna mogućnost za svaki od ta dva lanca da niti jedan dijeljeni brid ne bude u savršenom sparivanju. U preostala četiri lanca imamo opet po $(n+1)$ mogućnosti kako odabrati dijeljeni brid koji će biti u savršenom sparivanju. Iz svega navedenog zaključujemo da je broj savršenih sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid dva linearna lanca te sadrže po jedan dijeljeni brid iz preostala četiri linearna lanca jednak $9(n + 1)^4$.



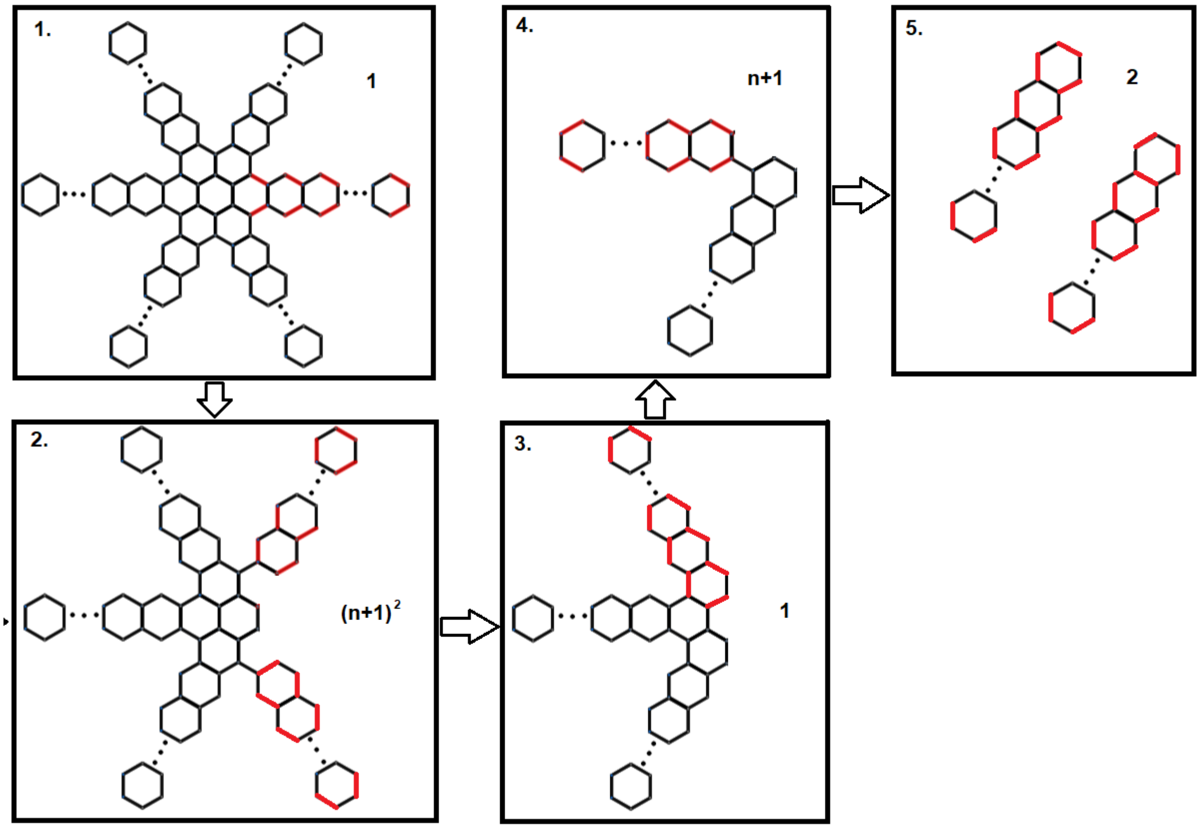
Slika 3.31: Metoda fragmentacije za 3. slučaj

4. slučaj

U četvrtom slučaju izvodimo formulu za broj savršenih sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid tri linearna lanca te sadrže po jedan dijeljeni brid iz preostala tri linearna lanca. Ovdje također koristimo metodu fragmentacije.

Lako je vidjeti da imamo dvije mogućnosti kako odabrati tri lanca čiji dijeljeni bridovi neće biti u savršenom sparivanju. Za sve bridove u odabrana tri lanca je jedinstveno određeno jesu li sadržani u savršenom sparivanju ili nisu tj. samo je jedna mogućnost za svaki od ta tri lanca da niti jedan njihov dijeljeni brid ne bude u savršenom sparivanju. U preostala tri lanca imamo opet po $(n + 1)$ mogućnosti kako odabrati dijeljeni brid koji će biti u savršenom sparivanju uz iznimku u zadnjem koraku gdje ostaje i centralni šesterokut koronena u kojem imamo moguća dva savršena sparivanja.

Iz svega navedenog zaključujemo da je broj savršenih sparivanja koja ne sadrže niti jedan dijeljeni brid tri linearna lanca te sadrže po jedan dijeljeni brid iz preostala tri linearna lanca jednak $2 \cdot 2(n+1)^3$.



