

**HOSOYA VE MERRIFIELD-SIMMONS
İNDEKSLERİNİN MOLEKÜLER
YAPILARDA ANALİZİ**

Mert Sinan ÖZ



T. C.
BURSA ULUDAĞ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**HOSOYA VE MERRIFIELD-SIMMONS İNDEKSLERİNİN MOLEKÜLER
YAPILARDA ANALİZİ**

Mert Sinan ÖZ
0000-0002-6206-0362

Prof. Dr. İ. Naci CANGÜL
(Danışman)

DOKTORA TEZİ
MATEMATİK ANABİLİM DALI

BURSA-2022
Her Hakkı Saklıdır

TEZ ONAYI

Mert Sinan ÖZ tarafından hazırlanan “Hosoya ve Merrifield-Simmons İndekslerinin Moleküler Yapılarda Analizi” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından oy birliği/oy çokluğu ile Bursa Uludağ Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı’nda **DOKTORA TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Danışman : Prof. Dr. İ. Naci CANGÜL

Üye: Prof. Dr. İ. Naci CANGÜL 0000-0002-0700-5774 Bursa Uludağ Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Matematik Anabilim Dalı	İmza
Üye: Prof. Dr. Musa DEMİRCİ 0000-0002-6439-8439 Bursa Uludağ Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Matematik Anabilim Dalı	İmza
Üye: Prof. Dr. Saliha ŞAHİN 0000-0003-2887-5688 Bursa Uludağ Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Anabilim Dalı	İmza
Üye: 0000-0000-0000-0000	İmza
Üye: 0000-0000-0000-0000	İmza

Yukarıdaki sonucu onaylarım

Prof. Dr. Hüseyin Aksel EREN

Enstitü Müdürü

B.U.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- tez içindeki bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda ilgili eserlere bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu,
- atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapmadığımı,
- bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversite veya başka bir üniversitede başka bir tez çalışması olarak sunmadığımı

beyan ederim.

28/07/2022

İmza

Mert Sinan ÖZ

ÖZET

Doktora Tezi

HOSOYA VE MERRIFIELD-SIMMONS İNDEKSLERİNİN MOLEKÜLER YAPILARDA ANALİZİ

Mert Sinan ÖZ

Bursa Uludağ Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. İ. Naci CANGÜL

Bu tez çalışmasında genel anlamda benzenoid sistemler üzerinde çalışılarak kimyasal graf teori alanında önemli uygulamaları olan Hosoya indeksi ve Merrifield-Simmons indeksinin hesabına odaklanılmıştır. Başlangıç olarak verilen her iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin $\forall k \geq 0$ için k -eşleme sayısını ve k -bağımsızlık sayısını hesaplamada kullanılan her biri elde edilen doğal sayı içerikli kare matrisler ile bir vektör çarpımına dayanan iki ayrı metot sunulmuş ve metotların uygulanabilirliği için MATLAB programında kodlar yazılmıştır. Çalışmanın temel kısmı olarak, verilen her iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin Merrifield-Simmons indeksini doğal sayı içerikli matrisler ile bir vektörün uygun bir çarpımı yoluyla hesaplayan metot önerilmiştir. Devamında, iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin bir türü olan çift katlı benzenoid zincirlere özgü Hosoya ve Merrifield-Simmons indekslerinin hesabına yönelik her biri ilgili indeksi hesaplamada kullanılan iki ayrı metot önerilmiştir. Son olarak, R_n ve P_n sembolleriyle sunulan iki ayrı özel tipteki iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem türüne yönelik hem Hosoya hem de Merrifield-Simmons indekslerinin hesabı, bir matrisin bir kuvveti ile bir vektörün çarpımı şeklinde ifade edilen açık bir fonksiyon olarak sunulmuştur.

Anahtar Kelimeler: Hosoya indeksi, Merrifield-Simmons indeksi, hekzagonal sistemler, benzenoid sistemler

2022, vii + 187 sayfa.

ABSTRACT

PhD Thesis

ANALYSIS OF THE HOSOYA AND THE MERRIFIELD-SIMMONS INDICES ON MOLECULAR STRUCTURES

Mert Sinan ÖZ

Bursa Uludag University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Mathematics

Supervisor: Prof. Dr. I. Naci CANGUL

In this thesis, the focus is on the computation of the Hosoya index and Merrifield-Simmons index, which have significant applications in the field of chemical graph theory, by working on benzenoid systems in general. For $\forall k \geq 0$ of each given cata-condensed benzenoid system, two different methods are presented, each based on the product of square matrices with natural numbers and a vector, used to compute the k -matching number and k -independence number, and for applicability of the methods, codes are written in MATLAB. As the main part of the study, a method that computes the Merrifield-Simmons index of each given cata-condensed benzenoid system by means of an appropriate product of matrices with natural numbers and a vector is proposed. Afterward, two different methods are proposed for the computation of the Hosoya and the Merrifield-Simmons indices specific to double benzenoid chains, which are a type of peri-condensed benzenoid chains, each of which is used to compute the relevant index. Finally, the computation of both the Hosoya and the Merrifield-Simmons indices for two special types of peri-condensed benzenoid systems represented by R_n ve P_n is presented as an explicit function expressed as the product of a power of a matrix and a vector.

Keywords: Hosoya index, Merrifield-Simmons index, topological indices, hexagonal systems, benzenoid systems

2022, vii + 187 pages.

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Lisansüstü sürecimin başından itibaren ilerlemiş olduğum yolda sahip olduğu engin akıl, bilgi ve tecrübeleriyle her an yanımda olan, düştüğümde kaldıran, başardığımda daha ilerisine yönelten, danıştığım her konuda önümü görmemi sağlayan, akademik kariyerine imrendiğim çok değerli hocam Prof. Dr. İsmail Naci CANGÜL'e;

Hayatımı paylaştığım, gösterdiği sınırsız sevgisi, saygısı, sabrı ve güveni ile bana her koşulda destek olan, güç katan sevgili eşim Hilal GİRGİN ÖZ'e, hayatımın her aşamasında bana maddi, manevi tüm imkanları sağlamak için çalışan, her daim destek olan, sabır gösteren, karşılıksız sayısız fedakarlık yapan kıymetli annem Zuhal ÖZ'e, babam Kadri ÖZ'e ve abim Ulaş ÖZ'e;

Gösterdikleri anlayış ile tez sürecimin yanında huzurlu bir çalışma ortamının oluşmasında büyük emekleri olan 2017 yılından itibaren araştırma görevlisi olarak görev yapmış olduğum Bursa Teknik Üniversitesi Matematik Bölümü öğretim üyesi hocalarıma ve araştırma görevlisi arkadaşlarıma, ayrıca Makine Mühendisliği Bölümü ve İnşaat Mühendisliği Bölümü'nde görev yapan araştırma görevlisi dostlarıma;

Ayrıca, üzerimde maddi ve manevi emekleri olan, isimlerini tek tek bu kısımda zikredemesem de hayatıma bir şekilde dokunan tüm sevdiklerime;

Son olarak 2211-Yurt İçi Doktora Burs Programı kapsamında tez çalışmamı destekleyen TÜBİTAK'a en içten teşekkürlerimi sunmak isterim.

Mert Sinan ÖZ

28/07/2022

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR.....	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SİMGELER DİZİNİ.....	vi
1. GİRİŞ	1
1.1. Tarihsel Gelişim	1
1.2. Topolojik İndeks Kavramı ve Uygulamaları.....	7
1.3. Hosoya İndeksi ve Merrifield-Simmons İndeksi	9
1.4. Literatür Taraması.....	10
1.5. Tezin Amacı	13
2. KURAMSAL TEMELLER	16
2.1. Ön Bilgiler.....	16
2.2. Benzenoid Sistemler.....	20
2.3. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemler	21
2.4. İç Noktalı-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemler	22
2.5. Benzenoid Zincirler.....	23
2.6. Çift Katlı Benzenoid Zincirler	25
2.7. Hosoya İndeksi.....	29
2.8. Merrifield-Simmons İndeksi	29
3. MATERYAL ve YÖNTEM	31
3.1. Hosoya ve Merrifield-Simmons İndeksleri için Rekürans Bağlılıkları.....	31
3.2. Hosoya Vektörü	37
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI ve BULGULAR	39
4.1. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin k -Eşleme Sayılarının Hesaplanması	39
4.2. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin k -Bağımsızlık Sayısının Hesaplanması	58
4.3. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin Merrifield-Simmons İndeks Hesabı.....	80
4.4. Çift Katlı Benzenoid Zincirlerin Hosoya İndeksinin Hesaplanması.....	91
4.5. Çift Katlı Benzenoid Zincirlerin Merrifield-Simmons İndeksinin Hesaplanması	

4.6. Bazı Özel Tipteki İç Noktalı-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin Hosoya ve Merrifield-Simmons İndekslerinin Hesaplanması	129
5. TARTIŞMA ve SONUÇ	146
KAYNAKLAR	148
EKLER.....	153
ÖZGEÇMİŞ	186

SİMGELER DİZİNİ

Simge

V

E

G

$d(v)$

P_j

C_j

$N_G(v)$

$N_G[v]$

H_j

B_h

L_h

Z_h

$H(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$

$H(\tau, \tau, \tau, \tau, \tau)$

$H(\tau, \gamma, \tau, \gamma, \tau)$

$m(G, k)$

$n(G, k)$

$Z(G)$

$i(G)$

Açıklama

V köşe kümesi

E kenar kümesi

Graf

v köşesinin derecesi

j köşeli patika graf

j köşeli devir graf

v köşesinin komşuluk kümesi

v köşesini de içeren v köşesinin komşuluk kümesi

Benzenoid sistemde bulunan j . hegzagon

h hegzagonlu benzenoid zincir

h hegzagonlu lineer benzenoid zincir

h hegzagonlu zik-zak benzenoid zincir

h naftalinli çift katlı benzenoid zincir

6 naftalinli çift katlı lineer benzenoid zincir

6 naftalinli çift katlı zik-zak benzenoid zincir

G grafindaki k -eşleme sayısı

G grafindaki k -bağımsızlık sayısı

G grafının Hosoya indeksi

G grafının Merrifield-Simmons indeksi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 2.1. Benzenoid sistem	21
Şekil 2.2. İç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem	22
Şekil 2.3. İç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem	23
Şekil 2.4. Benzenoid zincir B_{11}	24
Şekil 2.5. Lineer benzenoid zincir L_6	25
Şekil 2.6. Zik-zak benzenoid zincir Z_6	25
Şekil 2.7. Çift katlı benzenoid zincir	26
Şekil 2.8. Çift katlı benzenoid zincirler için kaynaşma tipleri.....	27
Şekil 2.9. Çift katlı lineer benzenoid zincir $H(\tau, \tau, \tau, \tau)$	28
Şekil 2.10. Çift katlı zik-zak benzenoid zincir $H(\tau, \gamma, \tau, \gamma, \tau)$	28
Şekil 3.1. C_6 devir grafi için Hosoya indeksi rekürans ifadesi	34
Şekil 3.2. C_6 devir grafi için Merrifield-Simmons indeksi rekürans ifadesi.....	34
Şekil 4.1. Teoremler 4.1.3-4.1.5, 4.2.3-4.2.5, 4.3.3-4.3.5 için kullanılacak iç noktasız - yoğunlaştırılmış benzenoid sistem formu türleri.....	40
Şekil 4.2. Teoremler 4.1.6, 4.2.6, 4.3.6 ve Sonuçlar 4.1.7, 4.2.7 için kullanılacak iç noktasız- yoğunlaştırılmış benzenoid sistem formu türü	48
Şekil 4.3. İç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem	57
Şekil 4.4. Bölüm 4.4 ve Bölüm 4.5'te sunulacak olan tüm teoremler ve sonuçlarda kullanılacak olan çift katlı benzenoid zincir formu türleri	93
Şekil 4.5. Çift katlı benzenoid zincir $G = H(\tau, \gamma, \gamma)$	106
Şekil 4.6. Çift katlı benzenoid zincir $G = H(\tau, \gamma, \gamma, \tau)$	127
Şekil 4.7. İç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem R_n	129
Şekil 4.8. İç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem P_n	130
Şekil 4.9. R_n sisteminin graf yapısı	130
Şekil 4.10. P_n sisteminin graf yapısı	130

1. GİRİŞ

1.1. Tarihsel Gelişim

Modelleme, matematiğin bilinen en eski yazıtları olan “*Plimpton 322*” ve “*Rhind Papirüsü*” adlarıyla anılan eserlerin ait olduğu M.Ö 1500-2000 yıllarından bu yana insanların günlük yaşantılarında karşılaştıkları farklı türden problemleri daha kolay ifade edebilmek, daha anlaşılır kılmak, analiz edebilmek, problem bileşenlerinin birbirlerine olan etkilerini daha iyi kavrayabilmek ve problemleri çözebilmek gibi amaçlar doğrultusunda başvurulan en etkili yöntemlerden biri olmuştur.

Modelleme, doğa bilimlerinden mühendisliğe, sağlık bilimlerinden sanata hemen hemen tüm alanlarda gerçekte var olan durumun bir simülasyonu olarak karşımıza çıkmaktadır.

Graf teori, diğer bilinen ifadesi ile çizge teori, temelde nesneler ve nesneler arasındaki çeşitli ilişkilerin, her bir nesnenin bir köşe ve nesneler arasındaki her bir ilişkinin de bir kenar ile temsil edilerek modellenmesiyle elde edilen ve graf (çizge) olarak adlandırılan yapılar üzerinde çalışmaktadır.

Graf teorisinin doğuşu ünlü fizikçi Gustav Kirchhoff ve ünlü filozof Immanuel Kant’ın da doğum yeri olan ve 2. Dünya Savaşı dolayısıyla da önemli bir tarihe sahip olan Königsberg şehrine dayanmaktadır. Königsberg halkının bir oyun olarak geliştirdiği ve çeşitli çözümler deneyip sonuç alamadığı, günümüzde “*Königsberg’in yedi köprüsü*” ismiyle bilinen probleme tüm zamanların muhtemel en üretken matematikçisi olan Leonhard Euler’in ilgisi bu doğuşun başlıca etmeni olmuştur. Problemde Königsberg şehrini 4 adet kara parçası olarak ayıran Pregel nehri üzerinde bulunan 7 adet köprüye odaklanılmaktadır. Problem, herhangi bir kara parçasından başlanarak her köprüden bir ve yalnız bir defa geçmek şartıyla başlanılan kara parçasına ulaşabilecek şekilde bir dolanımın var olup olmadığını araştırmaktadır. 1736 yılında Euler bu formda bir

dolanımın var olamayacağı sonucuna büyük ve küçük harf temsilleriyle kurduğu bir model ile ulaşmış ve problemi çözmüştür. Bu çözümde Euler ifade edilen formda bir dolanımın mümkün olabilmesi için de her bir kara parçasına bağlı olan köprülerin sayısının çift sayıda olması gerektiğini belirtmiştir. Bu çözümünü yayımladığı makalesi ise graf teorisinin ilk makalesi olarak kabul edilmiş ayrıca Euler teoremi, Euler turu ve Euler grafi kavramlarını da literatüre kazandırmıştır (Balaban 1976).

1840 yılında ise August Ferdinand Möbius tarafından sunulan kral ve öldükten sonra beş çocuğuna miras olarak bırakmak istediği topraklar hakkındaki bulmaca ile düzlemsel graf kavramı doğmuştur. Bu kavram 20. yüzyılda Henry Ernest Dudeney tarafından 3 eve çekilecek gaz, elektrik ve su hatları üzerine olan problemle gelişmiştir. Möbius ve Dudeney tarafından ortaya atılan problemler Kazimierz Kuratowski tarafından ortaya sunulan teorem ile çözüme kavuşmuştur (Gross ve Yellen 2003).

Bu süre zarfında Leonhard Euler'ın "*Königsberg'in yedi köprüsü*" problemini çözümünden sonra graf teorisinin gelişimi "*Königsberg'in yedi köprüsü*" probleminin de aslında bir örneğini teşkil ettiği dolanım izleme bulmacaları ile devam etmiştir. 19. yüzyıl başlarından itibaren Louis Poincaré ve Olry Terquem'in bulmacalarında Euler turları bulmaya yönelik çalışmalar görülmeye başlamıştır. Ayrıca, dolanım izleme bulmacaları ile ilgilenen Johann Benedict Listing'in 1848 yılında yayımladığı "*Vorstudien zur Topologie*" adlı kitabında ilk defa topoloji kelimesi yer almıştır. Topolojik graf teorisinin doğuşu ise Euler'ın 1750 yılında Christian Goldbach'a göndermiş olduğu mektupta ortaya çıkan ve literatürde Euler'ın çok yüzlü formülü olarak anılan formül sayesinde 1800'lü yıllarda olmuştur. 1892 yılında ise Walter William Rouse Ball "*Königsberg'in yedi köprüsü*" problemini kara parçalarını köşeler, köprüleri de kenarlar olarak temsil ederek graf formunda modelleyen ilk kişi olmuş ve bu problem açıkça bir dolanım bulmacası olarak ifade edilmiştir (Gross ve Yellen 2003).

Graf teorisinin gelişimi 19. yüzyılda devam ederken İngiliz matematikçi Thomas Penyngton Kirkman çok yüzlüler üzerine odaklanarak "*Königsberg'in yedi köprüsü*" probleminin graf formundaki üzerinden geçen kenarların (köprülerin) tekrarlanmaması

şartını bir adım daha ileri götürerek köşelerin de tekrarlanmaması şartını eklemiştir. 1855 yılında yayımladığı çalışmasında ise herhangi bir köşeden başlanarak tüm köşelerinden bir ve yalnız bir defa geçilerek başlanılan köşeye dönülebilen turları içeren çok yüzlüleri araştırmıştır (Gross ve Yellen 2003).

1843 yılında quaterniyonları tanımlayarak matematikte olduğu kadar fizikte mekanik alanına da çok önemli katkılar sunan Sir William Rowan Hamilton, quaterniyonlar üzerindeki çalışmaları ile ilişkili olarak Kirkman'ın çalışmalarının özel bir hali üzerinde çalışmıştır. Hamilton bir oniki yüzlünün tüm köşelerinden bir ve yalnız bir defa geçilerek başlangıç köşesine dönen turlar üzerine araştırmalar yapmıştır. 1857 yılında ise “*icosian game*” adıyla bir oniki yüzlünün bir köşesinden başlayarak tüm köşelerinden bir ve yalnız bir defa geçilerek başlangıç köşesine dönülebilen turları buldurmayı amaçlayan bir oyun geliştirerek ticari olarak satışa sunmuş ve oyununu satmıştır. Kirkman ve Hamilton'ın bu çalışmaları neticesinde Hamilton turu, Hamilton grafi kavramları sadece Sir Rowan William Hamilton'a atfedilerek graf teorideki yerini almıştır (Gross ve Yellen 2003, Barnett 2009).

Euler, Kirkman ve Hamilton graflar üzerindeki dolanımlarla ilgilenirken 1847 yılında Gustav Robert Kirchhoff'un elektrik devreleri üzerine yayımlanan makalesi ile graf teorisinin fizik alanındaki ilk uygulamaları ortaya çıkmış ve doğrudan olmasa da graflarda belirli alt grafları sayma çabaları başlamıştır. Kirchhoff makalesinde dolaylı olarak graflarda gereken ağaç sayılarının bulunmasına öncülük etmiş ve bu keşif literatüre “*matris ağaç teoremi (Kirchhoff teoremi)*” adıyla girmiştir (Balaban 1976, Gross ve Yellen 2003, Kirby ve ark 2017).

Graf teorisinin Euler ile doğup Kirchhoff, Kirkman, Hamilton ile çeşitli alanlardaki gelişimi devam ederken farklı bir alana daha sıçraması Francis Guthrie ile olmuştur. 1852 yılında Francis Guthrie İngiltere haritasını boyarken “*komşu şehirler farklı renklere boyanmak şartıyla dört farklı renk ile tüm harita boyanabilir*” sonucunu keşfederek bu sonucu Augustus De Morgan'ın öğrencisi olan kardeşi Frederick'e sunarak hocasına aktarmasını istemiş, Augustus De Morgan'ın da arkadaşı olan Sir William Rowan

Hamilton'a çekinerek yazdığı mektupta bu ifadenin doğru olup olmadığını sormasıyla bu sıçrama gerçekleşmiştir. Bu ifadenin doğruluğu literatüre “*dört renk teoremi*” olarak girmiş ve birçok denenen yanlış ispattan sonra 1976 yılında bilgisayar teknolojisi ile Kenneth Appel ve Wolfgang Haken tarafından ispatlanmıştır (Harary 1969, Gross ve Yellen 2003, Maritz ve Mouton 2012).

1857 yılına gelindiğinde ise doymuş hidrokarbonların (parafinler ya da alkanlar) izomer sayıları üzerinde çalışan Arthur Cayley 1847 yılında Kirchhoff'un da çalışmalarında dolaylı olarak kullandığı ağaç kavramını ilk defa *ağaç* terimi şeklinde ifade ederek kullanmış ve kimya alanına taşımıştır. Cayley, doymuş hidrokarbonların karbon iskeletlerinde karbon atomlarını köşeler, karbon atomları arasındaki bağları da kenarlar olarak temsil ederek izomer sayıları üzerinde çalışmıştır. Böylelikle, Cayley her bir doymuş alkan izomerinin bir ağaç yapısı olduğundan yola çıkarak n tane köşeye sahip bir doymuş hidrokarbonun izomer sayısını hesaplayabilmek için köşe dereceleri 1 ile 4 arasında değişen n köşeli ağaç kombinasyonlarını bulmayı amaçlamıştır. Bu ise ifade edildiği kadar kolay bir problem değildir. Bu sebeple Cayley problemi köklü ağaçlar, her köşe derecesi en fazla 4 olan ağaçlar ve tüm ağaçlar şeklinde sınıflandırarak 1857-1874 yılları arasında $CH_4, C_2H_6, \dots, C_{11}H_{24}$ doymuş hidrokarbonlarının izomer sayılarını hatasız şekilde hesaplamıştır. Bu çalışmalarından sonra Cayley 1889 yılında Kirchhoff Teoremi'nin de özel bir hali olan “*her pozitif n tam sayısı için n^{n-2} tane köşeleri 1, 2, ..., n olarak etiketlenmiş ağaç mevcuttur*” teoremini ifade etmiştir. Bu teorem aslında 1860 yılında Carl Wilhelm Borchard tarafından sunulmuş olsa da Arthur Cayley'e atfedilerek Cayley Teoremi adıyla günümüze kadar ulaşmıştır. Cayley bu çalışmalarıyla graf teorisinin ve matematiksel yaklaşımın kimya alanındaki uygulamalarının başlamasına öncü olmuştur (Balaban 1976, Trinajstić 1992, Saoub 2021).

Cayley gibi matematikçi olmayan ancak aynı dönemde kimya alanında önemli bilim insanları olarak öne çıkan Friedrich August Kekule, Archibald Scott Couper ve Alexander Mikhaylovich Butlerov tarafından 1858-1861 yılları arasında sırasıyla yayımlanan çalışmalar yapı teorisi adıyla adlandırılan kimya alanında ise kimyasal yapı teorisi adıyla çığır açan bir teoriyi doğurmuştur. Bu teori ile moleküllerin yapısal formüllerine

odaklanıp bu yapılar üzerinde çalışarak moleküllerin çok çeşitli özellikleri kimyasal analizlerin zorluklarından kurtulunarak belirlenebilmekte ve analiz edilebilmektedir. Bu teorinin ele aldığı moleküllerin yapısal formülleri atomların köşeler, atomlar arasındaki bağların ise kenarlar olarak temsil edilerek modellendiği graf yapılarıdır. 1860'lı yıllarda bu modellemeyi graf formunda çalışmalarında kullanan ilk kişi olan iskoç organik kimyager Alexander Crum Brown'da kimyasal yapı teorisinin gelişimine önemli bir katkı sunmuştur. Bu gelişmeler neticesinde çalışmalarda genellikle yapı adı ile kullanılmasına karşın graf kelimesi ise ilk olarak Cayley'in de makalelerine ilgi duyup üzerinde de çalıştığı ingiliz matematikçi James Joseph Sylvester'in invaryant teori ile kimyasal graf teori üzerine 1878 yılında kaleme aldığı makalesinde görülmüştür (Balaban 1976, Bonchev 1991, Gross ve Yellen 2003).

20. yüzyıla gelindiğinde graf teorisinin gelişimi başlangıcından daha hızlı olmuştur. 1936 yılında graf teori alanındaki ilk kitap "*Theorie der Endlichen und Unendlichen Graphen*" ismiyle Denes König tarafından yayımlanmıştır (Harary 1969).

Bu süreçte graf teorisinin özellikle kimya alanındaki uygulamaları artarak sürmeye devam etmiştir. İlk olarak deneysel izomer saymanın zorluklarından artık kurtulunarak daha etkili yöntemler geliştirilmeye başlanmıştır. 19. yüzyılda Cayley'in ortaya koyduğu çalışmaların devamı olarak 1932-1934 yılları arasında Blair ve Henze tüm alkan ve alkollerin izomer sayılarını hesaplamıştır. İzomer sayılarının sayımı konusunda çığır açan gelişme ise 1935-1937 yılları arasında Macar matematikçi George Polya tarafından geliştirilen teorem ile olmuştur. Teorem aslında 1927 yılında John Howard Redfield tarafından ortaya konmuş olsa da literatüre "*Polya'nın sayma teoremi*" adıyla girmiştir. Bu teorem ile farklı alanlardaki sayma problemlerinin çözülebilmemesinin yanında kimya alanında da izomer sayma problemleri çözülebilmıştır. Polya'nın sayma teoremi ile graf teorisinin kimya alanına etkisi önemli ölçüde gelişme göstermiş ve bu teorem grafların sayımı konusuna çok önemli bir katkı yapmıştır (Balaban 1976, Bell 2015).

Graf teori kimya alanındaki önemli gelişiminin yanında farklı disiplinlere ait olan birçok çalışmada da etkin şekilde kullanılmıştır. 1936 yılında ruhbilimci Kurt Lewin, bireylerin

ömür sürelerini bir düzlemsel graf yapısı olarak modellemiş, graf teorisinin psikoloji alanında kullanımına öncü olmuştur. 1949 yılında Richard Feynman tarafından teorik fizik alanında gerçekleştirilen çarpışma çalışmalarında parçacıkların köşeler ile, çarpışmadan sonra parçacıkların izledikleri yolların ise kenarlar ile temsil edildiği graf yapıları modellenerek kullanılmıştır. 1959 ve 1960 yıllarında teorik fizik alanında çalışan George Eugene Uhlenbeck ve ilk nobel ödülü kazanan Çin kökenli bilim insanları olan Tsung-Dao Lee ile arkadaşı Chen Ning Yang tarafından yapılan ayrı çalışmalarda çeşitli moleküllerin köşeler ve bu moleküller arasındaki fiziksel etkileşimlerin de kenarlar olarak temsil edilerek modellenmesiyle graf teorisinin kullanılmasıyla graf teorisinin bu alanda da etkisini göstermiştir. Graf teorisinin dahil olduğu bir diğer alan ise nümerik analiz olmuş ve matrislerin özdeğerlerinin hesabında yönlü graflar kullanılmıştır. 20. yüzyılın ilk yarısından itibaren günümüzde gezgin satıcı problemi ve çinli postacı problemi adlarıyla bilinen kombinatorik optimizasyon problemlerinin çalışılmasında kullanılan lineer programlama ve yöneylem metodlarında kullanılan ağ yapılarında da graf teorisinin kullanılması görülmektedir. 1962-1965 yılları arasında ağ akışları, matematiksel programlama ve ulaşım ağları konuları üzerinde Lester Randolph Ford, Delbert Ray Fulkerson, Claude Berge ve Steven Vajda tarafından yayımlanan kitaplarda da grafların kullanımı görülmektedir. 1931 yılında ise Oswald Veblen tarafından yayımlanan ve topoloji alanında öncü olan kitapta basit kompleks olarak ifade edilen yapıların da bir graf yapısı olduğu görülebilir (Harary 1969).

Buraya kadar olan kısımda görüldüğü gibi graf teorisinin 18. yüzyılda başlayıp 20. yüzyılda da devam eden kuvvetli gelişimi gün geçtikçe farklı alanlara yayılmış ve bu gelişim matematikte olduğu kadar fizik, kimya, biyoloji ve bilgisayar bilimleri başta olmak üzere sağlık bilimleri, mühendislik bilimleri, psikoloji, sosyoloji, sanat vb. birçok alanda devam etmiştir. Bu alanlardan matematik temel olarak alındığında diğer uygulama alanlarından en fazla öne çıkan kimya olarak görülebilir.

20. yüzyılda graf teorisinin kimya alanında gerçekleştirdiği gelişimin en önemli adımlarından biri ise 1947 yılında kimyager Harold Wiener'in doymuş hidrokarbonların

kaynama noktaları üzerinde yaptığı çalışma ile atılmıştır. Wiener yaptığı çalışmada doymuş hidrokarbonların kaynama noktaları ile dallanma yapıları arasında ilişki kurmuş ve bu ifadeyi *yol sayısı* olarak isimlendirmiştir. Wiener yaptığı çalışmayı sadece doymuş hidrokarbonlar üzerinde sınırlı tutarak yol sayısı ifadesini sadece döngü içermeyen, bir başka deyişle sadece ağaç yapıları üzerinde geçerli olarak sunmuştur. 1971 yılında ise kimyager Haruo Hosoya yayımladığı makalesinde Wiener'in ifadesini hem ağaç yapıları hem de döngü içeren ağaç dışındaki diğer graf yapılarına da uyarlayarak daha kapsamlı hale getirerek ifade etmiş ve ayrıca aynı makalede günümüzde *Hosoya indeksi* olarak adlandırılan matematiksel ifadeyi de sunmuştur. Bu sayede Wiener'in ifadesi çok daha fazla önem arzetmeye başlamış ve *Wiener indeksi* olarak adlandırılarak günümüze ulaşmıştır. Bu gelişmeler neticesinde *topolojik indeks* veya *topolojik invariant* olarak da isimlendirilen *moleküler tanımlayıcılar* kavramının temeli atılmıştır (Wiener 1947, Hosoya 1971, Hosoya 2019).

1.2. Topolojik İndeks Kavramı ve Uygulamaları

Matematiğin kimya alanında kullanımı ve uygulamalarını içeren matematiksel kimya alanının bir alt dalı olan kimyasal graf teori, graf teoriyi kimyasal moleküllerin aynı zamanda kimyasal olayların modellenmesinde kullanarak araştıran graf teorisinin önemli bir alt dalıdır. Kimyasal graf teori alanında graf yapıları olarak modellenen moleküller, moleküler graf olarak isimlendirilmektedir. Moleküler graflar, kimyasal formülleri verilen moleküllerin yapısal formüllerini temsil etmektedir. Yapılan çalışmalarda kullanılan birçok kimyasal graf tipi bulunmasına karşın çalışmanın hedefleri doğrultusunda modellenen moleküle ait bazı yapılar görmezden gelinebilir. Örneğin, organik kimya alanında hidrokarbonlar için moleküler graflar, genellikle moleküllerde bulunan hidrojen atomları görmezden gelinerek karbon atomu iskeletlerinden oluşmakta ve her kimyasal bağ tek bir kenar ile temsil edilmektedir (Mekenyan ve ark. 1988).

Moleküllerin kimyasal formülü birçok şey ifade etmesine rağmen molekül hakkında tam bilgi vermemektedir. Örneğin kimyasal formülü $C_{17}H_{21}NO_4$ olan skopolamin alkaloidi “Dünya Sağlık Örgütü Temel İlaçlar Listesi” içerisinde yer alırken aynı kimyasal formüle

sahip kokain alkaloidi ise bir tür uyuşturucu olarak bilinmektedir. Bu farklılık alkaloidlerin yapısal formüllerinin (moleküler graflarının) farklılığının bir sonucudur (Schmuck 2010).

Topolojik indeksler moleküler graflar üzerinde kurulan anlamlı ve tutarlı matematiksel formüllerin bir ürünü olarak elde edilen nicel parametreler şeklinde ifade edilip kimyasal graf teorisinin en önemli araçlarından birini oluşturmaktadır. Topolojik indekslerden elde edilen parametreler ile modellenen moleküller ilişkilendirilerek moleküllerin fiziksel özelliklerinin yanında kaynama noktası, denge, entropi, kararlılık, tepkisellik gibi termodinamik özellikleri tahmin edilebilmekte ve böylelikle molekülün kimyasal özellikleri, biyolojik aktivitesi, çevresel davranışları saptanabilmektedir. Bu sayede deneysel veriler elde etmenin meydana getirdiği maliyet, zaman kaybı, mekansal sınırlamalar, deney sürecinde maruz kalınabilecek tehlikeler gibi zorluklar en aza indirilerek matematiksel olarak gerekli kimyasal veriler topolojik indeksler yardımıyla ulaşılabilir olmaktadır. Bu gibi avantajların sonucu olarak en başta ilaç kimyası ve toksikoloji olmak üzere teorik kimya temeline sahip birçok alanda topolojik indeksler kullanılmaktadır (Todeschini ve Consonni 2008, Hosoya 2019).

Günümüzde bazıları teorik kimya alanında moleküler tanımlayıcı olarak kullanılan bazıları da sadece matematiksel ifadeler olarak literatürde yer edinen çok sayıda tanımlanmış topolojik indeks bulunmaktadır. Bunlardan başlıcaları Wiener indeksi, Hosoya indeksi, Randić indeksi, Zagreb indeksleri, Merrifield-Simmons indeksi, atom-bağ bağlantı indeksi olarak önümüze çıkmaktadır.

Topolojik indeksler ifadeleri dolayısıyla graf teorisinde başta olmak üzere cebir, fiziksel kimya vb. alanların temel bilgilerini gerektirirken uygulamaları dolayısıyla da kemometri, nicel yapı-aktivite ilişkisi QSAR ve nicel yapı-özellik ilişkisi QSPR yaklaşımları gibi alanların temel bilgilerini gerektirmektedir. Topolojik indekslerin hesaplama problemleri için ise kombinatorik kimya, hesaplamalı kimya, programlama gibi çeşitli alanlara ait teorilere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu sebeple topolojik indekslerin çalışma alanı multidisipliner bir alan olarak ifade edilebilir (Todeschini ve Consonni 2008).

1.3. Hosoya İndeksi ve Merrifield-Simmons İndeksi

Hosoya indeksi 1971 yılında Haruo Hosoya tarafından yayımlanan makalede doymuş hidrokarbon moleküllerinin moleküler grafları üzerinde $k \geq 0$ değerleri için seçilebilecek tüm bağımsız k tane kenar içeren farklı küme sayılarının toplamı olarak Z indeksi ifadesiyle önerilmiş ve topolojik indeks olarak isimlendirilerek tanımlanmıştır. Haruo Hosoya çalışmasında doymuş hidrokarbonların moleküler graflarından elde ettiği Z değeri ile moleküler graflarını oluşturduğu doymuş hidrokarbon moleküllerinin kaynama noktaları arasında ilişki kurmuştur (Hosoya 2019). Hosoya indeksi, kaynama noktasının yanı sıra entropi, toplam π -elektron enerjisi gibi çeşitli termodinamik özellikler ile ilişkili olmakla birlikte konjuge π -elektron sistemleri teorisinde de uygulama alanına sahiptir (Wagner ve Gutman 2010, Gutman 2016).

Richard E. Merrifield ve Howard E. Simmons 1980'lerde yaptıkları çalışmalarda moleküler yapıları tanımlamak amacıyla küme topolojisine dayanan matematiksel bir teori ortaya koymuştur (Simmons ve Merrifield 1977, Merrifield ve Simmons 1980, Merrifield ve Simmons 1981a, Merrifield ve Simmons 1981b, Merrifield ve Simmons 1985, Merrifield ve Simmons 1989). Bu kapsamda R. E. Merrifield ve H. E. Simmons moleküler graflar için bir topolojik uzay tanımlamıştır. Geliştirdikleri teoride grafin karşılık geldiği topolojik uzayın açık kümelerinin sayısı grafin bağımsız köşelerinin oluşturduğu farklı kümelerin sayısına eşittir. Bir başka ifade ile verilen bir grafta $k \geq 0$ değerleri için seçilebilecek tüm bağımsız k tane köşe içeren farklı küme sayılarının toplamına eşittir. Bu sayı Merrifield-Simmons indeksi olarak önem arzetmiş ve ortaya atılan teorinin bilim çevrelerince başarısız bulunmasının önemli bir tesellisi olmuştur. Bir süre "İkinci tür Hosoya indeksi" olarak veya isim verilmeden çalışılsa da 1990 yılında ilk defa Ivan Gutman tarafından Merrifield-Simmons indeksi ismiyle kullanılmıştır (Gutman 1990). Ayrıca 1982 yılında H. Prodinger ve R. F. Tichy tarafından yapılan çalışmadan dolayı grafların Fibonacci sayısı olarak da adlandırılmaktadır (Prodinger ve Tichy 1982). Geçen süreçte başta kimya alanında hidrokarbonların termodinamik özellikleriyle ilişkili

olmak üzere istatistiksel mekanik gibi alanlarda da çeşitli uygulama alanları bulmuştur (Zhang 2014).

1.4. Literatür Taraması

Hosoya ve Ohkami (1983) operatör tekniği adını verdikleri metot ile lineer, bükülmüş ve zik-zak tipli benzenoid zincirlerin karakteristik, eşleme ve Z-sayma polinomları için tekrarlama bağıntıları elde etmiştir.

Randic ve ark. (1989) transfer matris tekniğini kullanarak benzenoid zincirlerin eşleme polinomlarını elde etmede kullanılan bir algoritma sunmuştur.

Polansky ve ark. (1989) iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin Wiener sayılarının hesabına yönelik transfer matris tekniğine dayanan bir metot önermiştir.

Gutman (1993) lineer hekzagonal zincirlerin tüm hekzagonal zincirler arasında minimum Hosoya indeksine maksimum Merrifield-Simmons indeksine sahip olduğunu göstermiştir. Aynı çalışmada hekzagonal zincirler arasında zik-zak hekzagonal zincirlerin minimum Merrifield-Simmons indeksine, maksimum Hosoya indeksine sahip olduğu konjektür olarak sunulmuş ve bu konjektür Zhang (1998) tarafından ispatlanmıştır.

Zhang (2000) tüm hekzagonal zincirler arasında ikinci maksimum Merrifield-Simmons indeksine sahip olan hekzagonal zincirleri tek-açılı lineer hekzagonal zincirler olarak belirlemiştir. Zhang ve Tian (2003) hekzagonal zincirleri ağaç-tipli hekzagonal sistemlere diğer bilinen ismiyle iç noktasız-yoğunlaştırılmış hekzagonal sistemlere genişleterek aynı zamanda ağaç-tipli hekzagonal sistemler sınıfına da giren lineer hekzagonal zincirlerin ve tek-açılı lineer hekzagonal zincirlerin tüm ağaç-tipli hekzagonal sistemler arasında sırasıyla minimum ve ikinci minimum Hosoya indeksine, maksimum ve ikinci maksimum Merrifield-Simmons indeksine sahip olduğunu ispatlamıştır.

Shiu (2008) lineer hekzagonal örümcek graflarının tüm hekzagonal örümcek grafları arasında minimum Hosoya indeksine, maksimum Merrifield-Simmons indeksine sahip olduğunu göstermiştir. Ayrıca, aynı çalışmada zik-zak hekzagonal örümcek graflarının tüm hekzagonal örümcek grafları arasında minimum Merrifield-Simmons indeksine, maksimum Hosoya indeksine sahip olduğunu sunmuştur.

Buraya kadar verilen çalışmaların devamı niteliğinde Ren (2011) lineer ağaç-tipli hekzagonal sistem ve zik-zak ağaç-tipli hekzagonal sistem kavramlarını kullanarak sunduğu dönüşüm yardımıyla Merrifield-Simmons indeksinin alt sınırına sahip olan ağaç-tipli hekzagonal sistemleri belirlemiş ve verdiği bazı sonuçları zik-zak hekzagonal örümcek graflarına ve hekzagonal zincirlere genişletmiştir.

Hosoya ve Merrifield-Simmons indekslerinin sınır değerlerinin çalışılmasının yanısıra, Gutman ve ark. (2016), Şahin (2016) Merrifield-Simmons indeksi tek adımda Fibonacci sayıları cinsinden hesaplanabilen moleküler grafları belirlemiştir.

Chen (2015) fenilen zincirler ve hekzagonal zincirlerde Merrifield-Simmons indeksinin beklenen değeri üzerine yaptığı çalışmada hekzagonal zincirlerde Merrifield-Simmons indeksinin hesabına yönelik literatürde hazır bulunan tekraralama bağıntılarını kullanarak basit şekilde elde edilen uzun ifadelerden oluşan bir indirgeme denklemi elde etmiştir.

Luna ve ark. (2018) çokgen ağaç-tipli grafların Merrifield-Simmons indeksini hesaplamak için graflarda algoritmik hesaplama işlemlerinde sıkça kullanılan ağaç ayrıştırma metoduna dayanan ve yapay zeka alanında uygulamalara sahip olan makro operatörlerinin kullanıldığı lineer zamanlı algoritmalar tasarlamıştır.

Luna ve ark. (2019) çokgen dizilerde, dizideki her bir ortak kenar arasındaki uzaklığın 1 kenar olduğu çokgen dizilerin (zik-zak çokgen diziler) minimum Merrifield-Simmons indeksine sahip olduğunu göstermiştir.

Zhang ve Zhang (2000), Gutman (1993) ve Zhang (1998) tarafından sunulan bazı sonuçları genelleştirerek tüm hekzagonal zincirler arasında lineer hekzagonal zincirlerin bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından minimum, bağımsız k tane köşe içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından maksimum değere sahip olduğunu belirtmiştir. Aynı çalışmada, tüm hekzagonal zincirler arasında zik-zak hekzagonal zincirlerin bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından maksimum, bağımsız k tane köşe içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından minimum değere sahip olduğu da sunulmuştur.

Klabjan ve Mohar (1998) hekzagonal sistemlerde $k \leq 5$ için bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısını hesaplamak için bir yol sunmuştur.

Cao ve Zhang (2008), Gutman (1993), Zhang (1998), Zhang ve Zhang (2000) tarafından yapılan çalışmaları çokgen zincir yapılarına genişleterek bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayıları bakımından uç değerlere ulaşan çokgen zincir tiplerini elde etmiştir.

Ren ve Zhang (2007b) tüm birbirine yapışık n tane naftalin molekülü tarafından oluşturulan çift katlı hekzagonal zincirler arasında lineer çift katlı hekzagonal zincirlerin bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından minimal, bağımsız k tane köşe içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından maksimal değere sahip olduğunu sunmuştur. Ayrıca, tüm birbirine yapışık n tane naftalin molekülü tarafından oluşturulan çift katlı hekzagonal zincirler arasında zik-zak çift katlı hekzagonal zincirlerin bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından maksimal, bağımsız k tane köşe içerecek

şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayısı bakımından minimal değere sahip olduğu sunulmuştur.

Ren ve Zhang (2007a) tarafından tüm birbirine yapışık n tane naftalin molekülü tarafından oluşturulan çift katlı hekzagonal zincirler arasında maximal Hosoya indeks değerine ulaşan çift katlı hekzagonal zincir tipi ve minimal Merrifield-Simmons indeks değerine ulaşan çift katlı hekzagonal zincir tipi zik-zak çift katlı hekzagonal zincir olarak belirlenmiştir.

Gutman ve ark. (1989) R_n ve P_n şeklinde adlandırılarak verilen özel tipteki iki iç-noktalı hekzagonal sistemin Hosoya indeksleri için $n \geq 3$ olduğu durumda bir indirgeme bağıntısı elde etmiştir.

Cruz ve ark. (2017) iç noktasız-yoğunlaştırılmış hekzagonal sistemlerin Hosoya indeksini hesaplamak için 4×4 tipinde doğal sayı içerikli matrisler ile bir vektörün çarpımına dayanan indirgeme formülleri sunmuştur. Aynı çalışmada, özel tipteki bazı iç-noktasız hekzagonal sistemlerde Hosoya indeksinin maksimum ve minimum değerleri araştırılmıştır.

1.5. Tezin Amacı

Hosoya ve Merrifield-Simmons indekslerinin ifadesi kolay anlaşılır olmasına rağmen hesabı ise bazı basit graf türleri dışında bir o kadar zorlayıcıdır. Bu indekslerin hesabı için verilen her graf üzerinde geçerli olacak şekilde halihazırda kullanılan genel etkili bir formülizasyon mevcut değildir.

Literatürde aynı yapılar karşılık gelmesine rağmen hem hekzagonal sistemler hem de benzenoid sistemler olarak iki farklı ad ile telafuz edilen ve geometrik yapı olarak altıgenlerin birbirleriyle ortak kenarlara sahip olacak şekillerde kaynaşmasıyla oluşan

yapılar, hem kimya alanında hem de matematik alanında geniş bir çalışma alanına sahiptir.

Bu tez çalışmasının odak noktası, benzenoid hidrokarbonların moleküler graflarının ait olduğu yapılar olan, literatürde ingilizce ismiyle “*cata-condensed hexagonal systems*” olarak bilinen iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid (hekzagonal) sistemlerin ve literatürde ingilizce ismiyle “*peri-condensed hexagonal systems*” adıyla bilinen iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid (hekzagonal) sistemlerin Hosoya ve Merrifield-Simmons indekslerinin hesabı olacaktır.

Bu tez çalışmasının dahil olduğu alanın kimyasal graf teori olması nedeniyle bu andan itibaren benzenoid sistemler adlandırması tercih edilerek çalışma gerçekleştirilecektir.

Roberto Cruz tarafından yapılan çalışmada verilen metot ile iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin Hosoya indeksi hesaplanabilmektedir. Ancak bu çalışmada verilen metot ile iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerde Hosoya indeksinin hesabının yapı taşlarını teşkil eden bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayıları ayrı ayrı elde edilememektedir. Buradan hareketle öncelikle her bir $k \geq 0$ değeri için iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerde bağımsız k tane kenar içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayılarının hesabına yönelik $4(k + 1) \times 4(k + 1)$ boyutlu matris çarpımlarını içeren bir metot önerilecektir. Verilen metotta kullanılan matrislerin boyutunun k değeri ile doğru orantılı şekilde büyümesi sebebiyle metodun uygulanabilirliğini sağlamak amacıyla MATLAB programı kullanılarak her bir $k \geq 0$ değeri için bu metotta kullanılan matrisleri kolay bir şekilde elde etmede kullanılan k değerine bağlı algoritmalar verilerek metodun uygulanabilirliği kolaylaştırılacaktır.

Devamında Merrifield-Simmons indeksi hesabının yapı taşlarını teşkil eden bağımsız k tane köşe içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayılarına yönelinecektir. İlk olarak, iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerde her bir $k \geq 0$ değeri için bağımsız k tane köşe içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayılarını

hesaplama da kullanılan $5(k + 1) \times 5(k + 1)$ boyutlu matris çarpımlarını içeren bir metot önerilecektir. İkinci olarak ise bu metotta da kullanılan matrislerin boyutunun k değerleri arttıkça artması nedeniyle metodun uygulanabilirliği için MATLAB programı kullanılarak matrisleri elde etmede kullanılan algoritmalar geliştirilecektir. Böylelikle, önerilen metot ve algoritmalar sayesinde her bir $k \geq 0$ değeri için her bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemde bağımsız k tane köşe içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayıları hesaplanabilir olacaktır.

Ayrıca, her bir $k \geq 0$ değeri için bağımsız k tane köşe içerecek şekilde oluşturulabilecek farklı küme sayılarını hesaplamaya gerek olmadan doğrudan iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin Merrifield-Simmons indeksini hesaplamada kullanılan bir metot önerilerek bu hesap verilen her iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem için kolay bir yolla gerçekleştirilebilecektir.

İç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin ardından, iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin bir türü olan çift katlı benzenoid zincirlerin Hosoya ve Merrifield-Simmons indekslerinin hesabı için birer metot önerilerek bu metotlar ile her bir çift katlı benzenoid zincirin hem Hosoya indeksi hem de Merrifield-Simmons indeksi verilen metotlar ile hesaplanabilir olacaktır.

Son olarak Gutman ve ark. (1989) tarafından R_n ve P_n adlarıyla verilen özel tipteki iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin hem Hosoya hem de Merrifield-Simmons indekslerinin hesabı için metotlar önerilerek karşılık gelen her sistem tipi için bu indekslerin hesabı açık bir fonksiyon şeklinde ifade edilecektir.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Ön Bilgiler

2.1.1. Tanım. Bir G grafi, *köşe kümesi* $V = \{v_1, v_2, \dots, v_q\}$ ile sırası önemli olmaksızın $1 \leq i, j \leq q$, $1 \leq k \leq p$ için v_i, v_j köşeleri arasındaki bağlantıyı temsil eden ve $e_k = v_i v_j$ formunda gösterilen ifadelerin oluşturduğu *kenar kümesi* $E = \{e_1, e_2, \dots, e_p\}$ tarafından oluşturulan bir sıralı ikilidir. $G = (V, E)$ veya kısaca G ifadesiyle gösterilir (Christofides 1975).

2.1.2. Tanım. $V = \{v_1, v_2, \dots, v_q\}$ köşe kümesine ve $E = \{e_1, e_2, \dots, e_p\}$ kenar kümesine sahip bir $G = (V, E)$ grafinin *köşe sayısı* $|V| = q$, *kenar sayısı* $|E| = p$ olarak ifade edilir.

2.1.3. Tanım. Bir G grafinde v_i, v_j köşeleri arasında en az bir $e = v_i v_j$ kenarı mevcut ise v_i, v_j köşelerine *komşu köşeler* denilir ve e kenarı hem v_i hem de v_j köşelerine *bitişiktir* denilir (Diestel 2005).

2.1.4. Tanım. Bir G grafinde bir v köşesinin bitişik olduğu kenar sayılarının toplamına v köşesinin *derecesi* denir ve $d(v)$ ile gösterilir (Diestel 2005).

2.1.5. Tanım. G grafinde bulunan her bir kenar için $e_k = v_i v_j \neq v_j v_i$ ise G grafinin *yönlü graf* denilir (Christofides 1975).

2.1.6. Tanım. G grafi için oluşturulan bir kenar için $e = v_i v_i$ ise e kenarına bir *ilmek* (loop) denilir. Döngü içeren graflara *pseudo graf* denilir (Trinajstic 1992).

2.1.7. Tanım. G grafında herhangi iki köşe v_i, v_j arasında birden fazla sayıda kenar mevcut ise bu kenarlar *çoklu kenarlar* olarak adlandırılır. Çoklu kenar içeren graflara *çoklu graf* denilir (Trinajstic 1992).

2.1.8. Tanım. Çoklu kenar ve döngü içermeyen yönlü olmayan graflara *basit graf* denilir.

2.1.9. Tanım. Köşe ve kenar kümeleri sırasıyla $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ olan $G(V, E)$ grafında $1 \leq i \leq k$ aralığında $\forall a_i \in V, \forall b_i \in E$ için $b_i = a_i a_{i+1}$ olmak üzere $a_1 b_1 a_2 b_2 a_3 \dots b_{k-1} a_k b_k a_{k+1}$ şeklinde tanımlanan diziye G grafında bir *yürüyüş* denir. Yürüyüşteki kenar sayısına ise yürüyüşün uzunluğu denilir. Verilen bir yürüyüş için $a_1 = a_{k+1}$ ise yürüyüşe *kapalı yürüyüş* aksi halde *açık yürüyüş* denilir (Diestel 2005).

2.1.10. Tanım. Bir G grafi üzerinde tanımlanan bir yürüyüşte tüm kenarlar farklı ise yürüyüşe *iz* denir (Trinajstic 1992).

2.1.11. Tanım. Bir $G = (V, E)$ grafi üzerinde tanımlanan bir yürüyüşte tüm köşeler ve kenarlar farklı ise yürüyüşe *patika* denir. Köşe sayısı j olan patika formundaki bir grafa *patika graf* denir ve P_j sembolü ile gösterilir (Trinajstic 1992).

2.1.12. Tanım. İlk ve son köşeleri çakışan ve tüm köşe derecelerinin hepsi 2 olan kapalı patikaya *devir graf* denir. Köşe ve kenar sayısının her biri j olan *devir (cycle) graf* C_j ile gösterilir (Balaban 1976).

2.1.13. Tanım. Bir G grafında herhangi iki köşe arasında en az bir tane patika mevcut ise G grafına *bağlantılı graf* denir (Balaban 1976).

2.1.14. Tanım. Bir $G = (V, E)$ ve $S = (V', E')$ grafları için $E' \subseteq E$ ve $V' \subseteq V$ sağlanırsa S grafına G grafının bir *alt grafi* denir (Diestel 2005).