Slika 3.32: Metoda fragmentacije za 4. slučaj

Iz četiri opisana slučaja dolazimo do izvoda formule za broj savršenih sparivanja u grafu ${}_6K_n$:

$$\begin{aligned}\Phi({}_6K_n) &= (n+1)^6 + 6(n+1)^5 + 9(n+1)^4 + 4(n+1)^3 \\ &= (n+1)^3((n+1)^3 + 6(n+1)^2 + 9(n+1) + 4) \\ &= (n+1)^3(n^3 + 3n^2 + 3n + 1 + 6n^2 + 12n + 6 + 9n + 9 + 4) \\ &= (n+1)^3(n^3 + 9n^2 + 24n + 20) \\ &= (n+1)^3(n+2)^2(n+5).\end{aligned} \tag{3.12}$$

Propozicija 3.7.1. *Broj savršenih sparivanja u pahulji s kracima duljine n* ${}_6K_n$ *jednak je*

$$\Phi({}_6K_n) = (n+1)^3(n+2)^2(n+5). \tag{3.13}$$

Poglavlje 4

Zaključak

U ovom radu izveli smo formule za broj savršenih sparivanja u raznim klasama benzenoidnih grafova. Savršeno sparivanje je sparivanje u kojem je svaki vrh grafa incidentan s točno jednim bridom u sparivanju. Benzenoidni grafovi su matematička reprezentacija važne klase kemijskih spojeva poznatih kao policiklički aromatički ugljikovodici, a broj savršenih sparivanja u nekom benzenoidnom grafu povezan je sa stabilnošću navedenih kemijskih spojeva. Što je broj savršenih sparivanja u nekom benzenoidnom grafu veći, policiklički aromatski ugljikovodik kojeg taj graf predstavlja je stabilniji.

O broju savršenih sparivanja u klasama benzenoidnih grafova koje smo promatrali zaključili smo sljedeće:

- Linearni lanac: $\Phi(L_n) = n + 1$
- Cik-cak lanac: $\Phi(Z_n) = F_{n+2}$
- Benzenoidni paralelogram: $\Phi(B_{m,n}) = \binom{m+n}{m} = \binom{m+n}{n}$
- Benzenoidni trokut: $\Phi(T_n) = C_{n+1}$
- Koronen s linearnim lancem: $\Phi(K_n) = 14(n + 1) + 6$
- Pahulja s kracima duljine n: $\Phi({}_6K_n) = (n + 1)^3(n + 2)^2(n + 5)$

Bibliografija

[1] `https://hr.wikipedia.org`.

[2] `https://mis.element.hr`.

[3] `http://e.math.hr`.

[4] S.J. Cyvin i I. Gutman, *Kekule Structures in Benzenoid Hydrocarbons*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1988.

[5] T. Došlić, *Perfect Matchings in Lattice Animals and Lattice Paths with Constraints*, CROATICA CHEMICA ACTA br. 78 (2005), br. 2, 251–259.

[6] D. Veljan, *Kombinatorna i diskretna matematika*, Algoritam, 2001.

Sažetak

U ovom diplomskom radu izveli smo formule za broj savršenih sparivanja u nekim klasama benzenoidnih grafova. Na početku smo naveli osnovne pojmove vezane za teoriju grafova te definirali savršeno sparivanje. Nakon toga smo uveli pojmove benzenoidni sustav i benzenoidni graf i objasnili povezanost između njih. U nastavku smo uzeli šest klasa benzenoidnih grafova te odredili broj savršenih sparivanja u njima. Grafovi koje smo promatrali su L_n koji se sastoji od n šesterokuta pozicioniranih jedan do drugoga, Z_n koji sadrži n šesterokuta posloženih u cik-cak poziciji, B_n koji sadrži nxm šesterokuta posloženih u obliku paralelograma, T_n koji se sastoji od šesterokuta poredanih u n redova na način da prvi redak sadrži n šesterokuta, a svaki sljedeći redak po jedan šesterokut manje, K_n koji se sastoji od koronena kojem je dodan jedan linearni lanac duljine n te za ${}_6K_n$ koji se sastoji od koronena kojemu je dodano šest linearnih lanaca duljine n. Osim toga, pokazali smo neke nizove brojeva koji se mogu dobiti kao broj savršenih sparivanja u navedenim klasama grafova.

Summary

In this graduate thesis we calculate the number of perfect matchings in some classes of benzenoid graphs. At the beginning we mention the basic concepts related to graph theory and define the perfect matching in a graph. After that we define the concepts of benzenoid system and benzenoid graph and explaine the connection between them. After that, we pointed out six classes of benzenoid graphs on which we will calculate the number of perfect matching. Graphs that we observed are L_n which consists of n hexagons positioned next to each other, Z_n which consists of n hexagons positioned in zigzag position, B_n which consists $n \times m$ hexagons positioned in a shape of parallelogram, T_n consisting of n rows of hexagons, with the number of hexagons in a row decreasing by one from n in the lowest row to one in the uppermost row, each row shifted for one and a half hexagon to the right, K_n which consists of coronene to which a linear chain of length n is added and ${}_6K_n$ which consists of coronene to which six linear chains of length n are added. In addition, we have shown some sequences of numbers which can be obtained as the number of perfect matching in the given graph classes.

Životopis

Rođena sam 23.01.1993. godine u Rijeci. Osnovnu školu pohađala sam u PO dr. Milana Anića u Krasnu. 2007. godine upisujem opći smjer Gimnazije u Senju. Nakon završetka srednje škole, upisujem Preddiplomski studij matematike na Prirodoslovno - matematičkom fakultetu kojeg završavam 2017. godine. Diplomski studij matematike i računarstva upisujem godinu dana kasnije. Za vrijeme studiranja radila sam razne studentske poslove, od kojih bih izdvojila pripremu učenika za državnu maturu iz matematike u sklopu nekoliko srednjih škola, individualno podučavanje učenika te posljednje dvije godine rad kao software developer u Ericssonu Nikola Tesla.