2.1.15. Tanım. $G = (V, E)$ grafının bir alt grafi olan $S = (V', E')$ grafında

$$\forall u, v \in V' \text{ ve } \forall e = uv \in E \text{ için } e \in E'$$

şartı sağlanıyorsa S alt grafına G grafının bir *indüklenmiş alt grafi* denir (Plummer ve Lovasz 1986).

2.1.16. Tanım. $G = (V, E)$ grafının bir alt grafi olan $S = (V', E')$ grafında $V = V'$ şartı sağlanıyorsa S alt grafına G grafının bir *geren alt grafi* denir (Diestel 2005).

2.1.17. Tanım. $G = (V, E)$ grafının alt graflarından maksimal bağlantılı her alt grafına bir *bağlantılı bileşen* denir (Plummer ve Lovasz 1986).

2.1.18. Tanım. Devir içermeyen bir graf yapısı *orman* olarak ifade edilir (Diestel 2005).

2.1.19. Tanım. Devir içermeyen bağlantılı bir grafa *ağaç* denir (Balaban 1976).

2.1.20. Tanım. $v \in G$ olmak üzere v köşesine komşu olan tüm köşelerin oluşturduğu *komşuluk kümesi*

$$N_G(v) = \{u \in G : \exists e \in E, e = uv\}$$

şeklinde ifade tanımlanır. Ayrıca,

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

olarak ifade edilir (Diestel 2005).

2.1.21. Tanım. $G_1 = (V_1, E_1)$ ve $G_2 = (V_2, E_2)$ grafları arasında

$$\forall u, v \in V_1 \text{ için } e = uv \in E_1 \Leftrightarrow f(e) = f(u)f(v) \in E_2$$

olacak şekilde birebir ve örten bir $f: V_1 \rightarrow V_2$ fonksiyonu mevcut ise G_1 ve G_2 grafları birbirine *izomorftur* denilir ve $G_1 \cong G_2$ ile gösterilir (Diestel 2005).

2.1.22. Tanım. Bir G grafi ve $v \in G$ için $G - v$ alt grafi G grafından v köşesi ve v köşesine bitişik olan tüm kenarların çıkarılması durumu olarak ifade edilir (Diestel 2005).

2.1.23. Tanım. Bir G grafi ve $e \in G$ için $G - e$ alt grafi G grafından sadece e kenarının çıkarılması durumu olarak ifade edilir (Bollobas 2004).

2.1.24. Tanım. Herhangi ikisi birbirine komşu olmayan köşelerden oluşan bir kümeye *bağımsız köşe kümesi*, herhangi ikisi ortak bir köşeye bitişik olmayan kenarlardan oluşan bir kümeye *bağımsız kenar kümesi* denir (Plummer ve Lovasz 1986).

2.1.25. Tanım. Bir G grafi için $|V| = q > k$ olsun. G grafından çıkarılan köşeler önemli olmaksızın k tane köşeden az sayıda köşe çıkarıldığında G halen bağlantılı bir graf ise G grafına *k-bağılantılı graf* denir (Diestel 2005).

2.1.26. Tanım. Verilen G grafi bir düzlem üzerine hiçbir köşesi birbiri ile kesişmeyecek şekilde çizilebiliyor ise G grafına *düzlemsel graf* denir (Diestel 2005).

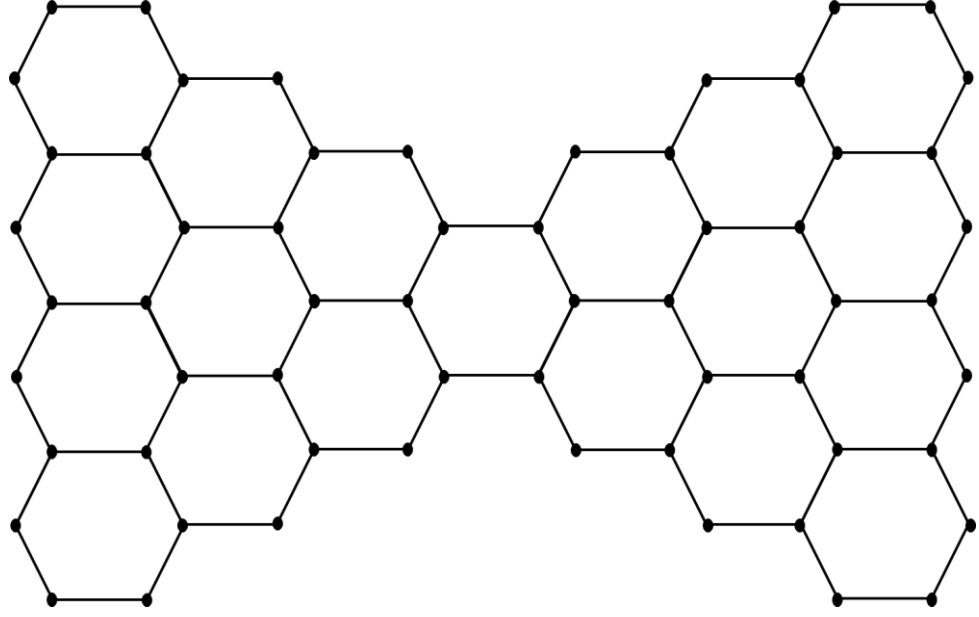
2.1.27. Tanım. Hiç kenarı bulunmayan graflara *boş graf* denir.

2.2. Benzenoid Sistemler

Hidrokarbonlar, hidrojen ve karbon atomlarından oluşan organik moleküllerdir. Hidrokarbonların moleküler grafları ise genellikle hidrojen atomları çıkarılmış karbon atomu iskeletlerinden oluşmaktadır. Benzenoid sistemler de bu doğrultuda benzenoid hidrokarbonların moleküler graflarını temsil etmektedir.

Bir benzenoid sistem karbon iskeleti düzgün altıgen şeklinde olan benzen molekülünün moleküler grafinin ikili ikili ya bir ortak kenara sahip olacak şekilde birbirine yapışık ya da ayrı olarak yer aldığı 2-bağılantılı düzlemsel bir graf yapısıdır (Gutman ve Polansky 1986, Cyvin ve Gutman 1988, Gutman ve Cyvin 1989). Benzenoid sistemlerin oluşumunda yapı taşı olan her bir benzen molekülünün moleküler grafi bir düzgün altıgen bir diğer ifadeyle hegzagon olduğundan C_6 devir grafına karşılık gelmektedir. Her bir C_6 bir *iç bölge* bunların dışında kalan tek bölge ise *dış bölge* olarak adlandırılır. Benzenoid sistemlerde bir v köşesi en fazla 3 hegzagona ait olabilir. 3 hegzagona ait olan ve 3 iç bölgenin kesişiminde yer alan bir v köşesine *iç köşe*, 1 veya 2 hegzagona ait olarak dış bölge ile 1 veya 2 iç bölgenin kesişiminde yer alan bir v köşesine ise *dış köşe* denilir (Cyvin ve Gutman 1988, Gutman ve Cyvin 1989).

Şekil 2.1’de bir benzenoid sistem örneği gösterilmektedir.



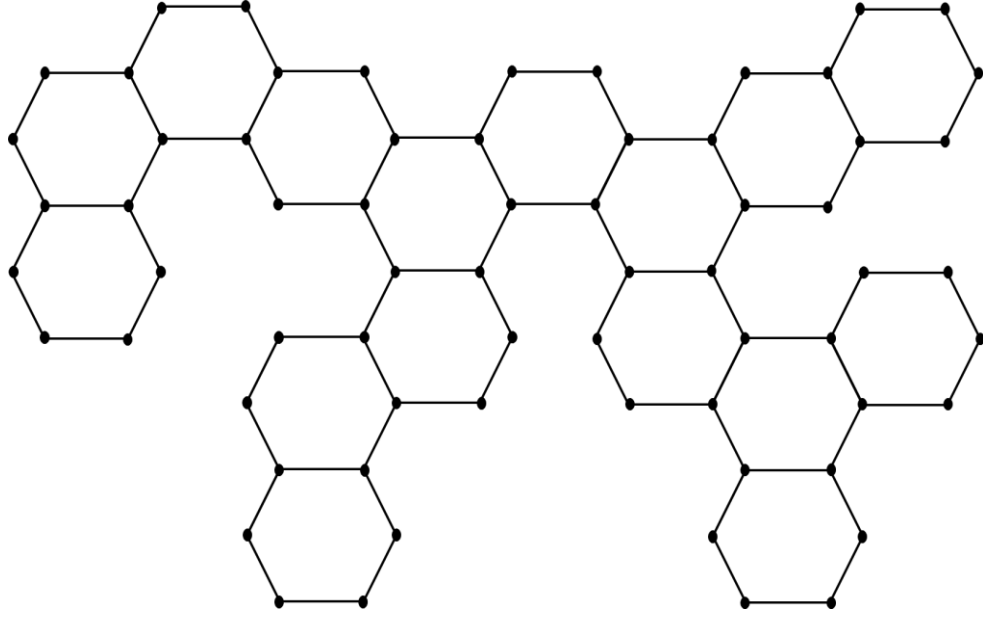
Şekil 2.1. Benzenoid sistem

2.3. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemler

İç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemler benzenoid sistemlerin temel iki alt sınıfından birisidir.

2.3.1. Tanım. Hiç iç köşe içermeyen benzenoid sistemlere *iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemler* denilir (Cyvin ve Gutman 1988, Gutman ve Cyvin 1989).

İç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerde bir hekzagon en fazla 3 tane hekzagona komşu olabilir. Şekil 2.2’de bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem örneği sunulmaktadır.



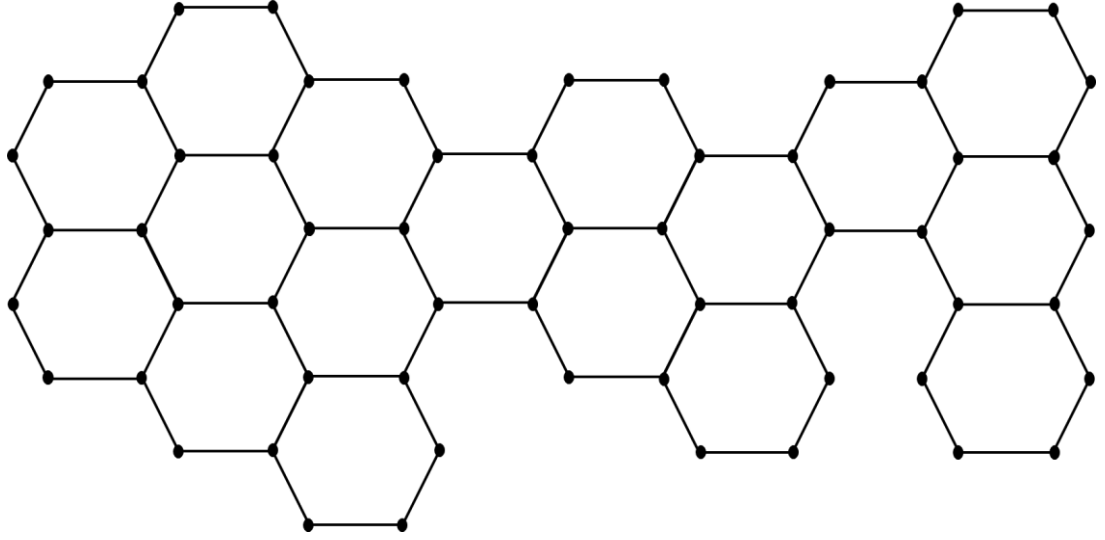
Şekil 2.2. İç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem

2.4. İç Noktalı-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemler

Benzenoid sistemlerin temel iki alt sınıfından bir diğeri iç noktalı-yoğunlaştırılmış sistemlerdir. Benzenoid sistemler bir küme olarak düşünüldüğünde iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemler kümesinin tümleyeni iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemler kümesini oluşturur şeklinde de tasvir edilebilir.

2.4.1. Tanım. En az bir iç köşe içeren sistemler *iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemler* olarak tanımlanmaktadır (Cyvin ve Gutman 1988, Gutman ve Cyvin 1989).

Şekil 2.3'te bir iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem örneği gösterilmektedir.



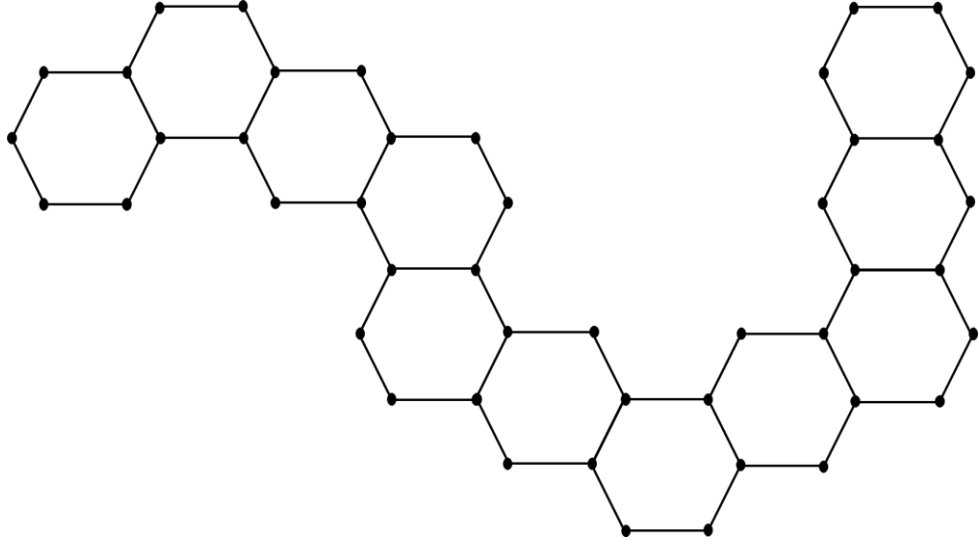
Şekil 2.3. İç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem

2.5. Benzenoid Zincirler

Benzenoid zincirler iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin alt sınıflarından birisidir.

2.5.1. Tanım. Bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemde her hekzagon en fazla 2 tane hekzagona komşu ise bu sisteme bir *benzenoid zincir* denir (Zhang ve Tian 2003).

İfade etmede kolaylık sağlamak amacıyla h tane hekzagona sahip bir benzenoid zincir $B_h = H_1 H_2 \cdots H_h$ ile gösterilecektir.

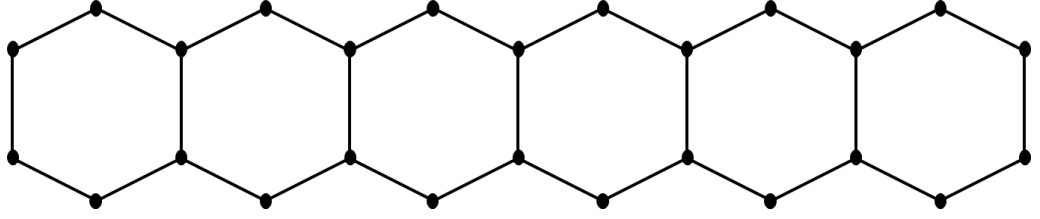


Şekil 2.4. Benzenoid zincir B_{11}

2.5.2. Tanım. $B_h = H_1 H_2 \cdots H_h$ benzenoid zincirinde yer alan ve sadece bir tane hekzagona komşu olan H_1 ve H_h hekzagonlarına *uç hekzagonlar* denir (Zhang ve Tian 2003).

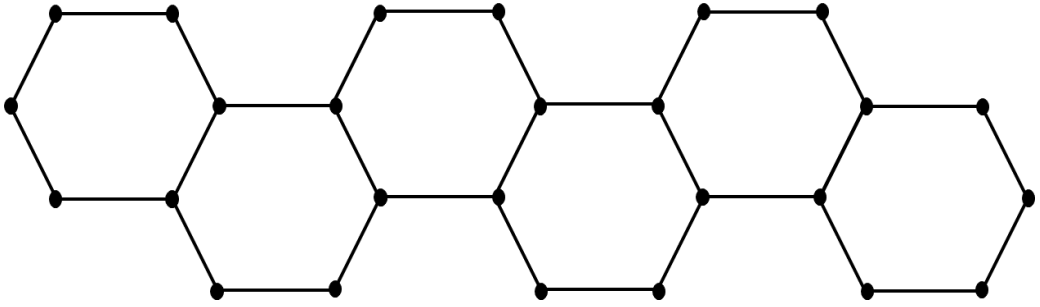
2.5.3. Tanım. Bir $B_h = H_1 H_2 \cdots H_h$ benzenoid zincirinde uç hekzagon olmayan H_1 ve H_h hekzagonları haricinde $2 \leq j \leq h - 1$ için bir H_j hekzagonunun 2 dereceli köşeleri birbirine komşu ise bu H_j hekzagonuna *dönüş hekzagonu* denir (Zhang ve Tian 2003).

2.5.4. Tanım. Hiç dönüş hekzagonu içermeyen bir benzenoid zincire *lineer benzenoid zincir* denir ve h tane hekzagon içeren bir *lineer benzenoid zincir* L_h ile gösterilir (Zhang ve Tian 2003).



Şekil 2.5. Lineer benzenoid zincir L_6

2.5.5. Tanım. Uç hekzagonlar haricindeki tüm hekzagonları dönüş hekzagonu olan bir benzenoid zincire *zik-zak benzenoid zincir* denir ve h tane hekzagon içeren bir *zik-zak benzenoid zincir* Z_h ile gösterilir.

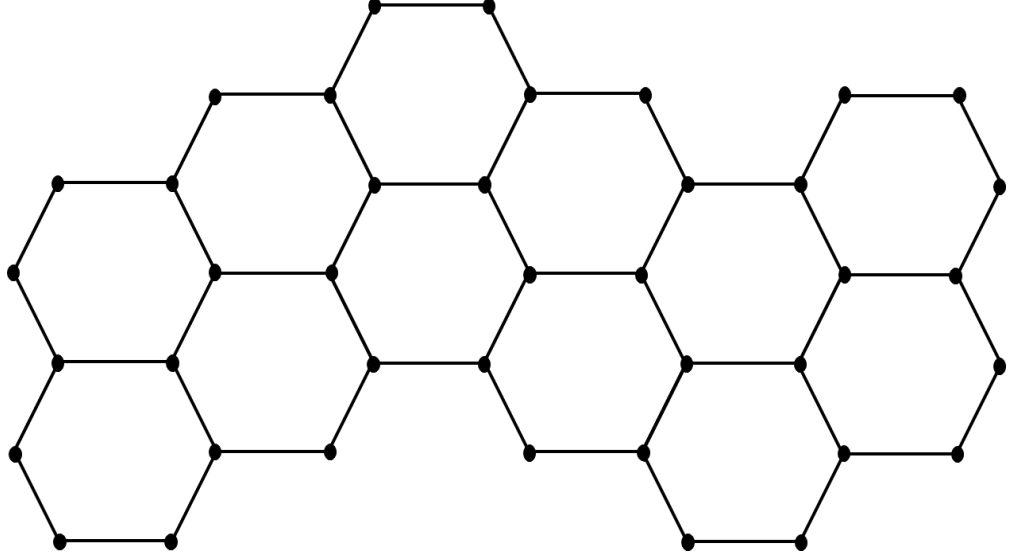


Şekil 2.6. Zik-zak benzenoid zincir Z_6

2.6. Çift Katlı Benzenoid Zincirler

İç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin bir türü olan bir çift katlı benzenoid zincir, naftalin molekülleri dikey formda düşünülerek naftalin moleküllerinin birbirleriyle iki tipte olmak üzere ardışık olarak 3 zik-zak kenar boyunca kaynaşmasıyla meydana gelmektedir.

2.6.1. Tanım. n -katlı benzenoid zincirler n tane özdeş benzenoid zincirin bir araya gelmesiyle meydana gelmektedir. $n = 2$ olduğunda benzenoid zincire *çift katlı benzenoid zincir* denir (Cyvin ve Gutman 1988).



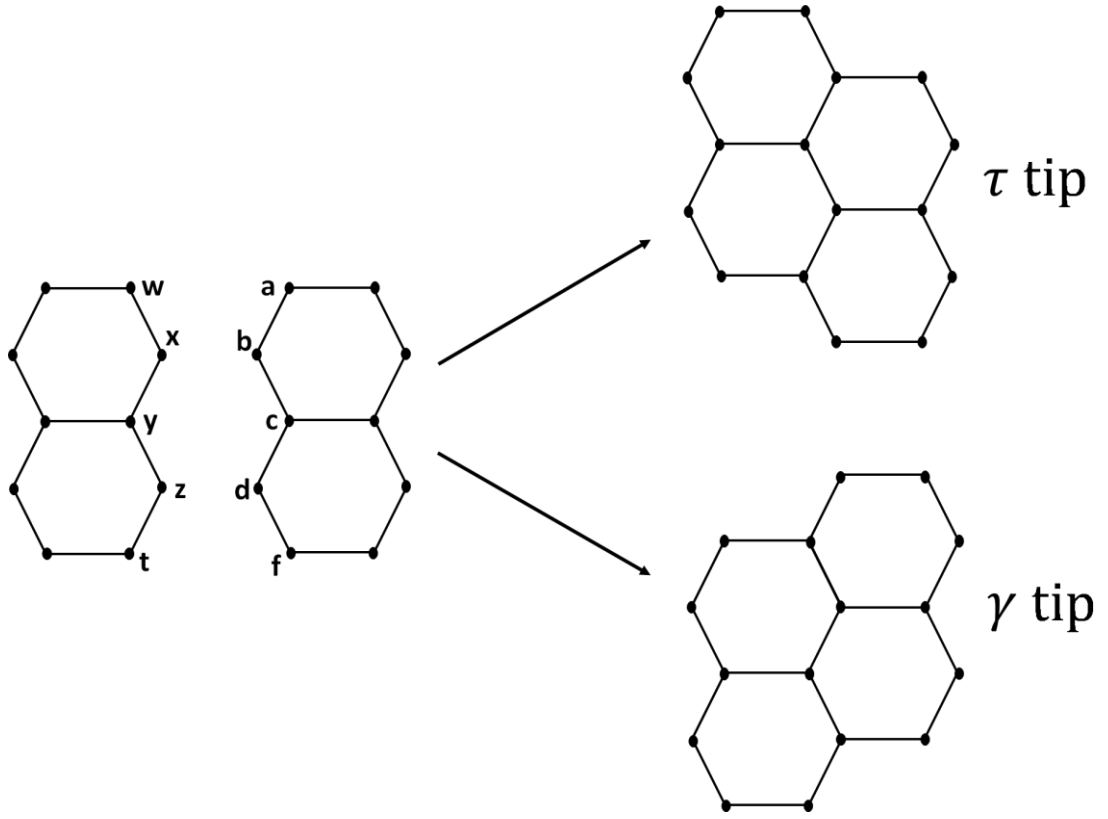
Şekil 2.7. Çift katlı benzenoid zincir

2.6.2. Tanım. Bir çift katlı benzenoid zincirde iki naftalin molekülünün kaynaşması iki tipte olabilir. Bu iki tip $w, a, x, b, y, c, z, d, t, f$ etiketli köşeler Şekil 2.8’de gösterildiği şekilde olmak üzere;

1) τ Tip: $x \equiv a, y \equiv b, z \equiv c, t \equiv d$

2) γ Tip: $w \equiv b, x \equiv c, y \equiv d, z \equiv f$

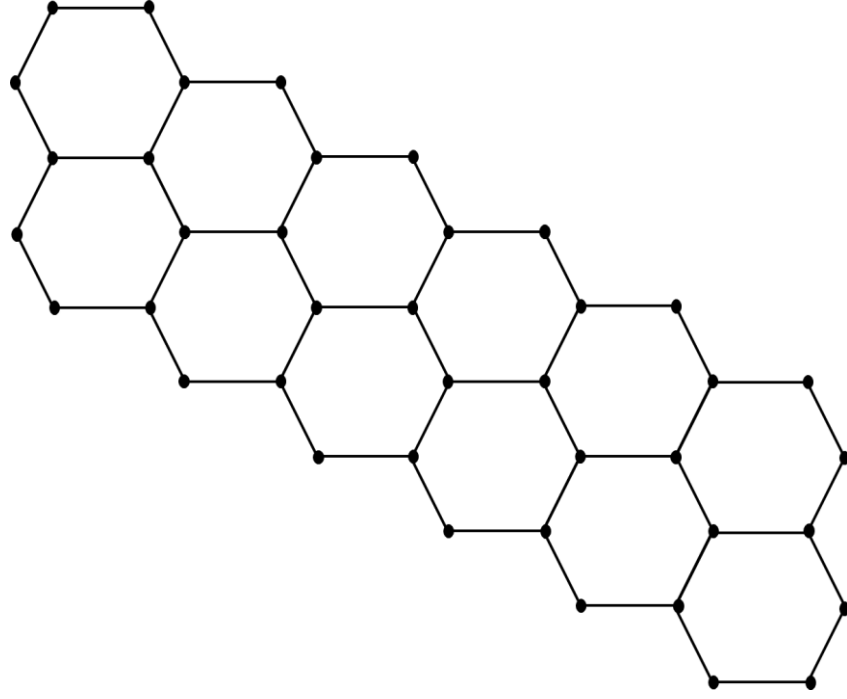
formundadır (Ren ve Zhang 2007a, Ren ve Zhang 2007b).



Şekil 2.8. Çift katlı benzenoid zincirler için kaynaşma tipleri

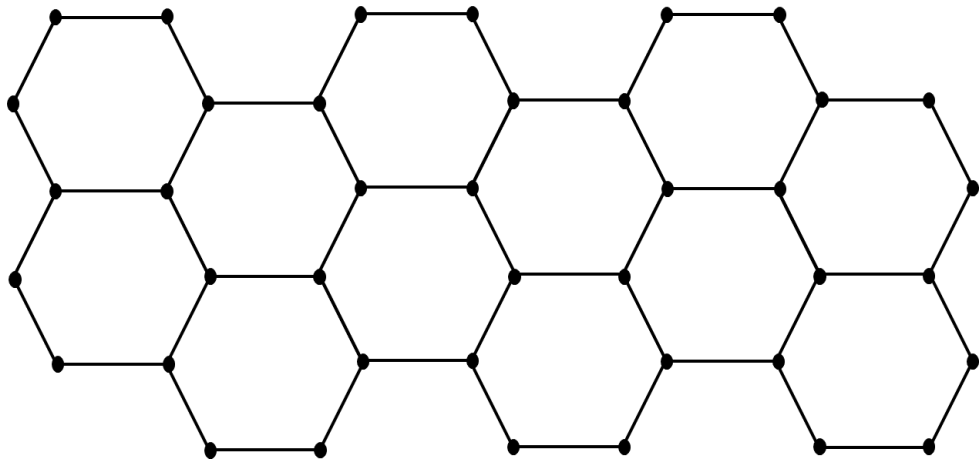
Çift katlı benzenoid zincirleri ifade ederken Tanım 2.6.2’de tanımlanan τ ve γ kaynaşma türlerini belirtmek faydalı olacaktır. Bu sebeple $2h$ tane hekzagona, h tane naftalin molekülüne ve $h - 1$ tane naftalin kaynaşma tipine sahip bir benzenoid zincir için $\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1} \in \{\tau, \gamma\}$ olmak üzere $H(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ gösterimi kullanılacaktır.

2.6.3. Tanım. Bir $H(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ çift katlı benzenoid zincirinde $1 \leq j \leq h - 2$ aralığındaki her j değeri için $\vartheta_j = \vartheta_{j+1}$ eşitliği sağlanıyor ise $H(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ zincirine *çift katlı lineer benzenoid zincir* denir.



Şekil 2.9. Çift katlı lineer benzenoid zincir $H(\tau, \tau, \tau, \tau, \tau)$

2.6.4. Tanım. Bir $H(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ çift katlı benzenoid zincirinde $1 \leq j \leq h-2$ aralığındaki her j değeri için $\vartheta_j \neq \vartheta_{j+1}$ eşitliği sağlanıyor ise $H(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ zincirine *çift katlı zik-zak benzenoid zincir* denir.



Şekil 2.10. Çift katlı zik-zak benzenoid zincir $H(\tau, \gamma, \tau, \gamma, \tau)$

2.7. Hosoya İndeksi

2.7.1. Tanım. Bir $G = (V, E)$ grafi için $M \subseteq E$ olacak şekilde bir bağımsız kenar kümesi olsun. M kümesine G grafi için bir *eşleme* denir (Bondy ve Murty 1976).

2.7.2. Tanım. k tane eleman içeren bir eşlemeye *k-eşleme* denir.

2.7.3. Tanım. $k \geq 0$ olmak üzere bir $G = (V, E)$ grafında her biri birbirinden farklı olacak şekilde seçilebilecek tüm k -eşlemelerin sayısına G grafindaki *k-eşleme sayısı* denir ve $m(G, k)$ ile gösterilir.

Tanım gereği $m(G, 0) = 1$ eşitliği mevcuttur. Ayrıca, $m(G, 1) = |E|$ olduğu aşikardır.

2.7.4. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. r değeri, $m(G, r) \neq 0$ olacak şekildeki maksimum doğal sayı olmak üzere

$$Z(G) = \sum_{k=0}^r m(G, k)$$

formunda tanımlanan ifadeye *Hosoya indeksi* denir (Hosoya 1971).

2.8. Merrifield-Simmons İndeksi

2.8.1. Tanım. Bir $G = (V, E)$ grafi için $I \subseteq V$ olacak şekilde bir bağımsız köşe kümesi olsun. I kümesine G grafi için bir *bağımsızlık kümesi* denir (Bondy ve Murty 1976).

2.8.2. Tanım. k tane eleman içeren bir bağımsızlık kümesine k -bağımsızlık kümesi denir.

2.8.3. Tanım. $k \geq 0$ olmak üzere bir $G = (V, E)$ grafında her biri birbirinden farklı olacak şekilde seçilebilecek tüm k -bağımsızlık kümelerinin sayısına G grafindeki k -bağımsızlık sayısı denir ve $n(G, k)$ ile gösterilir.

Tanım gereği $n(G, 0) = 1$ eşitliği vardır. $n(G, 1) = |V|$ olduğu açıktır.

2.8.4. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. r değeri, $n(G, r) \neq 0$ olacak şekildeki maksimum doğal sayı olmak üzere

$$i(G) = \sum_{k=0}^r n(G, k)$$

formunda tanımlanan ifadeye *Merrifield-Simmons indeksi* denir (Merrifield ve Simmons 1989).

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Kimyasal graf teorideki kombinatorik sayma ve hesaplama problemlerinin çözümünde sıklıkla çeşitli köşeler ile kenarlar üzerinde dahil etme-dışlama ilkesi kullanılmaktadır (Bonchev ve Mekenyan 2012). Bunun sonucu olarak geliştirilen rekürans bağıntıları bu çerçevede oldukça önemlidir. Bu bağıntılar tekrarlı şekilde uygulanarak bazı yapılarda istenen sonuçlar alınabilmektedir. Ancak çok büyük ve karmaşık yapılar üzerinde tekrarlı şekilde rekürans bağıntılarının uygulanması bilgisayar destekli olarak bile oldukça zorlayıcıdır. Bu noktada ise kullanılan çeşitli metotlar geliştirilmiştir. Bu bölümde bu bağıntılar ve metotlar kısaca açıklanacaktır.

3.1. Hosoya ve Merrifield-Simmons İndeksleri için Rekürans Bağıntıları

3.1.1. Lemma. $G = (V, E)$ bir graf olsun.

a) $G_1, G_2, \dots, G_k$ alt grafları G grafının tüm bağlantılı bileşenleri olmak üzere

$$Z(G) = \prod_{i=1}^k Z(G_i)$$

eşitliği sağlanır.

b) $v_i, v_j \in V, e = v_i v_j \in E$ için

$$Z(G) = Z(G - e) + Z(G - v_i - v_j)$$

eşitliği sağlanır (Gutman ve Polansky 1986).

3.1.2. Lemma. $G = (V, E)$ bir graf olsun.

a) $G_1, G_2, \dots, G_k$ alt grafları G grafının tüm bağlantılı bileşenleri olmak üzere

$$i(G) = \prod_{j=1}^k i(G_j)$$

eşitliği sağlanır.

b) $v_r, v_s \in V, e = v_r v_s \in E$ için

$$i(G) = i(G - e) - i(G - (N_G[v_r] \cup N_G[v_s]))$$

eşitliği sağlanır (Gutman ve Polansky 1986).

3.1.3. Lemma. $j \geq 1$ için P_j grafi j tane köşe sayısına sahip olan patika graf olsun.

$m(P_j, k), n(P_j, k), Z(P_j)$ ve $i(P_j)$ değerleri sırasıyla P_j patika grafının k -eşleme sayısı, k -bağımsızlık sayısı, Hosoya indeksi ve Merrifield-Simmons indeksini temsil etmek üzere aşağıdaki değerler mevcuttur.

$$m(P_1, 0) = 1, m(P_1, 1) = 0,$$

$$m(P_2, 0) = 1, m(P_2, 1) = 1, m(P_2, 2) = 0,$$

$$m(P_3, 0) = 1, m(P_3, 1) = 2, m(P_3, 2) = 0,$$

$$m(P_4, 0) = 1, m(P_4, 1) = 3, m(P_4, 2) = 1, m(P_4, 3) = 0,$$

$$\begin{aligned}
m(P_5, 0) &= 1, m(P_5, 1) = 4, m(P_5, 2) = 3, m(P_5, 3) = 0, \\
m(P_6, 0) &= 1, m(P_6, 1) = 5, m(P_6, 2) = 6, m(P_6, 3) = 1, m(P_6, 4) = 0, \\
n(P_1, 0) &= 1, n(P_1, 1) = 1, n(P_1, 2) = 0, \\
n(P_2, 0) &= 1, n(P_2, 1) = 2, n(P_2, 2) = 0, \\
n(P_3, 0) &= 1, n(P_3, 1) = 3, n(P_3, 2) = 1, n(P_3, 3) = 0, \\
n(P_4, 0) &= 1, n(P_4, 1) = 4, n(P_4, 2) = 3, n(P_4, 3) = 0, \\
n(P_5, 0) &= 1, n(P_5, 1) = 5, n(P_5, 2) = 6, n(P_5, 3) = 1, n(P_5, 4) = 0, \\
n(P_6, 0) &= 1, n(P_6, 1) = 6, n(P_6, 2) = 10, n(P_6, 3) = 4, n(P_6, 4) = 0, \\
Z(P_1) &= m(P_1, 0) = 1, \\
Z(P_2) &= m(P_2, 0) + m(P_2, 1) = 2, \\
Z(P_3) &= m(P_3, 0) + m(P_3, 1) = 3, \\
Z(P_4) &= m(P_4, 0) + m(P_4, 1) + m(P_4, 2) = 5, \\
Z(P_5) &= m(P_5, 0) + m(P_5, 1) + m(P_5, 2) = 8, \\
Z(P_6) &= m(P_6, 0) + m(P_6, 1) + m(P_6, 2) + m(P_6, 3) = 13, \\
i(P_1) &= n(P_1, 0) + n(P_1, 1) = 2, \\
i(P_2) &= n(P_2, 0) + n(P_2, 1) = 3, \\
i(P_3) &= n(P_3, 0) + n(P_3, 1) + n(P_3, 2) = 5, \\
i(P_4) &= n(P_4, 0) + n(P_4, 1) + n(P_4, 2) = 8, \\
i(P_5) &= n(P_5, 0) + n(P_5, 1) + n(P_5, 2) + n(P_5, 3) = 13, \\
i(P_6) &= n(P_6, 0) + n(P_6, 1) + n(P_6, 2) + n(P_6, 3) = 21.
\end{aligned}$$

3.1.4. Örnek. $G = (V, E)$ köşeleri a, b, c, d, f, g şeklinde etiketlenerek verilen C_6 devir grafi olsun.

İlk olarak C_6 devir grafının Hosoya indeksi $e = ab \in G$ kenarı üzerinden Lemma 3.1.1 yardımıyla hesaplanmak istenirse;

$$Z \left(\begin{array}{c} \text{a} \quad \text{c} \quad \text{d} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{b} \quad \text{f} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{g} \end{array} \right) = Z \left(\begin{array}{c} \text{a} \quad \text{c} \quad \text{d} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{b} \quad \text{f} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{g} \end{array} \right) + Z \left(\begin{array}{c} \text{c} \quad \text{d} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{f} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{g} \end{array} \right)$$

Şekil 3.1. C_6 devir grafı için Hosoya indeksi rekürans ifadesi

denkleminde ulaşılır. Denklemin sağ tarafında bulunan $Z(P_6) = m(P_6, 0) + m(P_6, 1) + m(P_6, 2) + m(P_6, 3) = 1 + 5 + 6 + 1 = 13$ ve ayrıca $Z(P_4) = m(P_4, 0) + m(P_4, 1) + m(P_4, 2) = 1 + 3 + 1 = 5$ değerleri basit şekilde hesaplanarak $Z(C_6) = 13 + 5 = 18$ sonucuna varılır.

İkinci olarak C_6 devir grafının Merrifield-Simmons indeksi $e = ab \in G$ kenarı silinerek Lemma 3.1.2 yardımıyla hesaplanmak istenirse;

$$i \left(\begin{array}{c} \text{a} \quad \text{c} \quad \text{d} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{b} \quad \text{f} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{g} \end{array} \right) = i \left(\begin{array}{c} \text{a} \quad \text{c} \quad \text{d} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{b} \quad \text{f} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{g} \end{array} \right) - i \left(\begin{array}{c} \text{d} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{f} \end{array} \right)$$

Şekil 3.2. C_6 devir grafı için Merrifield-Simmons indeksi rekürans ifadesi

denklemini elde edilir. Buradan $i(P_6) = n(P_6, 0) + n(P_6, 1) + n(P_6, 2) + n(P_6, 3) = 1 + 6 + 10 + 4 = 21$ değeri elde edilir. Benzer şekilde $i(P_2) = n(P_2, 0) + n(P_2, 1) = 1 + 2 = 3$ değeri de elde edilerek $i(C_6) = 21 - 3 = 18$ sonucuna ulaşılır.

Lemma 3.1.1 ve Lemma 3.1.2'nin paralelinde aşağıdaki lemmalara $m(G, k)$ ve $n(G, k)$ tanımlarından ulaşılabilir.

3.1.5. Lemma. $G = (V, E)$ bir graf olsun.

a) G_1, G_2 alt grafları $G = G_1 \cup G_2$ olacak şekildeki G grafının bağlantılı bileşenleri olmak üzere

$$m(G, k) = m(G_1, k)m(G_2, 0) + m(G_1, k-1)m(G_2, 1) + \dots + m(G_1, 0)m(G_2, k)$$

eşitliği sağlanır.

b) $v_i, v_j \in V, e = v_i v_j \in E$ için

$$m(G, k) = m(G - e, k) + m(G - v_i - v_j, k-1)$$

eşitliği sağlanır (Hosoya ve Ohkami 1983).

3.1.6. Lemma. $G = (V, E)$ bir graf olsun.

a) G_1, G_2 alt grafları $G = G_1 \cup G_2$ olacak şekildeki G grafının bağlantılı bileşenleri olmak üzere

$$n(G, k) = n(G_1, k)n(G_2, 0) + n(G_1, k-1)n(G_2, 1) + \dots + n(G_1, 0)n(G_2, k)$$

eşitliği sağlanır.

b) $v_i, v_j \in V, e = v_i v_j \in E$ için

$$n(G, k) = n(G - e, k) - n(G - N_G[v_i] - N_G[v_j], k - 2)$$

eşitliği sağlanır.

3.1.7. Örnek. $G = (V, E)$ Şekil 3.1’de Hosoya indeksi hesaplanan ve köşeleri a, b, c, d, f, g şeklinde etiketlenerek verilen C_6 devir grafi olsun. G grafinın 3-eşleme ve 3-bağımsızlık sayıları sırasıyla Lemma 3.1.5 ve Lemma 3.1.6 kullanılarak;

$$\begin{aligned} m(G, 3) &= m(G - ab, 3) + m(G - a - b, 2) \\ &= m(P_6, 3) + m(P_4, 2) \\ &= 1 + 1 \\ &= 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n(G, 3) &= n(G - ab, 3) - n(G - N_G[a] - N_G[b], 1) \\ &= n(P_6, 3) - n(P_2, 1) \\ &= 4 - 2 \\ &= 2 \end{aligned}$$

olarak elde edilir.

3.2. Hosoya Vektörü

Cruz ve ark. (2017) tarafından bir G grafının bir kenarı üzerinde tanımlanan Hosoya vektörü aşağıdaki tanımda verilmektedir.

3.2.1. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. $v_i, v_j \in V, e = v_i v_j \in E$ için G grafının e kenarı üzerindeki *Hosoya vektörü*

$$Z_{v_i v_j}(G) = \begin{bmatrix} Z(G) \\ Z(G - v_i) \\ Z(G - v_j) \\ Z(G - v_i - v_j) \end{bmatrix}$$

şeklinde tanımlanır (Cruz ve ark. 2017).

3.2.2. Örnek. $G = (V, E)$ köşeleri a, b, c, d, f, g şeklinde etiketlenerek Örnek 3.1.4'te verilen C_6 devir grafi olsun. Burada $Z(P_5) = m(P_5, 0) + m(P_5, 1) + m(P_5, 2) = 1 + 4 + 3 = 8$ şeklinde hesaplanır. Ayrıca, $Z(C_6) = 18$ ve $Z(P_4) = 5$ olarak Örnek 3.1.4'te hesaplandığından $e = ab \in E$ kenarı üzerindeki Hosoya vektörü

$$Z_{ab}(G) = \begin{bmatrix} Z(G) \\ Z(G - a) \\ Z(G - b) \\ Z(G - a - b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z(C_6) \\ Z(P_5) \\ Z(P_5) \\ Z(P_4) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 18 \\ 8 \\ 8 \\ 5 \end{bmatrix}$$

olarak bulunur.

Cruz ve ark. (2017) verilen bir G grafının bir kenarı üzerinde tanımladıkları Hosoya vektörü ve Lemma 3.1.1'de verilen Hosoya indeksi için rekürans bağıntıları yardımıyla

iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin Hosoya indeksini 4×4 boyutlu doğal sayı içerikli matrisler ile bir vektörün çarpımına dayanarak hesaplayan indirgeme formülleri elde etmişlerdir.

Transfer matris tekniği Polansky ve ark. (1989), Randic ve ark. (1989) tarafından yapılan çalışmalarda olduğu gibi matematiksel kimya alanında birçok sayma probleminde yaklaşım olarak kullanılmıştır (Bonchev ve Mekenyan 2012). Cruz ve ark. (2017) tarafından yapılan çalışmada da kullanılan yaklaşımın transfer matris tekniği olduğu gözlemlenebilir.

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE BULGULAR

4.1. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin k -Eşleme Sayılarının Hesaplanması

Bu bölümde iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin $\forall k \geq 0$ için k -eşleme sayısının hesabına yönelik matris çarpımlarına dayanan indirgeme formülleri verilecektir. Sonuç olarak, $\forall k \geq 0$ için herhangi bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin k -eşleme sayısı $4(k+1) \times 4(k+1)$ boyutlu, doğal sayı içerikli matrislerin $4(k+1) \times 1$ boyutlu, doğal sayı içerikli bir vektör ile çarpımı yoluyla hesaplanabilir olacaktır.

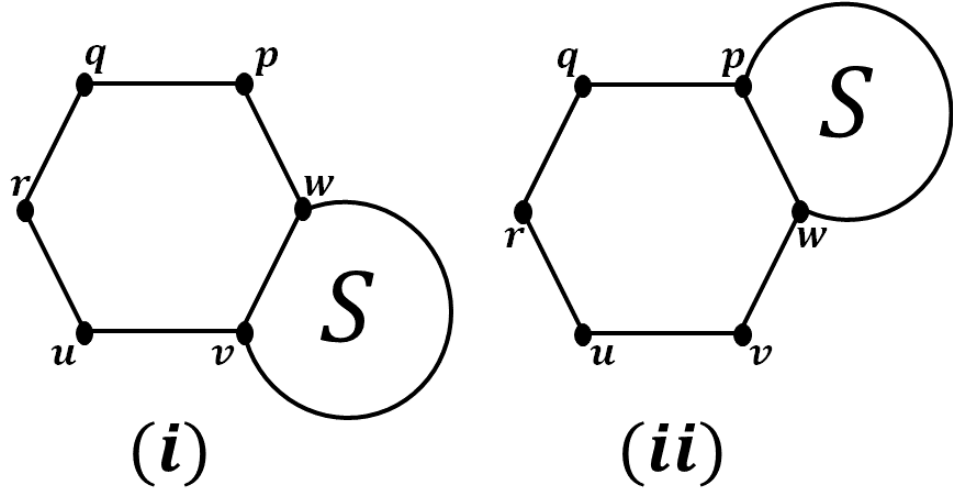
İlk olarak bu bölümde verilecek olan teoremlerin ve ispatların temelini oluşturacak olan $4(k+1) \times 1$ tipindeki vektör tanımlanacaktır.

4.1.1. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. G grafının $e = qr \in E$ kenarı üzerindeki $k \geq 0$ için k -eşleme vektörü

$$m_{qr}(G, k) = \begin{bmatrix} m(G, k) \\ m(G, k-1) \\ \vdots \\ m(G, 0) \\ m(G-q, k) \\ m(G-q, k-1) \\ \vdots \\ m(G-q, 0) \\ m(G-r, k) \\ m(G-r, k-1) \\ \vdots \\ m(G-r, 0) \\ m(G-q-r, k) \\ m(G-q-r, k-1) \\ \vdots \\ m(G-q-r, 0) \end{bmatrix}$$

formundadır (Oz ve Cangul 2022a).

Bir sonraki şekilde Bölümler 4.1, 4.2 ve 4.3’de verilecek olan her bölümün ilk üç teoremini ve bu teoremlerin ispatlarını daha anlaşılır şekilde sunma maksadıyla iki izomorfik graf yapısı farklı köşe etiketlerine sahip olarak gösterilmektedir.



Şekil 4.1. Teoremler 4.1.3-4.1.5, 4.2.3-4.2.5, 4.3.3-4.3.5 için kullanılacak iç noktasız - yoğunlaştırılmış benzenoid sistem formu türleri

4.1.2. Lemma. $G = (V, E)$ bir graf ve $e = qr \in E$, G grafının bir kenarı olsun.

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

formunda $k \geq 0$ için $4(k+1) \times 4(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$m_{qr}(G, k) = D \cdot m_{rq}(G, k)$$

eşitliği sağlanır.

İspat. $m_{qr}(G, k)$ vektörünün tanımından açıktır.

4.1.3. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafı ve bir hegzagonun ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (i) şıkkında görülebilir). O halde

[illegible]

formunda $k \geq 0$ için $4(k+1) \times 4(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$m_{qr}(G, k) = A \cdot m_{wv}(S, k)$$

eşitliği sağlanır (Oz ve Cangul 2022a).

İspat. İlk olarak $m_{qr}(G, k)$ değerini hesaplamak için sırasıyla $m(G, k), m(G - q, k), m(G - r, k), m(G - q - r, k)$ değerlerinin hesaplanması gereklidir. Bu hesap vu, wp kenarlarının her ikisi de alt graflardan silinerek ve Lemma 3.1.5 kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned}
m(G, k) &= m(G - vu - wp, k) + m(G - vu - w - p, k - 1) \\
&\quad + m(G - v - u - wp, k - 1) + m(G - v - u - w - p, k - 2) \\
&= m(S, k) + 3m(S, k - 1) + m(S, k - 2) + m(S - w, k - 1) \\
&\quad + 2m(S - w, k - 2) + m(S - v, k - 1) + 2m(S - v, k - 2) \\
&\quad + m(S - w - v, k - 2) + m(S - w - v, k - 3) \\
&= (1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0) \cdot m_{wv}(S, k), \\
m(G - q, k) &= m(G - q - vu - wp, k) + m(G - q - vu - w - p, k - 1) \\
&\quad + m(G - q - v - u - wp, k - 1) + m(G - q - v - u - w - p, k - 2) \\
&= m(S, k) + m(S, k - 1) + m(S - w, k - 1) + m(S - w, k - 2) \\
&\quad + m(S - v, k - 1) + m(S - w - v, k - 2) \\
&= (1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{wv}(S, k), \\
m(G - r, k) &= m(G - r - vu - wp, k) + m(G - r - vu - w - p, k - 1) \\
&\quad + m(G - r - v - u - wp, k - 1) + m(G - r - v - u - w - p, k - 2) \\
&= m(S, k) + m(S, k - 1) + m(S - w, k - 1) + m(S - v, k - 1) \\
&\quad + m(S - v, k - 2) + m(S - w - v, k - 2) \\
&= (1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{wv}(S, k), \\
m(G - q - r, k) &= m(G - q - r - vu - wp, k) + m(G - q - r - vu - w - p, k - 1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +m(G - q - r - v - u - wp, k - 1) \\
& +m(G - q - r - v - u - w - p, k - 2) \\
& = m(S, k) + m(S - w, k - 1) + m(S - v, k - 1) \\
& +m(S - w - v, k - 2) \\
& = (1, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{wv}(S, k).
\end{aligned}$$

k -eşleme vektörü tanımından hareketle;

$$\begin{aligned}
& (1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0) \\
& (1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0) \\
& (1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0) \\
& (1, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0)
\end{aligned}$$

vektörleri $m_{qr}(G, k) = A \cdot m_{wv}(S, k)$ eşitliğini sağlayacak şekildeki A matrisinin sırasıyla $1, (k + 2), (2k + 3), (3k + 4)$. satırlarını oluşturur. Devamında A matrisinin kalan satırlarını bulmak için $m(G, k - 1), \dots, m(G, 0), m(G - q, k - 1), \dots, m(G - q, 0), m(G - r, k - 1), \dots, m(G - r, 0)$ ve $m(G - q - r, k - 1), \dots, m(G - q - r, 0)$ değerlerinin de ayrı ayrı hesaplanması gerekir. Ancak bu değerleri uzun uzun hesaplamaya gerek yoktur. Çünkü yukarıda bulunan $m(G, k), m(G - q, k), m(G - r, k), m(G - q - r, k)$ değerlerinin elde edildiği denklemlerden çıkarım yapılarak her denklemdaki ifadelerde sadece k değerlerinin azalacağı gözlemlenebilir. Bu sebeple A matrisinin satırları her grupta $k + 1$ tane satır olacak şekilde sütunları da her bölümde $k + 1$ tane sütun olacak şekilde 4 bölüme ayrılırsa oluşan 16 tane alt matris formundaki her satırın içerikleri bir sonraki satırda merdiven (satırca eşelon) formunda bir sağa atlayarak aynı şekilde yer alır. Böylece A matrisi yukarıda verildiği şekilde $4(k + 1) \times 4(k + 1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olmak üzere $m_{qr}(G, k) = A \cdot m_{wv}(S, k)$ eşitliğine ulaşılır.

Bu teoremin bir sonucu olarak $S \cong P_2$ olduğu durumda $m_{qr}(G, k) = A \cdot m_{wv}(P_2, k) = [0, \dots, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1]^T$ olduğu görülebilir.

4.1.4. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve bir hekzagonun ortak bir $e = pw \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (ii) şikkında görülebilir). O halde

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 3 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

formunda $k \geq 0$ için $4(k + 1) \times 4(k + 1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$m_{qr}(G, k) = B \cdot m_{pw}(S, k)$$

eşitliği sağlanır (Oz ve Cangul 2022a).

İspat. $m_{qr}(G, k)$ vektörünün tüm içeriklerini hesaplamak için öncelikle $m(G, k), m(G - q, k), m(G - r, k), m(G - q - r, k)$ değerlerini hesaplamak gereklidir. Bu değerler

wv, pq kenarlarının her alt graf için uygun formda silinmesiyle ve Lemma 3.1.5 kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned}
m(G, k) &= m(G - wv - pq, k) + m(G - wv - p - q, k - 1) \\
&\quad + m(G - w - v - pq, k - 1) + m(G - w - v - p - q, k - 2) \\
&= m(S, k) + 3m(S, k - 1) + m(S, k - 2) + m(S - p, k - 1) \\
&\quad + 2m(S - p, k - 2) + m(S - w, k - 1) + 2m(S - w, k - 2) \\
&\quad + m(S - p - w, k - 2) + m(S - p - w, k - 3) \\
&= (1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0) \cdot m_{pw}(S, k),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m(G - q, k) &= m(G - q - wv, k) + m(G - q - w - v, k - 1) \\
&= m(S, k) + 2m(S, k - 1) + m(S - w, k - 1) + m(S - w, k - 2) \\
&= (1, 2, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{pw}(S, k),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m(G - r, k) &= m(G - r - wv - pq, k) + m(G - r - wv - p - q, k - 1) \\
&\quad + m(G - r - w - v - pq, k - 1) + m(G - r - w - v - p - q, k - 2) \\
&= m(S, k) + m(S, k - 1) + m(S - p, k - 1) + m(S - p, k - 2) \\
&\quad + m(S - w, k - 1) + m(S - p - w, k - 2) \\
&= (1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{pw}(S, k),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m(G - q - r, k) &= m(G - q - r - wv, k) + m(G - q - r - w - v, k - 1) \\
&= m(S, k) + m(S, k - 1) + m(S - w, k - 1) \\
&= (1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{pw}(S, k).
\end{aligned}$$

k -eşleme vektörü tanımından hareketle;

$$(1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 2, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0)$$

vektörleri $m_{qr}(G, k) = B \cdot m_{pw}(S, k)$ eşitliği sağlanacak şekildeki B matrisinin sırasıyla $1., (k+2)., (2k+3)., (3k+4).$ satırlarını oluşturur. B matrisinin kalan satırlarını bulmak için $m(G, k-1), \dots, m(G, 0), m(G-q, k-1), \dots, m(G-q, 0), m(G-r, k-1), \dots, m(G-r, 0)$ ve $m(G-q-r, k-1), \dots, m(G-q-r, 0)$ değerlerinin de ayrı ayrı hesaplanması gerekir. Teorem 4.1.3'ün ispatında açıklandığı gibi bu değerlerin uzun uzun hesaplanmasına gerek yoktur. Dolayısıyla B matrisinin satırları her grupta $k+1$ tane satır olacak şekilde sütunları da her bölümde $k+1$ tane sütun olacak şekilde 4 bölüme ayrılırsa oluşan 16 tane alt matris formundaki her satırın içerikleri bir sonraki satırda merdiven (satırca eşelon) formunda bir sağa atlayarak aynı şekilde yer alır. Böylece B matrisi yukarıda verildiği şekilde $4(k+1) \times 4(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olmak üzere $m_{qr}(G, k) = B \cdot m_{pw}(S, k)$ eşitliğine ulaşılır.

4.1.5. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve bir hegzagonun ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (i) şıkında görülebilir). O halde

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 3 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

formunda $k \geq 0$ için $4(k+1) \times 4(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$m_{ru}(G, k) = C \cdot m_{wv}(S, k)$$

eşitliği sağlanır (Oz ve Cangul 2022a).

İspat. İlk olarak $m(G, k)$ ve $m(G - r, k)$ değerleri Teorem 4.1.3'ün ispatında bir vektör ile $m_{wv}(S, k)$ vektörünün çarpımı olarak elde edildiğinden geriye kalan $m(G - u, k)$, $m(G - r - u, k)$ değerlerinin hesabı yapılmalıdır. Bu değerler $G - u$ ve $G - r - u$ alt graflarından wp kenarı silinerek ve Lemma 3.1.5 kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

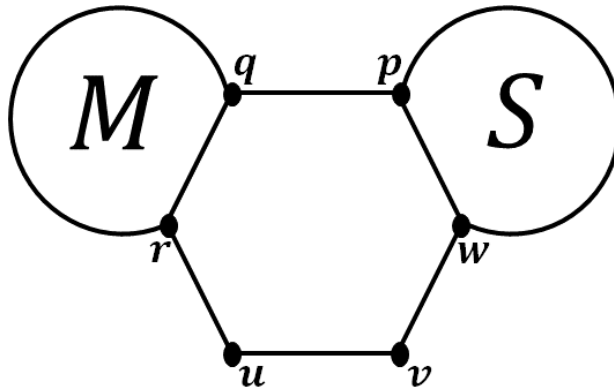
$$\begin{aligned} m(G - u, k) &= m(G - u - wp, k) + m(G - u - w - p, k - 1) \\ &= m(S, k) + 2m(S, k - 1) + m(S - w, k - 1) + m(S - w, k - 2) \\ &= (1, 2, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{wv}(S, k), \\ m(G - r - u, k) &= m(G - r - u - wp, k) + m(G - r - u - w - p, k - 1) \\ &= m(S, k) + m(S, k - 1) + m(S - w, k - 1) \\ &= (1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0) \cdot m_{wv}(S, k). \end{aligned}$$

k -eşleme vektörü tanımından hareketle;

$$\begin{aligned} &(1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0) \\ &(1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0) \\ &(1, 2, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0) \\ &(1, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0) \end{aligned}$$

vektörleri $m_{ru}(G, k) = C \cdot m_{wv}(S, k)$ denklemini sağlayacak şekildeki C matrisinin sırasıyla $1., (k + 2)., (2k + 3)., (3k + 4).$ satırlarını oluşturur. C matrisinin geriye kalan satırlarını bulmak için $m(G, k - 1), \dots, m(G, 0), m(G - r, k - 1), \dots, m(G - r, 0), m(G - u, k - 1), \dots, m(G - u, 0)$ ve $m(G - r - u, k - 1), \dots, m(G - r - u, 0)$ değerlerinin de ayrı ayrı hesaplanması gerekir. Önceki iki teoremin ispatında açıklandığı gibi bu değerlerin uzun uzun hesabı yapılmadan C matrisinin satırları her grupta $k + 1$ tane satır olacak şekilde sütunları da her bölümde $k + 1$ tane sütun olacak şekilde 4 bölüme ayrılırsa oluşan 16 tane alt matris formundaki her satırın içerikleri bir sonraki satırda merdiven (satırca eşelon) formunda bir sağa atlayarak aynı şekilde yer alır. Böylece C matrisi teoremin ifadesinde verildiği şekilde $4(k + 1) \times 4(k + 1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olmak üzere $m_{ru}(G, k) = C \cdot m_{wv}(S, k)$ denklemi elde edilir.

Buraya kadar sunulan teoremler sonuç kısmında iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin indirgenmesinde sistemdeki en fazla iki hekzagona komşu olan hekzagonlar için kullanılacaktır. Bir sonraki şekil ise sonuç kısmındaki indirgemelerde sistemde üç hekzagona komşu olarak var olan hekzagonlar için bölümün devamında sunulacak olan Teorem 4.1.6'da ve bu teoremin sonucu olan Sonuç 4.1.7'de kullanılacaktır.



Şekil 4.2. Teoremler 4.1.6, 4.2.6, 4.3.6 ve Sonuçlar 4.1.7, 4.2.7 için kullanılacak iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem formu türü

Sunulacak olan Teorem 4.1.6 ve Sonuç 4.1.7’de kullanılacak olan $4(k + 1) \times 4(k + 1)$ boyutlu matris formları $j = 1, 2, 3, 4$ olmak üzere E_j ile gösterilerek aşağıdaki şekilde tanımlanacaktır:

[illegible]

[illegible]

görülebilir). O halde $k \geq 0$ ve $j = 1, 2, 3, 4$ için E_j matrisleri yukarıda verilen formda matrisler olmak üzere

$$\begin{bmatrix} m(G, k) \\ m(G - u, k) \\ m(G - v, k) \\ m(G - u - v, k) \end{bmatrix} = \left[(E_j \cdot m_{rq}(M, k))_j \right]^T \cdot m_{wp}(S, k)$$

denklemini sağlar.

İspat. $m(G, k), m(G - u, k), m(G - v, k), m(G - u - v, k)$ değerleri gerekli olan alt graflardan pq, wv ve ru kenarlarının çeşitli kombinasyonlarda silinerek ve Lemma 3.1.5 kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned} m(G, k) &= m(G - pq - wv - ru, k) + m(G - pq - wv - r - u, k - 1) \\ &\quad + m(G - pq - w - v - ru, k - 1) + m(G - pq - w - v - r - u, k - 2) \\ &\quad + m(G - p - q - wv - ru, k - 1) + m(G - p - q - wv - r - u, k - 2) \\ &\quad + m(G - p - q - w - v - ru, k - 2) \\ &\quad + m(G - p - q - w - v - r - u, k - 3) \\ &= m(P_2 \cup M \cup S, k) + m(M - r \cup S, k - 1) + m(M \cup S - w, k - 1) \\ &\quad + m(M - r \cup S - w, k - 2) + m(P_2 \cup M - q \cup S - p, k - 1) \\ &\quad + m(M - q - r \cup S - p, k - 2) + m(M - q \cup S - p - w, k - 2) \\ &\quad + m(M - q - r \cup S - p - w, k - 3) \\ &= [m(M, k) + m(M, k - 1) + m(M - r, k - 1)] \cdot m(S, 0) \\ &\quad + [m(M, k - 1) + m(M, k - 2) + m(M - r, k - 2)] \cdot m(S, 1) + \dots \\ &\quad + [m(M, 1) + m(M, 0) + m(M - r, 0)] \cdot m(S, k - 1) + m(M, 0) \cdot m(S, k) + \\ &\quad + [m(M, k - 1) + m(M - r, k - 2)] \cdot m(S - w, 0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +[m(M, k-2) + m(M-r, k-3)] \cdot m(S-w, 1) + \dots \\
& +[m(M, 1) + m(M-r, 0)] \cdot m(S-w, k-2) + m(M, 0) \cdot m(S-w, k-1) \\
& +[m(M-q, k-1) + m(M-q, k-2) + m(M-q-r, k-2)] \cdot m(S-p, 0) \\
& +[m(M-q, k-2) + m(M-q, k-3) + m(M-q-r, k-3)] \cdot m(S-p, 1) + \dots \\
& +[m(M-q, 1) + m(M-q, 0) + m(M-q-r, 0)] \cdot m(S-p, k-2) \\
& +m(M-q, 0) \cdot m(S-p, k-1) \\
& +[m(M-q, k-2) + m(M-q-r, k-3)] \cdot m(S-w-p, 0) \\
& +[m(M-q, k-3) + m(M-q-r, k-4)] \cdot m(S-w-p, 1) + \dots \\
& +[m(M-q, 1) + m(M-q-r, 0)] \cdot m(S-w-p, k-3) \\
& +m(M-q, 0) \cdot m(S-w-p, k-2).
\end{aligned}$$

Dolayısıyla, E_1 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$m(G, k) = [E_1 \cdot m_{rq}(M, k)]^T \cdot m_{wp}(S, k)$$

denkleminde ulaşılır.

$$\begin{aligned}
m(G-u, k) &= m(G-u-pq-wv, k) + m(G-u-pq-w-v, k-1) \\
&+ m(G-u-p-q-wv, k-1) + m(G-u-p-q-w-v, k-2) \\
&= m(M \cup S, k) + m(M \cup S-w, k-1) + m(M-q \cup S-p, k-1) \\
&+ m(M-q \cup S-p-w, k-2) \\
&= m(M, k) \cdot m(S, 0) + m(M, k-1) \cdot m(S, 1) + \dots \\
&+ m(M, 0) \cdot m(S, k) + m(M, k-1) \cdot m(S-w, 0) \\
&+ m(M, k-2) \cdot m(S-w, 1) + \dots + m(M, 0) \cdot m(S-w, k-1) \\
&+ m(M-q, k-1) \cdot m(S-p, 0) + m(M-q, k-2) \cdot m(S-p, 1) + \dots
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +m(M-q, 0) \cdot m(S-p, k-1) + m(M-q, k-2) \cdot m(S-w-p, 0) \\
& +m(M-q, k-3) \cdot m(S-w-p, 1) + \dots \\
& +m(M-q, 0) \cdot m(S-w-p, k-2).
\end{aligned}$$

Buradan, E_2 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$m(G-u, k) = [E_2 \cdot m_{rq}(M, k)]^T \cdot m_{wp}(S, k)$$

denkleminde ulaşılır.

$$\begin{aligned}
m(G-v, k) &= m(G-v-pq-ru, k) + m(G-v-pq-r-u, k-1) \\
&+ m(G-v-p-q-ru, k-1) + m(G-u-p-q-r-u, k-2) \\
&= m(M \cup S, k) + m(M-r \cup S, k-1) + m(M-q \cup S-p, k-1) \\
&+ m(M-q-r \cup S-p, k-2) \\
&= [m(M, k) + m(M-r, k-1)] \cdot m(S, 0) \\
&+ [m(M, k-1) + m(M-r, k-2)] \cdot m(S, 1) + \dots \\
&+ [m(M, 1) + m(M-r, 0)] \cdot m(S, k-1) + m(M, 0) \cdot m(S, k) \\
&+ [m(M-q, k-1) + m(M-q-r, k-2)] \cdot m(S-p, 0) \\
&+ [m(M-q, k-2) + m(M-q-r, k-3)] \cdot m(S-p, 1) + \dots \\
&+ [m(M-q, 1) + m(M-q-r, 0)] \cdot m(S-p, k-2) \\
&+ m(M-q, 0) \cdot m(S-p, k-1).
\end{aligned}$$

Buna göre E_3 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$m(G-v, k) = [E_3 \cdot m_{rq}(M, k)]^T \cdot m_{wp}(S, k)$$

denklemine ulaşılır.

$$\begin{aligned}
m(G - u - v, k) &= m(G - u - v - pq, k) + m(G - u - v - p - q, k - 1) \\
&= m(M \cup S, k) + m(M - q \cup S - p, k - 1) \\
&= m(M, k) \cdot m(S, 0) + m(M, k - 1) \cdot m(S, 1) + \dots \\
&\quad + m(M, 0) \cdot m(S, k) + m(M - q, k - 1) \cdot m(S - p, 0) + \\
&\quad + m(M - q, k - 2) \cdot m(S - p, 1) + \dots \\
&\quad + m(M - q, 0) \cdot m(S - p, k - 1).
\end{aligned}$$

Son olarak E_4 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$m(G - u - v, k) = [E_4 \cdot m_{rq}(M, k)]^T \cdot m_{wp}(S, k)$$

denklemine ulaşılır.

Sonuç olarak bulunan dört değer toplu halde $k \geq 0$ ve $j = 1, 2, 3, 4$ için E_j matrisleri yukarıda verilen formda matrisler olmak üzere

$$\begin{bmatrix} m(G, k) \\ m(G - u, k) \\ m(G - v, k) \\ m(G - u - v, k) \end{bmatrix} = \left[(E_j \cdot m_{rq}(M, k))_j \right]^T \cdot m_{wp}(S, k)$$

denklemini elde edilir.

Yukarıdaki Teorem 4.1.6'nın ispatı boyunca kenar silme işlemlerinde oluşan P_1 patika graflarının k -eşleme sayısını arttırmadığı için yazılmayarak işlem kalabalıklığından kaçınıldığını bir not olarak belirtmek faydalı olacaktır.

Bölümün buraya kadar olan kısmında görüldüğü gibi iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin k -eşleme sayılarının hesabına yönelik önerilen metotta k -eşleme vektörü kritik konumdadır. Şöyle ki, verilen bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemde her hekzagon en fazla iki tane hekzagona komşu ise hekzagonların bir kenarı üzerinde tanımlanan k -eşleme vektörü kullanılarak yapılan indirgemeler sayesinde sistemin k -eşleme sayısının hesabına yönelik önerilen metot sadece Teoremler 4.1.3, 4.1.4 ve 4.1.5'ü içermektedir. Ancak, verilen sistemde üç tane hekzagona komşu olan en az bir tane hekzagon var ise o zaman bu teoremler yetersiz kalmaktadır. Çünkü, bu sistemin k -eşleme sayısının hesabı için sistemdeki üç tane hekzagona komşu olan tüm hekzagonların diğer komşu üç hekzagonlardan bir tanesi ile ortak olan bir kenarı üzerindeki k -eşleme vektörüne ihtiyaç duyulmaktadır. Kısaca, sistemde üç tane hekzagona komşu olan bir tane hekzagon var olsun ve bu hekzagonun diğer üç hekzagonlardan bir tanesi ile ortak kullandığı bir kenar $e = uv$ ise önerilen metodun uygulanabilmesi için $m_{uv}(G, k)$ vektörüne ihtiyaç duyulacaktır. Buradan hareketle $m_{uv}(G, k)$ vektörüne ulaşmak için Teorem 4.1.6'da elde edilen

$$\begin{bmatrix} m(G, k) \\ m(G - u, k) \\ m(G - v, k) \\ m(G - u - v, k) \end{bmatrix}$$

vektörü önerilen metot açısından önemli bir yere sahiptir.

Bu vektör sayesinde $m_{uv}(G, k)$ vektörüne şu şekilde ulaşılabilir:

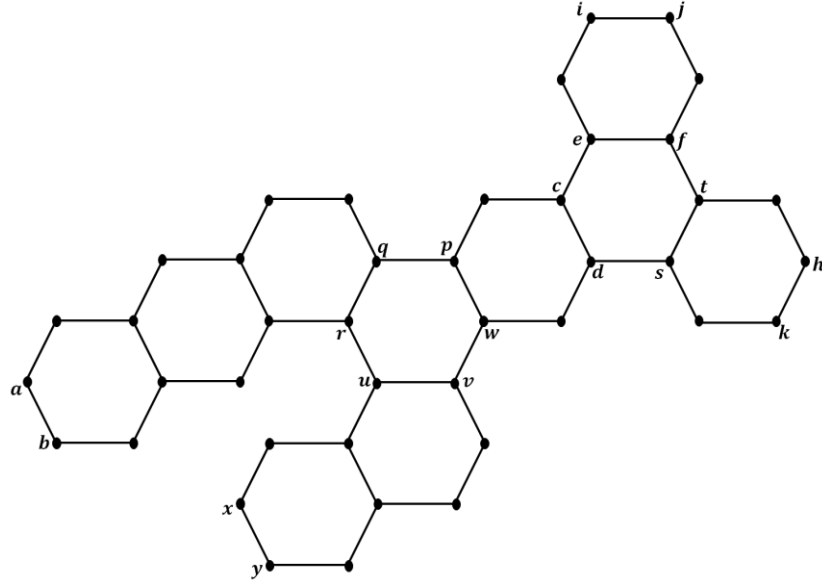
$j = 1, 2, 3, 4$ için $\left[(E_j \cdot m_{rq}(M, k))_j \right]^T$ vektörünün $1 \times 4(k+1)$ boyutlu bir vektör olduğu aşıkardır. Bu dikkate alınarak $\left[E_1 \cdot m_{rq}(M, k) \right]^T, \left[E_2 \cdot m_{rq}(M, k) \right]^T, \left[E_3 \cdot m_{rq}(M, k) \right]^T, \left[E_4 \cdot m_{rq}(M, k) \right]^T$ vektörlerinin sırasıyla 1., $(k+2)$., $(2k+3)$., $(3k+4)$. satırlarını oluşturduğu, $4(k+1) \times 4(k+1)$ boyutlu yeni bir matris tanımlansın. Ardından Teoremler 4.1.3, 4.1.4, 4.1.5'in ispatlarındaki şekilde bu matrisin satırları ve sütunları 4'er gruba ayrılarak diğer kalan satırlar her grup için merdiven (satırca eşelon) formunda doldurularak matrisin kalan satırları tamamlansın. Yeni tanımlanan bu matris X matrisi olarak gösterilsin. Bu matris yardımıyla bir sonraki sonuca varılmaktadır.

4.1.7. Sonuç. $G = (V, E)$ grafi M ve S grafları ile bir hegzagonun sırasıyla ortak $e_1 = rq, e_2 = wp \in E$ kenarlarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.2'de görülebilir). O halde $k \geq 0$ ve $j = 1, 2, 3, 4$ için E_j matrisleri yukarıda verilen formda matrisler olmak üzere

$$m_{uv}(G, k) = X \cdot m_{wp}(S, k)$$

denklemini sağlar.

Bu bölümde sunulan teoremler ve sonuçlarda kullanılan $A, B, C, D, E_1, E_2, E_3, E_4$ matrislerinin ve bir $e = qr$ kenarı üzerindeki $m_{qr}(P_2, k)$ vektörünün $k = 0, 1, 2$ için oluşturulması basit olmakla birlikte $\forall k \geq 3$ değeri için oluşturulması elle oldukça zorlayıcıdır. Bu sebeple hesabı kolaylaştırmak için MATLAB programında bu matrisler ve vektörün basit şekilde elde edilmesini sağlayan, k değerine bağlı çalışan kodlar Ekler kısmında Ek 1-Ek 11 arasında sunulmuştur (Oz ve Cangul 2022a). Bu kodlar istenilen $k \geq 3$ değerine bağlı çalıştırılarak ve Ek 10 ile Ek 11'de sunulan kodların 3., 4., 5., 6. adımları verilen iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sisteme göre basit şekilde uyarlanarak elde edilen matrislerin çarpımı ile karşılık gelen sistemin k -eşleme sayısı hesaplanabilmektedir. Bu hesaplamının bir uygulaması sonraki örnekte sunulmaktadır.



Şekil 4.3. İç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem

4.1.8. Örnek. G Şekil 4.3'te verilen bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem olsun. $m(G, 21)$ değeri, $S^I, S^{II}, S^{III}, S^{IV}$ karşılık gelen alt graflar olmak üzere, xy kenarındaki k -eşleme vektörü $m_{xy}(G, k)$, Lemma 4.1.2, Teoremler 4.1.3-4.1.6 ve Sonuç 4.1.7 kullanılarak aşağıdaki denklemden elde edilebilir.

$$\begin{aligned}
 m_{xy}(G, 21) &= A \cdot B \cdot m_{uv}(S^I, 21) \\
 &= A \cdot B \cdot Z \cdot m_{wp}(S^{II}, 21) \\
 &= A \cdot B \cdot Z \cdot D \cdot m_{pw}(S^{II}, 21) \\
 &= A \cdot B \cdot Z \cdot D \cdot A \cdot m_{cd}(S^{III}, 21) \\
 &= A \cdot B \cdot Z \cdot D \cdot A \cdot L \cdot m_{st}(S^{IV}, 21) \\
 &= A \cdot B \cdot Z \cdot D \cdot A \cdot L \cdot A \cdot m_{kh}(P_2, 21).
 \end{aligned}$$

Z matrisinin 1., $(k + 2)$., $(2k + 3)$., $(3k + 4)$. satırları, M alt grafi rq kenarında sisteme komşu olarak L_3 lineer benzenoid zinciri olan alt graf olmak üzere, sırasıyla

$[E_1 \cdot m_{rq}(M, k)]^T, [E_2 \cdot m_{rq}(M, k)]^T, [E_3 \cdot m_{rq}(M, k)]^T, [E_4 \cdot m_{rq}(M, k)]^T$ olan Sonuç 4.1.7'deki X matrisi olarak ifade edilen matrise karşılık geldiği gözlemlenebilir. Benzer şekilde, L matrisi $1., (k + 2)., (2k + 3)., (3k + 4).$ satırları, M alt grafi ef kenarında sisteme komşu olarak tek bir hekzagon olan alt graf olmak üzere, sırasıyla $[E_1 \cdot m_{ef}(M, k)]^T, [E_{ef} \cdot m_{ef}(M, k)]^T, [E_3 \cdot m_{ef}(M, k)]^T, [E_4 \cdot m_{ef}(M, k)]^T$ olan Sonuç 4.1.7'de X matrisi olarak sembolize edilen matrise karşılık gelmektedir.

Yukarıdaki denklem elde edildikten sonra Ek 1-Ek 11 arasında sunulan MATLAB kodlarıyla $k = 21$ girdisi kullanılarak denklemin sonucu için gerekli olan A, B, Z, D, L matrisleri ve $m_{kh}(P_2, 21)$ vektörü hesaplanarak aşağıdaki sonuca ulaşılır.

$$m_{xy}(G, 21) = [132, 9662, 227594, 2601131, 17152998, 72097837, 206026293, 418537074, 624169412, 699551840, 599344823, 397202204, 205121448, 82799431, 26093309, 6380478, 1195807, 168219, 17161, 1197, 51, 1, \dots, 48, 1]^T.$$

Sonuç olarak,

$$m(G, 21) = 132, m(G, 20) = 9662, m(G, 19) = 227594, m(G, 18) = 2601131, \dots, m(G, 3) = 17161, m(G, 2) = 1197, m(G, 1) = 51, m(G, 0) = 1,$$

değerleri elde edilir. Ayrıca $\forall k \geq 22, m(G, k) = 0$ olduğu açıktır. Dolayısıyla $m_{xy}(G, 21)$ vektörünün ilk 22 satırının toplamı $Z(G)$ değerine eşittir.

4.2. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin k -Bağımsızlık Sayısının Hesaplanması

Bir önceki bölümün devamı olarak bu bölümde $\forall k \geq 0$ için herhangi bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin k -bağımsızlık sayısının hesabı matris çarpımlarına dayanan indirgeme formülleri yardımıyla sunulacaktır. Sonuç olarak verilen herhangi bir iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin $\forall k \geq 0$ için k -bağımsızlık sayısı $5(k + 1) \times 5(k + 1)$ boyutlu, doğal sayı içerikli kare matrislerin $5(k + 1) \times 1$ boyutlu, doğal sayı içerikli bir vektör ile çarpımı yoluyla hesaplanabilir olacaktır.

Başlangıç olarak bu bölümde sunulacak teoremlerin ve ispatların temelini oluşturacak olan $5(k + 1) \times 1$ tipindeki vektör tanımlanacaktır.

4.2.1. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. G grafının $e = qr \in E$ kenarı üzerindeki $k \geq 0$ için k -bağımsızlık vektörü

$$n_{qr}(G, k) = \begin{bmatrix} n(G, k) \\ n(G, k - 1) \\ \vdots \\ n(G, 0) \\ n(G - N_G[q], k) \\ n(G - N_G[q], k - 1) \\ \vdots \\ n(G - N_G[q], 0) \\ n(G - N_G[r], k) \\ n(G - N_G[r], k - 1) \\ \vdots \\ n(G - N_G[r], 0) \\ n(G - q, k) \\ n(G - q, k - 1) \\ \vdots \\ n(G - q, 0) \\ n(G - r, k) \\ n(G - r, k - 1) \\ \vdots \\ n(G - r, 0) \end{bmatrix}$$

formundadır (Oz ve Cangul 2022b).

4.2.2. Lemma. $G = (V, E)$ bir graf ve $e = qr \in E$ G grafının bir kenarı olsun.

[illegible]

formunda $k \geq 0$ için $5(k+1) \times 5(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$n_{qr}(G, k) = D' \cdot n_{rq}(G, k)$$

eşitliği sağlanır (Oz ve Cangul 2022b).

İspat. $n_{qr}(G, k)$ vektörü tanımından ispat aşıkardır.

4.2.3. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve bir heksagonun ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (i) şikkında görülebilir). O halde

[illegible]

formunda $k \geq 0$ için $5(k+1) \times 5(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$n_{qr}(G, k) = A' \cdot n_{wv}(S, k)$$

eşitliği sağlanır (Oz ve Cangul 2022b).

İspat. $n_{qr}(G, k)$ vektörüne ulaşabilmek için ilk olarak sırasıyla $n(G, k), n(G - N_G[q], k), n(G - N_G[r], k), n(G - q, k), n(G - r, k)$ değerlerini hesaplamak gereklidir. Bu hesap vu, wp kenarlarının karşılık gelen alt graflardan uygun kombinasyonlarda silinerek ve Lemma 3.1.6 kullanılarak şu şekilde yapılır:

$$\begin{aligned}
n(G, k) &= n(G - wp, k) - n(G - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(G - wp - vu, k) - n(G - wp - N_G[v] - N_G[u], k - 2) \\
&\quad - n(G - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(S, k) + 4n(S, k - 1) + 3n(S, k - 2) - n(S - N_G[v], k - 2) \\
&\quad - 2n(S - N_G[v], k - 3) - n(S - N_G[w], k - 2) - 2n(S - N_G[w], k - 3) \\
&= (1, 4, 3, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k), \\
n(G - N_G[q], k) &= n(G - N_G[q] - vu, k) - n(G - N_G[q] - N_G[v] - N_G[u], k - 2) \\
&= n(S, k) + n(S, k - 1) - n(S - N_G[v], k - 2) \\
&= (1, 1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k), \\
n(G - N_G[r], k) &= n(G - N_G[r] - wp, k) - n(G - N_G[r] - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(S, k) + n(S, k - 1) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&= (1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k), \\
n(G - q, k) &= n(G - q - wp, k) - n(G - q - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(G - q - wp - vu, k) - n(G - q - wp - N_G[v] - N_G[u], k - 2) \\
&\quad - n(G - q - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(S, k) + 3n(S, k - 1) + 2n(S, k - 2) - n(S - N_G[v], k - 2) \\
&\quad - n(S - N_G[v], k - 3) - n(S - N_G[w], k - 2) - 2n(S - N_G[w], k - 3) \\
&= (1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k), \\
n(G - r, k) &= n(G - r - wp, k) - n(G - r - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(G - r - wp - vu, k) - n(G - r - wp - N_G[v] - N_G[u], k - 2) \\
&\quad - n(G - r - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(S, k) + 3n(S, k - 1) + 2n(S, k - 2) - n(S - N_G[v], k - 2) \\
&\quad - 2n(S - N_G[v], k - 3) - n(S - N_G[w], k - 2) - n(S - N_G[w], k - 3) \\
&= (1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k).
\end{aligned}$$

k -bağımsızlık vektörü tanımından hareketle;

$$(1, 4, 3, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

vektörleri $n_{qr}(G, k) = A' \cdot n_{wv}(S, k)$ eşitliğini sağlayacak şekildeki A' matrisinin sırasıyla 1., $(k + 2)$., $(2k + 3)$., $(3k + 4)$., $(4k + 5)$. satırlarını oluşturur. A' matrisinin kalan satırlarını bulmak için $n(G, k - 1), \dots, n(G, 0), n(G - N_G[q], k - 1), \dots, n(G - N_G[q], 0), n(G - N_G[r], k - 1), \dots, n(G - N_G[r], 0), n(G - q, k - 1), \dots, n(G - q, 0)$ ve $n(G - r, k - 1), \dots, n(G - r, 0)$ değerlerinin de ayrı olarak hesaplanması gerekir. Teorem 4.1.3'ün ispatında belirttiği gibi bu değerlerin hesaplanmasına gerek yoktur. Dolayısıyla yukarıda elde edilen $n(G, k), n(G - N_G[q], k), n(G - N_G[r], k), n(G - q, k), n(G - r, k)$ değerlerinin denklemlerinden çıkarım yapılarak denklemlerdeki ifadelerde sadece k değerlerinin azalacağı gözlemlenebilir. Buradan hareketle A' matrisinin satırları her grupta $k + 1$ tane satır olacak şekilde sütunları da her bölümde $k + 1$ tane sütun olacak şekilde 5 bölüme ayrılırsa oluşan 25 tane alt matris formundaki her satırın içerikleri bir sonraki satırda merdiven (satırca eşelon) formunda bir sağa atlayarak aynı şekilde yer alır. Böylece A' matrisi yukarıda verildiği formda $5(k + 1) \times 5(k + 1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olmak üzere $n_{qr}(G, k) = A' \cdot n_{wv}(S, k)$ eşitliğine ulaşılır.

Teorem 4.2.3'ün doğal sonucu ise $S \cong P_2$ olduğunda $n_{qr}(G, k) = A' \cdot n_{wv}(P_2, k) = [0, \dots, 0, 2, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 1, 0, \dots, 0, 1, 1]^T$ olarak açıktır.

4.2.4. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve bir hegzagonun ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (ii) şıkında görülebilir). O halde

[illegible]

formunda $k \geq 0$ için $5(k+1) \times 5(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$n_{qr}(G, k) = B' \cdot n_{pw}(S, k)$$

eşitliği sağlanır (Oz ve Cangul 2022b).

İspat. İlk olarak $n_{qr}(G, k)$ vektörü tanımından hareketle sırasıyla $n(G, k), n(G - N_G[q], k), n(G - N_G[r], k), n(G - q, k), n(G - r, k)$ değerlerinin hesabının yapılması

gereklidir. Bu hesap pq ve wv kenarlarının ihtiyaç duyulan kombinasyonlarda karşılık gelen alt graflardan silinerek ve Lemma 3.1.6 kullanılarak aşağıdaki şekilde yapılabilir:

$$\begin{aligned}
n(G, k) &= n(G - pq, k) - n(G - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(G - pq - wv, k) - n(G - pq - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&\quad - n(G - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(S, k) + 4n(S, k - 1) + 3n(S, k - 2) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&\quad - 2n(S - N_G[w], k - 3) - n(S - N_G[p], k - 2) - 2n(S - N_G[p], k - 3) \\
&= (1, 4, 3, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{pw}(S, k), \\
n(G - N_G[q], k) &= n(G - N_G[q] - wv, k) - n(G - N_G[q] - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&= n(S - p, k) + 2n(S - p, k - 1) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&= (0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{pw}(S, k), \\
n(G - N_G[r], k) &= n(G - N_G[r] - wv, k) - n(G - N_G[r] - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&= n(S, k) + n(S, k - 1) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&= (1, 1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{pw}(S, k), \\
n(G - q, k) &= n(G - q - wv, k) - n(G - q - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&= n(S, k) + 3n(S, k - 1) + n(S, k - 2) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&\quad - n(S - N_G[w], k - 3) \\
&= (1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{pw}(S, k), \\
n(G - r, k) &= n(G - r - pq, k) - n(G - r - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(G - r - pq - wv, k) - n(G - r - pq - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&\quad - n(G - r - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(S, k) + 3n(S, k - 1) + 2n(S, k - 2) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&\quad - n(S - N_G[w], k - 3) - n(S - N_G[p], k - 2) - 2n(S - N_G[p], k - 3) \\
&= (1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{pw}(S, k).
\end{aligned}$$

k -bağımsızlık vektörü tanımından hareketle;

$$(1, 4, 3, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 1, 2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

$$(1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)$$

vektörleri $n_{qr}(G, k) = B' \cdot n_{pw}(S, k)$ eşitliğini sağlayacak şekildeki B' matrisinin sırasıyla 1., $(k + 2)$., $(2k + 3)$., $(3k + 4)$., $(4k + 5)$. satırlarını oluşturur. B' matrisinin tüm satırlarını elde etmek için $n(G, k - 1), \dots, n(G, 0), n(G - N_G[q], k - 1), \dots, n(G - N_G[q], 0), n(G - N_G[r], k - 1), \dots, n(G - N_G[r], 0), n(G - q, k - 1), \dots, n(G - q, 0)$ ve $n(G - r, k - 1), \dots, n(G - r, 0)$ değerlerinin de ayrı ayrı hesaplanması gerekir. Teorem 4.2.3 ispatında da belirttiği gibi bu değerlerin hesaplanmasına gerek yoktur. Dolayısıyla yukarıda elde edilen $n(G, k), n(G - N_G[q], k), n(G - N_G[r], k), n(G - q, k), n(G - r, k)$ değerlerinin denklemlerinden yola çıkarak denklemlerdeki ifadelerde sadece k değerlerinin azalacağı gözlemlenebilir. Buradan hareketle B' matrisinin satırları her grupta $k + 1$ tane satır olacak şekilde sütunları da her bölümde $k + 1$ tane sütun olacak şekilde 5 bölüme ayrılırsa oluşan 25 tane alt matris formundaki her satırın içerikleri bir sonraki satırda merdiven (satırca eşelon) formunda bir sağa atlayarak aynı şekilde yer alır. Böylece B' matrisi yukarıda verildiği formda $5(k + 1) \times 5(k + 1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olmak üzere $n_{qr}(G, k) = B' \cdot n_{pw}(S, k)$ eşitliğine ulaşılır.

4.2.5. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve bir hekzagonun ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (i) şikkında görülebilir). O halde

[illegible]

formunda $k \geq 0$ için $5(k+1) \times 5(k+1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olacak şekilde

$$n_{ru}(G, k) = C' \cdot n_{wv}(S, k)$$

eşitliği sağlanır (Oz ve Cangul 2022b).

İspat. Başlangıç olarak Teorem 4.2.3'ün ispatından;

$$n(G, k) = (1, 4, 3, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k),$$

$$n(G - N_G[r]) = (1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k),$$

$$n(G-r) = (1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wp}(S, k),$$

olduğu bilinmektedir.

O halde $n_{ru}(G, k)$ vektörünü hesaplamak için $n(G - N_G[u], k)$ ve $n(G - u, k)$ değerlerini hesaplamak yeterli olacaktır. Bu hesap wp kenarı silinerek ve Lemma 3.1.6 kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned}
n(G - N_G[u], k) &= n(G - N_G[u] - wp, k) - n(G - N_G[u] - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(S - v, k) + 2n(S - v, k - 1) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&= (0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 1, 2, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k), \\
n(G - u, k) &= n(G - u - wp, k) - n(G - u - N_G[w] - N_G[p], k - 2) \\
&= n(S, k) + 3n(S, k - 1) + n(S, k - 2) - n(S - N_G[w], k - 2) \\
&\quad - n(S - N_G[w], k - 3) \\
&= (1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \cdot n_{wv}(S, k),
\end{aligned}$$

k -bağımsızlık vektörü tanımından hareketle;

$$\begin{aligned}
&(1, 4, 3, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \\
&(1, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \\
&(0, \dots, 0, 0, 0, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 1, 2, 0, \dots, 0) \\
&(1, 3, 2, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -2, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0) \\
&(1, 3, 1, 0, \dots, 0, 0, 0, -1, -1, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0, 0, \dots, 0)
\end{aligned}$$

vektörleri $n_{ru}(G, k) = C' \cdot n_{wv}(S, k)$ eşitliğini sağlayacak şekildeki C' matrisinin sırasıyla 1., $(k + 2)$., $(2k + 3)$., $(3k + 4)$., $(4k + 5)$. satırlarını oluşturur. C' matrisinin tüm satırlarını elde etmek için $n(G, k - 1), \dots, n(G, 0), n(G - N_G[r], k - 1), \dots, n(G - N_G[r], 0), n(G - N_G[u], k - 1), \dots, n(G - N_G[u], 0), n(G - r, k - 1), \dots, n(G - r, 0)$ ve $n(G - u, k - 1), \dots, n(G - u, 0)$ değerlerinin de ayrı ayrı hesaplanması gerekir.

Teorem 4.2.3 ispatında da belirtildiği gibi bu değerlerin hesaplanmasına gerek yoktur. Dolayısıyla yukarıda elde edilen $n(G, k)$, $n(G - N_G[r], k)$, $n(G - N_G[u], k)$, $n(G - r, k)$, $n(G - u, k)$ değerlerinin denklemlerinden yola çıkarak denklemlerdeki ifadelerde sadece k değerlerinin azalacağı gözlemlenebilir. Buradan hareketle C' matrisinin satırları her grupta $k + 1$ tane satır olacak şekilde sütunları da her bölümde $k + 1$ tane sütun olacak şekilde 5 bölüme ayrılırsa oluşan 25 tane alt matris formundaki her satırın içerikleri bir sonraki satırda merdiven (satırca eşelon) formunda bir sağa atlayarak aynı şekilde yer alır. Böylece C' matrisi yukarıda verildiği formda $5(k + 1) \times 5(k + 1)$ boyutlu doğal sayı içerikli bir matris olmak üzere $n_{ru}(G, k) = C' \cdot n_{wv}(S, k)$ eşitliğine ulaşılır.

Buraya kadar verilen teoremler ve lemma ile bir kenarında bir S grafına komşu olan bir hegzagonun bir kenarı üzerinde tanımlanan k -bağımsızlık vektörü sayesinde indirgeme bağıntıları elde edilmiştir. Bu bölümün devamında ise iki kenarına da farklı iki graf komşu olan bir hegzagonun diğer boştaki kenarı üzerinde tanımlanan k -bağımsızlık vektörü sayesinde indirgeme bağıntıları elde edilecektir. Bunun için 5 adet matris formu gereklidir. Bu matris formları $j = 1, 2, 3, 4, 5$ olmak üzere E'_j ile gösterilerek aşağıdaki şekilde tanımlanacaktır:

$$\begin{aligned}
n(G, k) &= n(G - wv, k) - n(G - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&= n(G - wv - pq, k) - n(G - wv - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&\quad - n(G - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&= n(G - wv - pq - ru, k) - n(G - wv - pq - N_G[r] - N_G[u], k - 2) \\
&\quad - n(G - wv - N_G[p] - N_G[q], k - 2) - n(G - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&= n(P_2 \cup M \cup S, k) - n((M - N_G[r]) \cup S, k - 2) \\
&\quad - n(P_2 \cup (M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p]), k - 2) - n(M \cup (S - N_G[w]), k - 2) \\
&= [n(M, k) + 2n(M, k - 1) - n(M - N_G[r], k - 2)]n(S, 0) \\
&\quad + [n(M, k - 1) + 2n(M, k - 2) - n(M - N_G[r], k - 3)]n(S, 1) + \dots \\
&\quad + [n(M, 2) + 2n(M, 1) - n(M - N_G[r], 0)]n(S, k - 2) \\
&\quad + [n(M, 1) + 2n(M, 0)]n(S, k - 1) + n(M, 0)n(S, k) \\
&\quad - n(M, k - 2)n(S - N_G[w], 0) - n(M, k - 3)n(S - N_G[w], 1) - \dots \\
&\quad - n(M, 1)n(S - N_G[w], k - 3) - n(M, 0)n(S - N_G[w], k - 2) \\
&\quad - [n(M - N_G[q], k - 2) + 2n(M - N_G[q], k - 3)]n(S - N_G[p], 0) \\
&\quad - [n(M - N_G[q], k - 3) + 2n(M - N_G[q], k - 4)]n(S - N_G[p], 1) - \dots \\
&\quad - [n(M - N_G[q], 1) + 2n(M - N_G[q], 0)]n(S - N_G[p], k - 3) \\
&\quad - n(M - N_G[q], 0)n(S - N_G[p], k - 2).
\end{aligned}$$

Bu sonuca göre E'_1 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$n(G, k) = [E'_1 \cdot n_{rq}(M, k)]^T \cdot n_{wp}(S, k)$$

eşitliği elde edilir.

$$\begin{aligned}
n(G-N_G[u], k) &= n(G-N_G[u] - pq, k) - n(G - N_G[u] - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n((M - r) \cup S, k) - n((M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p]), k - 2) \\
&= n(M - r, k)n(S, 0) + n(M - r, k - 1)n(S, 1) + \dots \\
&\quad + n(M - r, 0)n(S, k) \\
&\quad - n(M - N_G[q], k - 2)n(S - N_G[p], 0) \\
&\quad - n(M - N_G[q], k - 3)n(S - N_G[p], 1) - \dots \\
&\quad - n(M - N_G[q], 0)n(S - N_G[p], k - 2).
\end{aligned}$$

Bu sonuca göre E'_2 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$n(G-N_G[u], k) = [E'_2 \cdot n_{rq}(M, k)]^T \cdot n_{wp}(S, k)$$

eşitliği elde edilir.

$$\begin{aligned}
n(G-N_G[v], k) &= n(G-N_G[v] - pq, k) - n(G - N_G[v] - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(M \cup (S - w), k) - n((M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p]), k - 2) \\
&= n(M, k)n(S - w, 0) + n(M, k - 1)n(S - w, 1) + \dots \\
&\quad + n(M, 0)n(S - w, k) - n(M - N_G[q], k - 2)n(S - N_G[p], 0) \\
&\quad - n(M - N_G[q], k - 3)n(S - N_G[p], 1) - \dots \\
&\quad - n(M - N_G[q], 0)n(S - N_G[p], k - 2).
\end{aligned}$$

Bu sonuca göre E'_3 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$n(G-N_G[v], k) = [E'_3 \cdot n_{rq}(M, k)]^T \cdot n_{wp}(S, k)$$

eşitliği elde edilir.

$$\begin{aligned}
n(G - u, k) &= n(G - u - pq, k) - n(G - u - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(G - u - pq - wv, k) - n(G - u - pq - N_G[w] - N_G[v], k - 2) \\
&\quad - n(G - u - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(P_1 \cup M \cup S, k) - n(M \cup (S - N_G[w]), k - 2) \\
&\quad - n(P_1 \cup (M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p]), k - 2) \\
&= [n(M, k) + n(M, k - 1)]n(S, 0) + [n(M, k - 1) + n(M, k - 2)] \cdot n(S, 1) \\
&\quad + \dots + [n(M, 1) + n(M, 0)]n(S, k - 1) + n(M, 0)n(S, k) \\
&\quad - n(M, k - 2)n(S - N_G[w], 0) - n(M, k - 3)n(S - N_G[w], 1) - \dots \\
&\quad - n(M, 0)n(S - N_G[w], k - 2) \\
&\quad - [n(M - N_G[q], k - 2) + n(M - N_G[q], k - 3)]n(S - N_G[p], 0) \\
&\quad - [n(M - N_G[q], k - 3) + n(M - N_G[q], k - 4)]n(S - N_G[p], 1) - \dots \\
&\quad - [n(M - N_G[q], 1) + n(M - N_G[q], 0)]n(S - N_G[p], k - 3) \\
&\quad - n(M - N_G[q], 0)n(S - N_G[p], k - 2).
\end{aligned}$$

Bu sonuca göre E'_4 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$n(G - u, k) = [E'_4 \cdot n_{rq}(M, k)]^T \cdot n_{wp}(S, k)$$

eşitliği elde edilir.

$$\begin{aligned}
n(G - v, k) &= n(G - v - pq, k) - n(G - v - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
&= n(G - v - pq - ru, k) - n(G - v - pq - N_G[r] - N_G[u], k - 2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -n(G - v - N_G[p] - N_G[q], k - 2) \\
& = n(P_1 \cup M \cup S, k) - n((M - N_G[r]) \cup S, k - 2) \\
& - n(P_1 \cup (M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p]), k - 2) \\
& = [n(M, k) + n(M, k - 1) - n(M - N_G[r], k - 2)]n(S, 0) \\
& + [n(M, k - 1) + n(M, k - 2) - n(M - N_G[r], k - 3)]n(S, 1) \\
& + \dots + [n(M, 2) + n(M, 1) - n(M - N_G[r], 0)]n(S, k - 2) \\
& + [n(M, 1) + n(M, 0)]n(S, k - 1) + n(M, 0)n(S, k) \\
& - [n(M - N_G[q], k - 2) + n(M - N_G[q], k - 3)]n(S - N_G[p], 0) \\
& - [n(M - N_G[q], k - 3) + n(M - N_G[q], k - 4)]n(S - N_G[p], 1) - \dots \\
& - [n(M - N_G[q], 1) + n(M - N_G[q], 0)]n(S - N_G[p], k - 3) \\
& - n(M - N_G[q], 0)n(S - N_G[p], k - 2).
\end{aligned}$$

Bu sonuca göre E'_5 yukarıda verildiği formda olmak üzere

$$n(G - v, k) = [E'_5 \cdot n_{rq}(M, k)]^T \cdot n_{wp}(S, k)$$

eşitliği elde edilir.

Sonuç olarak bulunan beş değer toplu halde yazılırsa $k \geq 0$ ve $j = 1, 2, 3, 4, 5$ için E'_j matrisleri yukarıda verilen formda matrisler olmak üzere

$$\begin{bmatrix} n(G, k) \\ n(G - N_G[u], k) \\ n(G - N_G[v], k) \\ n(G - u, k) \\ n(G - v, k) \end{bmatrix} = \left[(E'_j \cdot n_{rq}(M, k))_j \right]^T \cdot n_{wp}(S, k)$$

denklemleri elde edilir.

Önerilen metodun buraya kadar olan kısmında görüldüğü gibi iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin k -bağımsızlık sayılarının hesaplanabilmesi için k -bağımsızlık vektörü kritik konumdadır. Ancak, şu ana kadar sunulan teoremler ve lemma ile ancak benzenoid zincirlerin k -bağımsızlık sayıları hesaplanabilmektedir. Dolayısıyla verilen iç noktasız-benzenoid sistemde üç tane hekzagona komşu olan en az bir tane hekzagon var olduğu durumda metodun buraya kadar sunulan kısmı indirgeme için yetersiz kalmaktadır. Çünkü bu durumda önerilen metodun uygulanabilmesi için sistemdeki üç tane hekzagona komşu olan her hekzagonun diğer üç hekzagon ile ortak kullandığı kenarlardan biri üzerindeki k -bağımsızlık vektörüne ihtiyaç duyulmaktadır. Yani sistemde üç tane hekzagona komşu olan bir hekzagon var olsun ve bu hekzagonun diğer üç hekzagonundan birine komşu olan kenarı $e = uv$ ise $n_{uv}(G, k)$ vektörü önerilen metodun uygulanabilmesi için gerekli olacaktır. Dolayısıyla Şekil 4.2’de verilen graf yapısı için uv kenarındaki k -bağımsızlık vektörü $n_{uv}(G, k)$ bulunabilirse indirgeme için gerekli olan tüm vektörler elde edilmiş olacaktır. Bu doğrultuda $5(k + 1) \times 1$ boyutlu $n_{uv}(G, k)$ vektörünün 1., $(k + 2)$., $(2k + 3)$., $(3k + 4)$. ve $(4k + 5)$. satırlarını teşkil eden

$$\begin{bmatrix} n(G, k) \\ n(G - N_G[u], k) \\ n(G - N_G[v], k) \\ n(G - u, k) \\ n(G - v, k) \end{bmatrix}$$

vektörünün içerikleri önerilen metod açısından önemli bir yere sahiptir.

Bu vektör sayesinde $n_{uv}(G, k)$ vektörüne şu şekilde ulaşılabilir:

$j = 1, 2, 3, 4, 5$ değerleri için $\left[(E_j' \cdot n_{rq}(M, k))_j \right]^T$ vektörünün $1 \times 5(k + 1)$ boyutlu bir vektör olduğu açık şekilde gözlemlenebilir. Bu noktadan hareket ederek $\left[E_1' \cdot n_{rq}(M, k) \right]^T, \left[E_2' \cdot n_{rq}(M, k) \right]^T, \left[E_3' \cdot n_{rq}(M, k) \right]^T, \left[E_4' \cdot n_{rq}(M, k) \right]^T$ ve $\left[E_5' \cdot n_{rq}(M, k) \right]^T$ vektörlerinin sırasıyla 1., $(k + 2)$., $(2k + 3)$., $(3k + 4)$. ve $(4k + 5)$. satırlarını teşkil ettiği $5(k + 1) \times 5(k + 1)$ boyutlu yeni bir matris tanımlansın ve Teoremler 4.2.3, 4.2.4, 4.2.5'in ispatlarında belirtildiği formda bu matrisin satırları ve sütunları 5'er gruba ayrılarak diğer kalan satırlar her grup için merdiven (satırca eşelon) formunda tamamlansın. Yeni tanımlanan bu matris X' matrisi olarak gösterilsin.

4.2.7. Sonuç. $G = (V, E)$ grafi M ve S grafları ile bir hekzagonun sırasıyla ortak $e_1 = rq, e_2 = wp \in E$ kenarlarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.2'de görülebilir). O halde $k \geq 0$ ve $j = 1, 2, 3, 4, 5$ için E_j' matrisleri yukarıda verilen formda matrisler olmak üzere

$$n_{uv}(G, k) = X' \cdot n_{wp}(S, k)$$

denklemini sağlanır.

Bu bölümde sunulan bulgularda kullanılan $A', B', C', D', E_1', E_2', E_3', E_4', E_5'$ matrislerinin ve bir $e = qr$ kenarı için $n_{qr}(P_2, k)$ vektörünün $k = 0, 1, 2$ için oluşturulması basittir ancak k değeri arttıkça $\forall k \geq 3$ değeri için oluşturulması elle pek mümkün değildir. Bu sebeple istenilen $k \geq 3$ değerine bağlı olarak Ekler kısmında k -eşleme sayısının hesabı için gerekli olan matrisler ve vektörü elde etme amacıyla MATLAB programı ile sunulan kodlara benzer olarak k -bağımsızlık sayısının hesabı için gerekli olan matrisleri ve vektörü de elde etmede kullanılacak olan kodlar Ekler kısmında Ek 12-Ek 23 kodlarıyla sunulmuştur (Oz ve Cangul 2022b). Bu kodlar bir sonraki örnekte baz alınan iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sisteme özgü olarak sunulmuştur. Ancak, Ek 22 ve Ek 23'de sunulan kodların 3., 4., 5., 6., 7. adımları verilen iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid

sisteme göre basit şekilde düzenlenerek ve diğer tüm kodlar aynı şekilde çalıştırılarak elde edilen matrislerin ve vektörün uygun bir çarpımı yoluyla karşılık gelen sistemin k -bağımsızlık sayısı hesaplanabilmektedir.

4.2.8. Örnek. G grafi Şekil 4.3'te verilen iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem olsun. Bu graf yapısı için $n(G, 21)$ değeri S^I, S^{II}, S^{III} ve S^{IV} karşılık gelen alt graflar olmak üzere $n_{xy}(G, 21)$ yardımıyla aşağıdaki şekilde hesaplanabilir:

$$\begin{aligned}
 n_{xy}(G, 21) &= A' \cdot B' \cdot n_{uv}(S^I, 21) \\
 &= A' \cdot B' \cdot Z' \cdot n_{wp}(S^{II}, 21) \\
 &= A' \cdot B' \cdot Z' \cdot D' \cdot n_{pw}(S^{II}, 21) \\
 &= A' \cdot B' \cdot Z' \cdot D' \cdot A' \cdot n_{cd}(S^{III}, 21) \\
 &= A' \cdot B' \cdot Z' \cdot D' \cdot A' \cdot L' \cdot n_{st}(S^{IV}, 21) \\
 &= A' \cdot B' \cdot Z' \cdot D' \cdot A' \cdot L' \cdot A' \cdot n_{kh}(P_2, 21).
 \end{aligned}$$

Z' matrisinin $1., (k+2)., (2k+3)., (3k+4)., (4k+5).$ satırları, M alt grafi rq kenarında sisteme komşu olarak L_3 lineer benzenoid zinciri olan alt graf olmak üzere, sırasıyla $[E'_1 \cdot n_{rq}(M, k)]^T, [E'_2 \cdot n_{rq}(M, k)]^T, [E'_3 \cdot n_{rq}(M, k)]^T, [E'_4 \cdot n_{rq}(M, k)]^T, [E'_5 \cdot n_{rq}(M, k)]^T$ olan Sonuç 4.2.7'deki X' matrisi olarak ifade edilen matrise karşılık geldiğini belirtmekte fayda vardır. Benzer şekilde, L' matrisi $1., (k+2)., (2k+3)., (3k+4)., (4k+5).$ satırları, M alt grafi ef kenarında sisteme komşu olarak tek bir heksagon olan alt graf olmak üzere, sırasıyla $[E'_1 \cdot n_{ef}(M, k)]^T, [E'_2 \cdot n_{ef}(M, k)]^T, [E'_3 \cdot n_{ef}(M, k)]^T, [E'_4 \cdot n_{ef}(M, k)]^T, [E'_5 \cdot n_{ef}(M, k)]^T$ olan Sonuç 4.2.7'de X' matrisi olarak sembolize edilen matrise karşılık gelmektedir.

Bu denklem elde edildikten sonra Ekler kısmında sunulan Ek 12-Ek 23 arasında sunulan MATLAB kodları $k = 21$ girdisi ile çalıştırılarak buradaki gerekli olan A', B', Z', D', L'

matrisleri ve $n_{kh}(P_2, 21)$ vektörü elde edilerek ve çarpımları hesaplanarak aşağıdaki sonuca ulaşılır.

$$n_{xy}(G, 21) = [2, 125, 3150, 42820, 354902, 1925778, 7176535, 19020436, \\ 36830301, 53211969, 58302248, 49025608, 31889775, 16108050, 6315407, \\ 1911534, 441504, 76249, 9518, 810, 42, 1, \dots, 41, 1]^T.$$

Sonuç olarak,

$$n(G, 21) = 2, n(G, 20) = 125, n(G, 19) = 3150, n(G, 18) = 42820, \dots, n(G, 3) = \\ 9518, n(G, 2) = 810, n(G, 1) = 42, n(G, 0) = 1$$

elde edilir. Ek olarak, $\forall k \geq 22$ değeri için $n(G, k) = 0$ olduğu sunulan kodların $k = 22$ değeri için çalıştırılmasıyla görülebilir ve bunun sonucu olarak $n_{xy}(G, 21)$ vektörünün ilk 22 satırının toplamının $i(G)$ değerine eşit olduğu sonucu ortaya çıkmış olur.

4.3. İç Noktasız-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin Merrifield-Simmons İndeks Hesabı

Bir önceki bölümde iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin $\forall k \geq 0$ değeri için k -bağımsızlık sayılarının hesabına yönelik bir metot önerilmişti. Bu bölümde ise bir önceki bölümün devamı niteliğinde iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemler için Merrifield-Simmons indeksinin hesabına yönelik bir metot önerilecektir. Bunun için ilk olarak *basit Merrifield-Simmons* vektörü olarak adlandırılacak olan vektör aşağıdaki şekilde tanımlacaktır.

4.3.1. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. G grafının $e = qr \in E$ kenarı üzerindeki *basit Merrifield-Simmons vektörü*

$$i_{qr}(G) = \begin{bmatrix} i(G) \\ i(G - N_G[q]) \\ i(G - N_G[r]) \\ i(G - q) \\ i(G - r) \end{bmatrix}$$

formundadır.

4.3.2. Lemma. $G = (V, E)$ bir graf ve $e = qr \in E$ G grafının bir kenarı olsun. O zaman

$$D^{ms} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{qr}(G) = D^{ms} \cdot i_{rq}(G)$$

eşitliği sağlanır.

İspat. $i_{qr}(G)$ tanımından aşıkadır.

4.3.3. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafı ve bir hegzagonun ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (i) şikkında görülebilir). O halde

$$A^{ms} = \begin{bmatrix} 8 & -3 & -3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -3 & -2 & 0 & 0 \\ 6 & -2 & -3 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{qr}(G) = A^{ms} \cdot i_{wv}(S)$$

denklemini sağlanır.

İspat. qr kenarı üzerindeki basit Merrifield-Simmons vektörü tanımından hareketle $i(G), i(G - N_G[q]), i(G - N_G[r]), i(G - q)$ ve $i(G - r)$ değerlerinin hesaplanması ispat için gereklidir. Bu değerler wp ile vu kenarlarının her alt graf için uygun bir kombinasyonda silinerek ve Lemma 3.1.2 kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned} i(G) &= i(G - wp) - i(G - N_G[w] - N_G[p]) \\ &= i(G - wp - vu) - i(G - wp - N_G[v] - N_G[u]) - i(G - N_G[w] - N_G[p]) \\ &= i(P_4 \cup S) - i(P_2 \cup (S - N_G[v])) - i(P_2 \cup (S - N_G[w])) \\ &= 8i(S) - 3i(S - N_G[w]) - 3i(S - N_G[v]) \\ &= (8, -3, -3, 0, 0) \cdot i_{wv}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i(G - N_G[q]) &= i(G - N_G[q] - vu) - i(G - N_G[q] - N_G[v] - N_G[u]) \\ &= i(P_1 \cup S) - i(S - N_G[v]) \\ &= 2i(S) - i(S - N_G[v]) \\ &= (2, 0, -1, 0, 0) \cdot i_{wv}(S), \end{aligned}$$

$$i(G - N_G[r]) = i(G - N_G[r] - wp) - i(G - N_G[r] - N_G[w] - N_G[p])$$

$$\begin{aligned}
&= i(P_1 \cup S) - i(S - N_G[w]) \\
&= 2i(S) - i(S - N_G[w]) \\
&= (2, -1, 0, 0, 0) \cdot i_{wv}(S), \\
i(G - q) &= i(G - q - wp) - i(G - q - N_G[w] - N_G[p]) \\
&= i(G - q - wp - vu) - i(G - q - wp - N_G[v] - N_G[u]) \\
&\quad - i(G - q - N_G[w] - N_G[p]) \\
&= i(P_1 \cup P_2 \cup S) - i(P_1 \cup (S - N_G[v])) - i(P_2 \cup (S - N_G[w])) \\
&= 6i(S) - 3i(S - N_G[w]) - 2i(S - N_G[v]) \\
&= (6, -3, -2, 0, 0) \cdot i_{wv}(S), \\
i(G - r) &= i(G - r - wp) - i(G - r - N_G[w] - N_G[p]) \\
&= i(G - r - wp - vu) - i(G - r - wp - N_G[v] - N_G[u]) \\
&\quad - i(G - r - N_G[w] - N_G[p]) \\
&= i(P_1 \cup P_2 \cup S) - i(P_2 \cup (S - N_G[v])) - i(P_1 \cup (S - N_G[w])) \\
&= 6i(S) - 2i(S - N_G[w]) - 3i(S - N_G[v]) \\
&= (6, -2, -3, 0, 0) \cdot i_{wv}(S).
\end{aligned}$$

Sonuç olarak $A^{ms} = \begin{bmatrix} 8 & -3 & -3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -3 & -2 & 0 & 0 \\ 6 & -2 & -3 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ olmak üzere $i_{qr}(G) = A^{ms} \cdot i_{wv}(S)$

eşitliğinin sağlandığı görülür.

Şekil 4.1 (i) şikkında yer alan graf yapısı için hekzagon yerine k tane hekzagona sahip bir lineer benzenoid zincir L_k düşünülür ise bu durumda $G = (V, E)$ grafi L_k ile S grafının ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olur. O halde bu G grafi için $S \cong P_2$ olduğu durumda $i_{qr}(G) = (A^{ms})^k \cdot [3, 1, 1, 2, 2]^T$ eşitliği Teorem 4.3.3'ün bir sonucu olarak ortaya çıkar.

4.3.4. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafı ve bir hekzagonun ortak bir $e = pw \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (ii) şikkında görülebilir). O halde

$$B^{ms} = \begin{bmatrix} 8 & -3 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 6 & -3 & -2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{qr}(G) = B^{ms} \cdot i_{pw}(S)$$

denklemleri sağlanır.

İspat. İstenilen sonuca ulaşmak için $i_{qr}(G)$ vektörü tanımından hareketle sırasıyla $i(G), i(G - N_G[q]), i(G - N_G[r]), i(G - q)$ ve $i(G - r)$ değerlerinin her birinin bir vektör ile $i_{pw}(S)$ vektörünün çarpımı olarak yazılması gereklidir. Bu değerlerin bu formda yazımına pq ile wv kenarlarının her alt graftan uygun bir kombinasyonda silinerek ve Lemma 3.1.2 kullanılarak aşağıdaki şekilde ulaşılabilir.

$$\begin{aligned} i(G) &= i(G - pq) - i(G - N_G[p] - N_G[q]) \\ &= i(G - pq - wv) - i(G - pq - N_G[w] - N_G[v]) - i(G - N_G[p] - N_G[q]) \\ &= i(P_4 \cup S) - i(P_2 \cup (S - N_G[w])) - i(P_2 \cup (S - N_G[p])) \\ &= 8i(S) - 3i(S - N_G[p]) - 3i(S - N_G[w]) \\ &= (8, -3, -3, 0, 0) \cdot i_{pw}(S), \end{aligned}$$

$$i(G - N_G[q]) = i(G - N_G[q] - wv) - i(G - N_G[q] - N_G[w] - N_G[v])$$

$$\begin{aligned}
&= i(P_2 \cup (S - p)) - i(S - N_G[w]) \\
&= -i(S - N_G[w]) + 3i(S - p) \\
&= (0, 0, -1, 3, 0) \cdot i_{pw}(S), \\
i(G - N_G[r]) &= i(G - N_G[r] - wv) - i(G - N_G[r] - N_G[w] - N_G[v]) \\
&= i(P_1 \cup S) - i(S - N_G[w]) \\
&= 2i(S) - i(S - N_G[w]) \\
&= (2, 0, -1, 0, 0) \cdot i_{pw}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - q) &= i(G - q - wv) - i(G - q - N_G[w] - N_G[v]) \\
&= i(P_3 \cup S) - i(P_1 \cup (S - N_G[w])) \\
&= 5i(S) - 2i(S - N_G[w]) \\
&= (5, 0, -2, 0, 0) \cdot i_{pw}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - r) &= i(G - r - pq) - i(G - r - N_G[p] - N_G[q]) \\
&= i(G - r - pq - wv) - i(G - r - pq - N_G[w] - N_G[v]) \\
&\quad - i(G - r - N_G[p] - N_G[q]) \\
&= i(P_1 \cup P_2 \cup S) - i(P_1 \cup (S - N_G[w])) - i(P_2 \cup (S - N_G[p])) \\
&= 6i(S) - 3i(S - N_G[p]) - 2i(S - N_G[w]) \\
&= (6, -3, -2, 0, 0) \cdot i_{pw}(S).
\end{aligned}$$

$$\text{Bu denklemlerden } B^{ms} = \begin{bmatrix} 8 & -3 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 6 & -3 & -2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ olmak üzere } i_{qr}(G) = B^{ms} \cdot i_{pw}(S)$$

eşitliğine ulaşılır.

4.3.5. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve bir hegzagonun ortak bir $e = wv \in E$ kenarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.1 (i) şıkında görülebilir). O halde

$$C^{ms} = \begin{bmatrix} 8 & -3 & -3 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 3 \\ 6 & -2 & -3 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{ru}(G) = C^{ms} \cdot i_{wv}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. İlk olarak Teorem 4.3.3'ten $i(G) = (8, -3, -3, 0, 0) \cdot i_{wv}(S)$, $i(G - N_G[r]) = (2, -1, 0, 0, 0) \cdot i_{wv}(S)$ ve $i(G - r) = (6, -2, -3, 0, 0) \cdot i_{wv}(S)$ olduğu bilinmektedir. O halde $i(G - N_G[u])$ ve $i(G - u)$ değerlerini bir vektör ile $i_{wv}(S)$ çarpımı olarak yazmak ispatı tamamlamak için yeterli olacaktır. Bu değerlerin hesabı ise wp kenarının silinerek Lemma 3.1.2'nin kullanılmasıyla aşağıdaki şekilde yapılır:

$$\begin{aligned} i(G - N_G[u]) &= i(G - N_G[u] - wp) - i(G - N_G[u] - N_G[w] - N_G[p]) \\ &= i(P_2 \cup (S - v)) - i(S - N_G[w]) \\ &= -i(S - N_G[w]) + 3i(S - v) \\ &= (0, -1, 0, 0, 3) \cdot i_{wv}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i(G - u) &= i(G - u - wp) - i(G - u - N_G[w] - N_G[p]) \\ &= i(P_3 \cup S) - i(P_1 \cup (S - N_G[w])) \\ &= 5i(S) - 2i(S - N_G[w]) \\ &= (5, -2, 0, 0, 0) \cdot i_{wv}(S). \end{aligned}$$

Sonuçta $C^{ms} = \begin{bmatrix} 8 & -3 & -3 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 3 \\ 6 & -2 & -3 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ olmak üzere $i_{ru}(G) = C^{ms} \cdot i_{wv}(S)$ elde edilir.

Bölümün bu kısmından itibaren verilen iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemde üç adet hegzagona komşu olan hegzagonlar göz önüne alınacaktır. Verilen sistemde bu türde hegzagonların mevcut olması halinde bu hegzagonların sistemin Merrifield-Simmons indeksinin hesabı için bir kenarı üzerinde tanımlanan basit Merrifield-Simmons vektörü yardımıyla indirgenmesi bir sonraki teoremden sunulacaktır. Bu teoremi sunmadan önce teoremin ifadesinde yer alan ve teoremin ispatında elde edilecek olan beş adet matrisi ilk olarak vermek anlaşılabilirlik bakımından faydalı olacaktır. Bu matrisler $j = 1, 2, 3, 4, 5$ olmak üzere E_j^{ms} şeklinde adlandırılarak aşağıdaki gibi ifade edilecektir:

$$E_1^{ms} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, E_2^{ms} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$E_3^{ms} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \end{bmatrix}, E_4^{ms} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, E_5^{ms} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Şekil 4.2’de gösterilen şekil için aşağıdaki teoremin ifadesinde yer alan $i_{rq}^*(M)$ değeri

$$i_{rq}^*(M) = [E_j^{ms} \cdot i_{rq}(M, k)]_j$$

olarak 5×5 boyutlu bir matris olarak tanımlanacaktır.

Bu ifadeden $E_1^{ms} \cdot i_{rq}(M, k), E_2^{ms} \cdot i_{rq}(M, k), E_3^{ms} \cdot i_{rq}(M, k), E_4^{ms} \cdot i_{rq}(M, k)$ ve $E_5^{ms} \cdot i_{rq}(M, k)$ değerlerinin $i_{rq}^*(M)$ matrisinin sırasıyla 1., 2., 3., 4. ve 5. sütunları olduğu gözlemlenebilir.

4.3.6. Teorem. $G = (V, E)$ grafi M ve S grafları ile bir hegzagonun sırasıyla ortak $e_1 = rq, e_2 = wp \in E$ kenarlarında kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.2’de görülebilir). O halde $j = 1, 2, 3, 4, 5$ için E_j^{ms} matrisleri yukarıda verilen formda matrisler olmak üzere

$$i_{uv}(G) = i_{rq}^*(M) \cdot i_{wp}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. $i_{uv}(G)$ vektörü tanımı gereği $i(G), i(G - N_G[u]), i(G - N_G[v]), i(G - u), i(G - v)$ değerlerinin hesaplanması teoremin ispatını tamamlayacaktır. Bu değerler uv kenarı, M alt grafi ve S alt grafi birbirinden bağımsız olacak şekilde pq, wv ve ru kenarları uygun kombinasyonlarda silinerek ve Lemma 3.1.2 kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned} i(G) &= i(G - wv) - i(G - N_G[w] - N_G[v]) \\ &= i(G - wv - pq) - i(G - wv - N_G[p] - N_G[q]) - i(G - N_G[w] - N_G[v]) \\ &= i(G - wv - pq - ru) - i(G - wv - pq - N_G[r] - N_G[u]) \\ &\quad - i(G - wv - N_G[p] - N_G[q]) - i(G - N_G[w] - N_G[v]) \\ &= i(P_2 \cup M \cup S) - i((M - N_G[r]) \cup S) \\ &\quad - i(P_2 \cup (M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p])) - i(M \cup (S - N_G[w])) \\ &= i(P_2)i(M)i(S) - i(M - N_G[r])i(S) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i(P_2)i(M-N_G[q])i(S-N_G[p]) - i(M)i(S-N_G[w]) \\
& = [3i(M) - i(M-N_G[r])]i(S) - i(M)i(S-N_G[w]) \\
& \quad - 3i(M-N_G[q])i(S-N_G[p]) \\
& = (3, -1, 0, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S) + (-1, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S-N_G[w]) \\
& \quad + (0, 0, -3, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S-N_G[p]), \\
i(G-N_G[u]) & = i(G-N_G[u] - pq) - i(G - N_G[u] - N_G[p] - N_G[q]) \\
& = i((M - r) \cup S) - i((M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p])) \\
& = i(M - r)i(S) - i(M - N_G[q])i(S - N_G[p]) \\
& = (0, 0, 0, 1, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S) + (0, 0, -1, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S-N_G[p]), \\
i(G-N_G[v]) & = i(G-N_G[v] - pq) - i(G - N_G[v] - N_G[p] - N_G[q]) \\
& = i(M \cup (S - w)) - i((M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p])) \\
& = i(M)i(S - w) - i(M - N_G[q])i(S - N_G[p]) \\
& = (0, 0, -1, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S - N_G[p]) + (1, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S - w), \\
i(G - u) & = i(G - u - pq) - i(G - u - N_G[p] - N_G[q]) \\
& = i(G - u - pq - wv) - i(G - u - pq - N_G[w] - N_G[v]) \\
& \quad - i(G - u - N_G[p] - N_G[q]) \\
& = i(P_1 \cup M \cup S) - i(M \cup (S - N_G[w])) \\
& \quad - i(P_1 \cup (M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p])) \\
& = i(P_1)i(M)i(S) - i(M)i(S - N_G[w]) \\
& \quad - i(P_1)i(M - N_G[q])i(S - N_G[p]) \\
& = (2, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S) + (-1, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S - N_G[w]) \\
& \quad + (0, 0, -2, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S - N_G[p]), \\
i(G - v) & = i(G - v - pq) - i(G - v - N_G[p] - N_G[q]) \\
& = i(G - v - pq - ru) - i(G - v - pq - N_G[r] - N_G[u])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i(G - v - N_G[p] - N_G[q]) \\
& = i(P_1 \cup M \cup S) - i((M - N_G[r]) \cup S) \\
& - i(P_1 \cup (M - N_G[q]) \cup (S - N_G[p])) \\
& = i(P_1)i(M)i(S) - i(M - N_G[r])i(S) \\
& - i(P_1)i(M - N_G[q])i(S - N_G[p]) \\
& = [i(P_1)i(M) - i(M - N_G[r])]i(S) - i(P_1)i(M - N_G[q])i(S - N_G[p]) \\
& = (2, -1, 0, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S) + (0, 0, -2, 0, 0) \cdot i_{rq}(M)i(S - N_G[p]).
\end{aligned}$$

Elde edilen bu denklemlerden $j = 1, 2, 3, 4, 5$ için E_j^{ms} matrisleri yukarıda verilen formda matrisler olmak üzere

$$i_{uv}(G) = i_{rq}^*(M) \cdot i_{wp}(S)$$

eşitliğine ulaşılır.

4.3.7. Örnek. $G = (V, E)$ grafi Şekil 4.3'te verilen iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem olarak verildiğinde xy kenarı üzerindeki basit Merrifield-Simmons vektörü $i_{xy}(G)$ yardımıyla $i(G)$ değeri S^I, S^{II}, S^{III} ve S^{IV} karşılık gelen alt graflar olmak üzere aşağıdaki şekilde hesaplanabilir:

$$\begin{aligned}
i_{xy}(G) & = A^{ms} \cdot B^{ms} \cdot i_{uv}(S^I) \\
& = A^{ms} \cdot B^{ms} \cdot Z \cdot i_{wp}(S^{II}) \\
& = A^{ms} \cdot B^{ms} \cdot Z \cdot D^{ms} \cdot i_{pw}(S^{II}) \\
& = A^{ms} \cdot B^{ms} \cdot Z \cdot D^{ms} \cdot A^{ms} \cdot i_{cd}(S^{III}) \\
& = A^{ms} \cdot B^{ms} \cdot Z \cdot D^{ms} \cdot A^{ms} \cdot L \cdot i_{st}(S^{IV})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= A^{ms} \cdot B^{ms} \cdot Z \cdot D^{ms} \cdot A^{ms} \cdot L \cdot A^{ms} \cdot i_{kh}(P_2) \\
&= A^{ms} \cdot B^{ms} \cdot Z \cdot D^{ms} \cdot A^{ms} \cdot L \cdot A^{ms} \cdot (3, 1, 1, 2, 2)^T.
\end{aligned}$$

M matrisi, rq kenarında temel grafa komşu olarak L_3 lineer benzenoid zinciri olan alt graf olmak üzere Z matrisi sütunları sırasıyla $E_1^{ms} \cdot i_{rq}(M, k), E_2^{ms} \cdot i_{rq}(M, k), E_3^{ms} \cdot i_{rq}(M, k), E_4^{ms} \cdot i_{rq}(M, k), E_5^{ms} \cdot i_{rq}(M, k)$ olan matristir. Benzer olarak M matrisi ef kenarında temel grafa komşu olarak tek bir hekzagon olmak üzere L matrisi sütunları sırasıyla $E_1^{ms} \cdot i_{ef}(M, k), E_2^{ms} \cdot i_{ef}(M, k), E_3^{ms} \cdot i_{ef}(M, k), E_4^{ms} \cdot i_{ef}(M, k)$ ve $E_5^{ms} \cdot i_{ef}(M, k)$ olan matristir. Bu denklem hesaplanarak aşağıdaki sonuca ulaşılır.

$$i_{xy}(G) = [282646764, 77570059, 76505257, 205076705, 206141507]^T.$$

Sonuç olarak,

$$i(G) = 282646764, i(G - N_G[x]) = 77570059, i(G - N_G[y]) = 76505257$$

$$i(G - x) = 205076705, i(G - y) = 206141507$$

değerleri elde edilir.

4.4. Çift Katlı Benzenoid Zincirlerin Hosoya İndeksinin Hesaplanması

Bu bölümde Bölüm 2.6’da tanımlanan çift katlı benzenoid zincirlere odaklanılacak ve verilen her çift katlı benzenoid zincirin Hosoya indeksinin hesaplanması için 8×8 boyutlu doğal sayı içerikli matrislerin ve bir vektörün uygun kombinasyonlarda çarpımına dayanan bir metot önerilecektir. Önerilecek metot içerisinde çift katlı benzenoid zincir grafi yapılarında $j = 4$ veya $j = 5$ olacak şekildeki bir patika graf P_j üzerinde

tanımlanarak *genelleştirilmiş Hosoya vektörü* adıyla kullanılacak olan bir vektöre ihtiyaç duyulacaktır. Bu vektör aşağıdaki şekilde tanımlanacaktır:

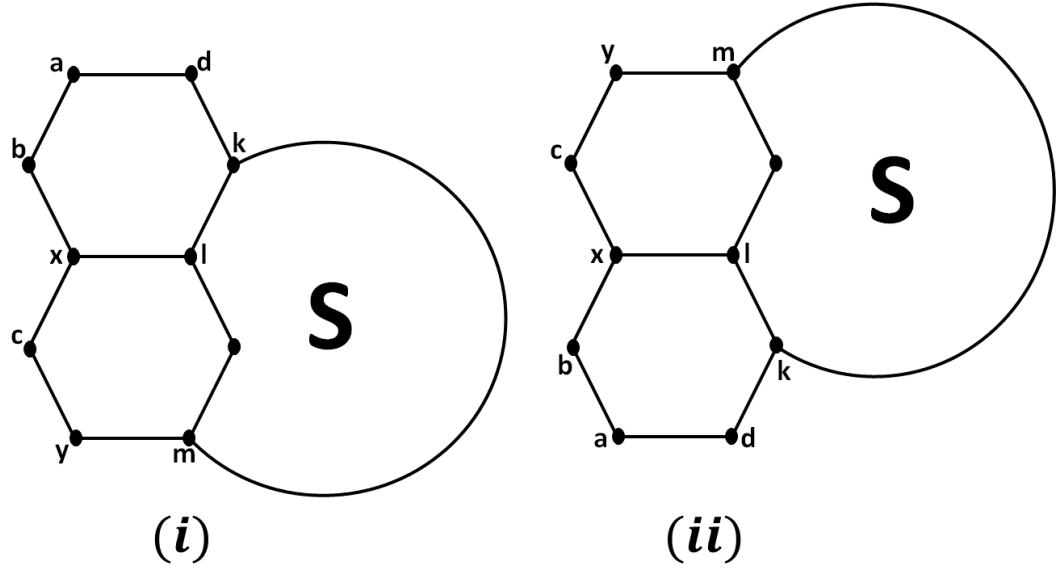
4.4.1. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. $j = 4$ veya $j = 5$ olmak üzere $a, x, y \in V$ köşeleri G grafindaki bir P_j patikasının üç köşesi olsun. $a, x, y \in V$ köşelerini içeren P_j patikası üzerindeki *genelleştirilmiş Hosoya vektörü*

$$Z_{axy}(G) = \begin{bmatrix} Z(G) \\ Z(G - a) \\ Z(G - x) \\ Z(G - y) \\ Z(G - a - x) \\ Z(G - x - y) \\ Z(G - a - y) \\ Z(G - a - x - y) \end{bmatrix}$$

şeklinde tanımlanır.

Genelleştirilmiş Hosoya vektörü, Cruz ve ark. (2017) tarafından verilen bir $G = (V, E)$ grafinin bir $e \in E$ kenarı üzerinde tanımlanmış olan Hosoya vektörünün bir P_j patika grafi üzerinde tanımlanarak genişletilmiş versiyonu şeklinde düşünülebilir.

Sıradaki şekilde bu bölüm ve bir sonraki bölümde sunulacak olan teorem ve sonuçların anlaşılabilirliğini arttırmak için bir G grafi iki farklı perspektiften gösterilecektir.



Şekil 4.4. Bölüm 4.4 ve Bölüm 4.5'te sunulacak olan tüm teoremler ve sonuçlarda kullanılacak olan çift katlı benzenoid zincir formu türleri

4.4.2. Teorem. $G = H(\tau, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (i) şıkkında görülebilir). O zaman

$$Q = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 4 & 3 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 2 & 3 & 2 & 1 & 3 & 1 \\ 6 & 4 & 0 & 3 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 8 & 5 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$Z_{axy}(G) = Q \cdot Z_{klm}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. $Z_{axy}(G)$ tanımından hareketle $Z(G), Z(G - a), Z(G - x), Z(G - y), Z(G - a - x), Z(G - x - y), Z(G - a - y), Z(G - a - x - y)$ değerlerinin bulunması ispatı tamamlayacaktır. Bu değerler kd, lx, my kenarlarının ilgili alt graflara göre uygun kombinasyonlarda silinerek ve Lemma 3.1.1’de verilen rekürans bağıntıları kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned}
Z(G) &= Z(G - kd - lx - my) + Z(G - kd - lx - m - y) \\
&\quad + Z(G - kd - l - x - my) + Z(G - kd - l - x - m - y) \\
&\quad + Z(G - k - d - lx - my) + Z(G - k - d - lx - m - y) \\
&\quad + Z(G - k - d - l - x - my) + Z(G - k - d - l - x - m - y) \\
&= Z(P_6)Z(S) + Z(P_5)Z(S - m) \\
&\quad + Z(P_2)Z(P_3)Z(S - l) + Z(P_1)Z(P_3)Z(S - l - m) \\
&\quad + Z(P_5)Z(S - k) + Z(P_4)Z(S - k - m) \\
&\quad + Z(P_2)Z(P_2)Z(S - k - l) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k - l - m) \\
&= (13, 8, 6, 8, 4, 3, 5, 2) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a) &= Z(G - a - kd - lx - my) + Z(G - a - kd - lx - m - y) \\
&\quad + Z(G - a - kd - l - x - my) + Z(G - a - kd - l - x - m - y) \\
&\quad + Z(G - a - k - d - lx - my) + Z(G - a - k - d - lx - m - y) \\
&\quad + Z(G - a - k - d - l - x - my) + Z(G - a - k - d - l - x - m - y) \\
&= Z(P_1)Z(P_4)Z(S) + Z(P_1)Z(P_3)Z(S - m) \\
&\quad + Z(P_1)Z(P_1)Z(P_2)Z(S - l) + Z(P_1)Z(P_1)Z(P_1)Z(S - l - m) \\
&\quad + Z(P_4)Z(S - k) + Z(P_3)Z(S - k - m) \\
&\quad + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k - l) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k - l - m) \\
&= (5, 5, 2, 3, 2, 1, 3, 1) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - x) &= Z(G - x - my - kd) + Z(G - x - my - k - d) \\
&\quad + Z(G - x - m - y - kd) + Z(G - x - m - y - k - d) \\
&= Z(P_2)Z(P_3)Z(S) + Z(P_2)Z(P_2)Z(S - k) \\
&\quad + Z(P_1)Z(P_3)Z(S - m) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k - m) \\
&= (6, 4, 0, 3, 0, 0, 2, 0) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - y) &= Z(G - y - lx - kd) + Z(G - y - lx - k - d) \\
&\quad + Z(G - y - l - x - kd) + Z(G - y - l - x - k - d) \\
&= Z(P_5)Z(S) + Z(P_4)Z(S - k) \\
&\quad + Z(P_1)Z(P_3)Z(S - l) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k - l) \\
&= (8, 5, 3, 0, 2, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a - x) &= Z(G - a - x - my - kd) + Z(G - a - x - my - k - d) \\
&\quad + Z(G - a - x - m - y - kd) + Z(G - a - x - m - y - k - d) \\
&= Z(P_1)Z(P_1)Z(P_2)Z(S) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k) \\
&\quad + Z(P_1)Z(P_1)Z(P_1)Z(S - m) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k - m) \\
&= (2, 2, 0, 1, 0, 0, 1, 0) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - x - y) &= Z(G - x - y - kd) + Z(G - x - y - k - d) \\
&= Z(P_1)Z(P_3)Z(S) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k) \\
&= (3, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a - y) &= Z(G - a - y - lx - kd) + Z(G - a - y - lx - k - d) \\
&\quad + Z(G - a - y - l - x - kd) + Z(G - a - y - l - x - k - d) \\
&= Z(P_1)Z(P_3)Z(S) + Z(P_3)Z(S - k) \\
&\quad + Z(P_1)Z(P_1)Z(P_1)Z(S - l) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k - l) \\
&= (3, 3, 1, 0, 1, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a - x - y) &= Z(G - a - x - y - kd) + Z(G - a - x - y - k - d) \\
&= Z(P_1)Z(P_1)Z(P_1)Z(S) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k)
\end{aligned}$$

$$= (1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S).$$

Yukarıda elde edilen denklemlerden $Q = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 4 & 3 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 2 & 3 & 2 & 1 & 3 & 1 \\ 6 & 4 & 0 & 3 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 8 & 5 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ olmak üzere

$$Z_{axy}(G) = Q \cdot Z_{klm}(S) \text{ sonucuna ulaşılır.}$$

4.4.3. Sonuç. $G = (V, E)$ grafi, $S \cong P_4$ patika grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (i) şıkında $S \cong P_4$ olarak düşünülebilir). O zaman

$$Z_{axy}(G) = Q \cdot [5, 3, 2, 3, 2, 1, 2, 1]^T$$

denklemini sağlar.

İspat. Teorem 4.4.2'den $Z_{axy}(G) = Q \cdot Z_{klm}(S)$ ve $S \cong P_4$ olduğundan $Z_{axy}(G) = Q \cdot Z_{klm}(P_4)$ eşitliğinden ispat tamamlanır.

4.4.4. Sonuç. $G = H(\gamma, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (ii) şıkında görülebilir). O zaman

$$Q' = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 3 & 4 & 5 & 2 \\ 8 & 0 & 3 & 5 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 6 & 3 & 0 & 4 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 5 & 3 & 2 & 5 & 1 & 2 & 3 & 1 \\ 3 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 3 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$Z_{yxa}(G) = Q' \cdot Z_{mlk}(S)$$

denklemini sağlanır.

İspat. Teorem 4.4.2'den $Z_{axy}(G) = Q \cdot Z_{klm}(S)$ olduğunu bilinmektedir. R_i ler Q matrisinin satırlarını temsil etmek üzere Q matrisine $R_2 \leftrightarrow R_4$ ve $R_5 \leftrightarrow R_6$ elementer satır operasyonları uygulanarak elde edilmiş matris A_1 olsun. O halde genelleştirilmiş Hosoya vektörü ifadesinden $Z_{yxa}(G) = A_1 \cdot Z_{klm}(S)$ denklemi elde edilir. Devamında C_i ler A_1 matrisinin sütunlarını temsil etmek üzere A_1 matrisine $C_2 \leftrightarrow C_4$ ve $C_5 \leftrightarrow C_6$ elementer sütun operasyonları uygulanarak elde edilmiş matris Q' olur. Sonuç olarak genelleştirilmiş Hosoya vektörü tanımından $Z_{yxa}(G) = Q' \cdot Z_{mlk}(S)$ sonucuna varılır.

4.4.5. Teorem. $G = H(\tau, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (i) şıkında görülebilir). O zaman

$$P = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 4 & 3 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 2 & 3 & 2 & 1 & 3 & 1 \\ 6 & 3 & 4 & 4 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 5 & 3 & 3 & 5 & 2 & 3 & 3 & 2 \\ 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$Z_{abc}(G) = P \cdot Z_{klm}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. İlk olarak Teorem 4.4.2'den $Z(G) = (13, 8, 6, 8, 4, 3, 5, 2) \cdot Z_{klm}(S)$, $Z(G - a) = (5, 5, 2, 3, 2, 1, 3, 1) \cdot Z_{klm}(S)$ değerleri bilinmektedir. $Z_{abc}(G)$ vektörü için gerekli değerler olan $Z(G - b)$, $Z(G - c)$, $Z(G - a - b)$, $Z(G - b - c)$, $Z(G - a - c)$, $Z(G - a - b - c)$ değerleri ise kd, lx, my kenarları alt graflardan silinerek ve Lemma 3.1.1'de verilen rekürans bağıntıları kullanılarak şu şekilde indirgenir:

$$\begin{aligned} Z(G - b) &= Z(G - b - kd - lx - my) + Z(G - b - kd - lx - m - y) \\ &\quad + Z(G - b - kd - l - x - my) + Z(G - b - kd - l - x - m - y) \\ &\quad + Z(G - b - k - d - lx - my) + Z(G - b - k - d - lx - m - y) \\ &\quad + Z(G - b - k - d - l - x - my) + Z(G - b - k - d - l - x - m - y) \\ &= Z(P_2)Z(P_3)Z(S) + Z(P_2)Z(P_2)Z(S - m) \\ &\quad + Z(P_2)Z(P_2)Z(S - l) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - l - m) \\ &\quad + Z(P_1)Z(P_3)Z(S - k) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k - m) \\ &\quad + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k - l) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k - l - m) \end{aligned}$$

$$= (6, 3, 4, 4, 2, 2, 2, 1) \cdot Z_{klm}(S),$$

$$\begin{aligned} Z(G - c) &= Z(G - c - kd - lx - my) + Z(G - c - kd - lx - m - y) \\ &\quad + Z(G - c - kd - l - x - my) + Z(G - c - kd - l - x - m - y) \\ &\quad + Z(G - c - k - d - lx - my) + Z(G - c - k - d - lx - m - y) \\ &\quad + Z(G - c - k - d - l - x - my) + Z(G - c - k - d - l - x - m - y) \\ &= Z(P_1)Z(P_4)Z(S) + Z(P_4)Z(S - m) \\ &\quad + Z(P_1)Z(P_3)Z(S - l) + Z(P_3)Z(S - l - m) \\ &\quad + Z(P_1)Z(P_3)Z(S - k) + Z(P_3)Z(S - k - m) \\ &\quad + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k - l) + Z(P_2)Z(S - k - l - m) \\ &= (5, 3, 3, 5, 2, 3, 3, 2) \cdot Z_{klm}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G - a - b) &= Z(G - a - b - kd - lx - my) + Z(G - a - b - kd - lx - m - y) \\ &\quad + Z(G - a - b - kd - l - x - my) \\ &\quad + Z(G - a - b - kd - l - x - m - y) \\ &\quad + Z(G - a - b - k - d - lx - my) \\ &\quad + Z(G - a - b - k - d - lx - m - y) \\ &\quad + Z(G - a - b - k - d - l - x - my) \\ &\quad + Z(G - a - b - k - d - l - x - m - y) \\ &= Z(P_1)Z(P_3)Z(S) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - m) \\ &\quad + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - l) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - l - m) \\ &\quad + Z(P_3)Z(S - k) + Z(P_2)Z(S - k - m) \\ &\quad + Z(P_2)Z(S - k - l) + Z(P_1)Z(S - k - l - m) \\ &= (3, 3, 2, 2, 2, 1, 2, 1) \cdot Z_{klm}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G - b - c) &= Z(G - b - c - kd - lx - my) + Z(G - b - c - kd - lx - m - y) \\ &\quad + Z(G - b - c - kd - l - x - my) \\ &\quad + Z(G - b - c - kd - l - x - m - y) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +Z(G - b - c - k - d - lx - my) \\
& +Z(G - b - c - k - d - lx - m - y) \\
& +Z(G - b - c - k - d - l - x - my) \\
& +Z(G - b - c - k - d - l - x - m - y) \\
& = Z(P_1)Z(P_1)Z(P_2)Z(S) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_2)Z(S - l) + Z(P_2)Z(S - l - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k - l) + Z(P_1)Z(S - k - l - m) \\
& = (2, 1, 2, 2, 1, 2, 1, 1) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a - c) &= Z(G - a - c - kd - lx - my) + Z(G - a - c - kd - lx - m - y) \\
& +Z(G - a - c - kd - l - x - my) \\
& +Z(G - a - c - kd - l - x - m - y) \\
& +Z(G - a - c - k - d - lx - my) \\
& +Z(G - a - c - k - d - lx - m - y) \\
& +Z(G - a - c - k - d - l - x - my) \\
& +Z(G - a - c - k - d - l - x - m - y) \\
& = Z(P_1)Z(P_1)Z(P_2)Z(S) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_1)Z(P_1)Z(S - l) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - l - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_2)Z(S - k) + Z(P_2)Z(S - k - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k - l) + Z(P_1)Z(S - k - l - m) \\
& = (2, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 1) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a - b - c) &= Z(G - a - b - c - kd - lx - my) \\
& +Z(G - a - b - c - kd - lx - m - y) \\
& +Z(G - a - b - c - kd - l - x - my) \\
& +Z(G - a - b - c - kd - l - x - m - y)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +Z(G - a - b - c - k - d - lx - my) \\
& +Z(G - a - b - c - k - d - lx - m - y) \\
& +Z(G - a - b - c - k - d - l - x - my) \\
& +Z(G - a - b - c - k - d - l - x - m - y) \\
& = Z(P_1)Z(P_1)Z(P_1)Z(S) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_1)Z(S - l) + Z(P_1)Z(S - l - m) \\
& +Z(P_1)Z(P_1)Z(S - k) + Z(P_1)Z(S - k - m) \\
& +Z(P_1)Z(S - k - l) + Z(S - k - l - m) \\
& = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1) \cdot Z_{klm}(S).
\end{aligned}$$

Ulaşılan bu denklemlerden $P = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 4 & 3 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 2 & 3 & 2 & 1 & 3 & 1 \\ 6 & 3 & 4 & 4 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 5 & 3 & 3 & 5 & 2 & 3 & 3 & 2 \\ 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ olmak üzere $Z_{abc}(G) =$

$P \cdot Z_{klm}(S)$ sonucuna varılır.

4.4.6. Sonuç. $G = H(\gamma, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (ii) şıkında görülebilir). O zaman

$$P' = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 3 & 4 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 3 & 3 & 3 & 2 & 3 & 2 \\ 6 & 4 & 4 & 3 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 5 & 3 & 2 & 5 & 1 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 2 & 3 & 1 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$Z_{cba}(G) = P' \cdot Z_{mlk}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. Sonuç 4.4.4'ün ispatında kullanılan yol izlenirse Teorem 4.4.5'ten $Z_{abc}(G) = P \cdot Z_{klm}(S)$ denklemi mevcuttur. Burada R_i ler P matrisinin satırlarını temsil etmek üzere P matrisine $R_2 \leftrightarrow R_4$ ve $R_5 \leftrightarrow R_6$ elementer satır operasyonları uygulanarak elde edilmiş matris A_2 olarak ifade edilirse genelleştirilmiş Hosoya vektörü tanımından $Z_{cba}(G) = A_2 \cdot Z_{klm}(S)$ denkleminde ulaşılır. Sonrasında C_i ler A_2 matrisinin sütunlarını temsil etmek üzere A_2 matrisine $C_2 \leftrightarrow C_4$ ve $C_5 \leftrightarrow C_6$ elementer sütun operasyonları uygulandığında yeni elde edilmiş matris P' olur ve genelleştirilmiş Hosoya vektörü tanımından $Z_{cba}(G) = P' \cdot Z_{mlk}(S)$ denklemi elde edilir.

Buraya kadar sunulan bulgular özetlenir ve sonuca varılırsa Şekil 4.4 (i) şıkında verilen şekilde S grafına bağlı olan naftalin molekülü yerine k tane naftaline sahip $H(\tau, \tau, \dots, \tau)$ çift katlı lineer benzenoid zinciri olduğu varsayılırsa $Z_{axy}(G) = Q \cdot P^{k-1} \cdot Z_{klm}(S)$.

Ayrıca Şekil 4.4 (ii) şıkında verilen şekilde S grafına bağlı olan naftalin molekülü yerine k tane naftaline sahip $H(\gamma, \gamma, \dots, \gamma)$ çift katlı lineer benzenoid zinciri olduğu varsayılırsa $Z_{yxa}(G) = Q' \cdot (P')^{k-1} \cdot Z_{mlk}(S)$.

4.4.7. Teorem. $G = H(\tau, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (i) şıkında görülebilir). O zaman

$$R = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 4 & 3 & 5 & 2 \\ 6 & 3 & 4 & 4 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 5 & 3 & 3 & 5 & 2 & 3 & 3 & 2 \\ 8 & 5 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ 5 & 3 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 2 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$Z_{bcy}(G) = R \cdot Z_{klm}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. Teorem 4.4.2 ve Teorem 4.4.5'in ispatlarından $Z(G) = (13, 8, 6, 8, 4, 3, 5, 2) \cdot Z_{klm}(S)$, $Z(G - b) = (6, 3, 4, 4, 2, 2, 2, 1) \cdot Z_{klm}(S)$, $Z(G - c) = (5, 3, 3, 5, 2, 3, 3, 2) \cdot Z_{klm}(S)$, $Z(G - y) = (8, 5, 3, 0, 2, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S)$ ve en son olarak $Z(G - b - c) = (2, 1, 2, 2, 1, 2, 1, 1) \cdot Z_{klm}(S)$ olduğu bilinmektedir. Bu değerlerin haricinde $Z_{bcy}(G)$ vektörü için $Z(G - c - y)$, $Z(G - b - y)$, $Z(G - b - c - y)$ değerlerinin elde edilmesi gereklidir. Bu değerler kd ve lx kenarlarının karşılık gelen alt graflardan silinmesi ve Lemma 3.1.1'in kullanılmasıyla aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\begin{aligned} Z(G - c - y) &= Z(G - c - y - kd - lx) + Z(G - c - y - kd - l - x) \\ &\quad + Z(G - c - y - k - d - lx) + Z(G - c - y - k - d - l - x) \\ &= Z(P_4)Z(S) + Z(P_3)Z(S - l) \\ &\quad + Z(P_3)Z(S - k) + Z(P_2)Z(S - k - l) \\ &= (5, 3, 3, 0, 2, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S), \end{aligned}$$

$$Z(G - b - y) = Z(G - b - y - kd - lx) + Z(G - b - y - kd - l - x)$$

$$\begin{aligned}
& +Z(G-b-y-k-d-lx) + Z(G-b-y-k-d-l-x) \\
& = Z(P_2)Z(P_2)Z(S) + Z(P_1)Z(P_2)Z(S-l) \\
& +Z(P_1)Z(P_2)Z(S-k) + Z(P_1)Z(P_1)Z(S-k-l) \\
& = (4, 2, 2, 0, 1, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G-b-c-y) &= Z(G-b-c-y-kd-lx) + Z(G-b-c-y-kd-l-x) \\
& +Z(G-b-c-y-k-d-lx) \\
& +Z(G-b-c-y-k-d-l-x) \\
& = Z(P_2)Z(P_1)Z(S) + Z(P_2)Z(S-l) \\
& +Z(P_1)Z(P_1)Z(S-k) + Z(P_1)Z(S-k-l) \\
& = (2, 1, 2, 0, 1, 0, 0, 0) \cdot Z_{klm}(S).
\end{aligned}$$

Sonuç olarak elde edilen denklemlerden $R = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 4 & 3 & 5 & 2 \\ 6 & 3 & 4 & 4 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 5 & 3 & 3 & 5 & 2 & 3 & 3 & 2 \\ 8 & 5 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ 5 & 3 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 2 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ olmak

üzere $Z_{bcy}(G) = R \cdot Z_{klm}(S)$ denklemi gerçekleşir.

4.4.8. Sonuç. $G = H(\gamma, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (ii) şikkında görülebilir). O zaman

$$R' = \begin{bmatrix} 13 & 8 & 6 & 8 & 3 & 4 & 5 & 2 \\ 8 & 0 & 3 & 5 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 5 & 5 & 3 & 3 & 3 & 2 & 3 & 2 \\ 6 & 4 & 4 & 3 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 5 & 0 & 3 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 0 & 2 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

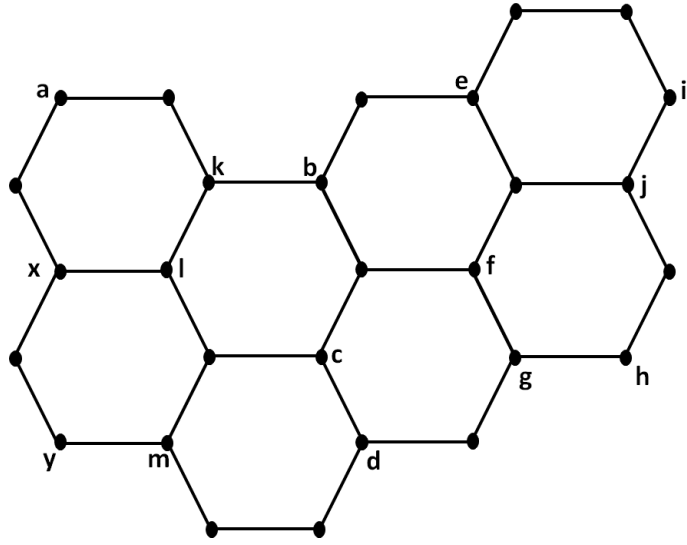
$$Z_{ycb}(G) = R' \cdot Z_{mlk}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. Teorem 4.4.7'den $Z_{bcy}(G) = R \cdot Z_{klm}(S)$ denklemini kullanılarak R_i ler R matrisinin satırlarını temsil etmek üzere R matrisine $R_2 \leftrightarrow R_4$ ve $R_5 \leftrightarrow R_6$ elementer satır operasyonları uygulanarak elde edilmiş matris A_3 ise genelleştirilmiş Hosoya vektörü tanımından $Z_{ycb}(G) = A_3 \cdot Z_{klm}(S)$ olduğu görülür. Ayrıca C_i ler A_3 matrisinin sütunlarını temsil etmek üzere A_3 matrisine $C_2 \leftrightarrow C_4$ ve $C_5 \leftrightarrow C_6$ elementer sütun operasyonlarının uygulanmış hali R' matrisi olur. Genelleştirilmiş Hosoya vektörü tanımından $Z_{ycb}(G) = R' \cdot Z_{mlk}(S)$ denkleminde ulaşılır.

Bu bölümde önerilen metotta 8×8 boyutlu doğal sayı içerikli Q, Q', P, P', R, R' matrisleri ve $[5, 3, 2, 3, 2, 1, 2, 1]^T$ vektörünün verilen çift katlı benzenoid zincire göre seçilen uygun bir çarpımı ile zincirin Hosoya indeksi hesaplanabilmektedir. Bir sonraki örnekte bu metodun bir uygulaması gösterilmektedir.

4.4.9. Örnek. $G = H(\tau, \gamma, \gamma)$ grafi aşağıdaki şekilde verilen bir çift katlı benzenoid zincir olsun.



Şekil 4.5. Çift katlı benzenoid zincir $G = H(\tau, \gamma, \gamma)$

$G = H(\tau, \gamma, \gamma)$ grafinın Hosoya indeksi S^I, S^{II} ve S^{III} karşılık gelen alt graflar olmak üzere önerilen metot ile aşağıdaki şekilde hesaplanabilir:

$$\begin{aligned} Z_{axy}(G) &= Q \cdot Z_{klm}(S^I) = Q \cdot R' \cdot Z_{bcd}(S^{II}) = Q \cdot R' \cdot P' \cdot Z_{efg}(S^{III}) \\ &= Q \cdot R' \cdot P' \cdot R \cdot Z_{ijh}(P_4). \end{aligned}$$

Yukarıda elde edilen denklemden aşağıdaki sonuca ulaşılır:

$$\begin{aligned} Z_{axy}(G) &= Q \cdot R' \cdot P' \cdot R \cdot [5, 3, 2, 3, 2, 1, 2, 1]^T \\ &= [2705084, 1153500, 990234, 1251270, 369454, 398063, 524519, 148423]^T. \end{aligned}$$

Sonuç olarak $Z(G) = Z(H(\tau, \gamma, \gamma)) = 2705084$ değerine ulaşılır.

4.5. Çift Katlı Benzenoid Zincirlerin Merrifield-Simmons İndeksinin Hesaplanması

Bölüm 4.4'te çift katlı benzenoid zincirlerin Hosoya indeksinin hesaplanmasında kullanılan bir metot önerilmişti. Bu bölümde de bir önceki bölümün devamı niteliğinde, çift katlı benzenoid zincirlerin Merrifield-Simmons indeksinin hesabına yönelik 18×18 boyutlu, doğal sayı içerikli matrisler ile bir $v \in \mathbb{R}^{18}$ vektörünün verilen zincire göre seçilmiş uygun bir çarpımına dayanan bir metot önerilecektir. Sunulacak olan metotta kritik öneme sahip olan ve verilen çift katlı benzenoid zincirin P_4 veya P_5 patikaları üzerinde tanımlanarak *Merrifield-Simmons vektörü* adıyla kullanılacak olan bir vektöre ihtiyaç duyulacaktır. Bir sonraki tanımda *Merrifield-Simmons vektörü* tanımlanmaktadır.

4.5.1. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. $a, x, y \in V$ köşeleri G grafındaki bir P_4 veya P_5 patikasının üç köşesi olarak verilsin. $a, x, y \in V$ köşelerini içeren P_4 veya P_5 patikası üzerindeki *Merrifield-Simmons vektörü*

$$i_{axy}(G) = \begin{bmatrix} i(G) \\ i(G - N_G[a]) \\ i(G - N_G[x]) \\ i(G - N_G[y]) \\ i(G - N_G[x] - N_G[y]) \\ i(G - N_G[x] - N_G[a]) \\ i(G - N_G[a] - N_G[x] - N_G[y]) \\ i(G - y) \\ i(G - x) \\ i(G - a) \\ i(G - x - y) \\ i(G - x - a) \\ i(G - N_G[a] - y) \\ i(G - N_G[y] - a) \\ i(G - N_G[x] - y) \\ i(G - N_G[x] - a) \\ i(G - N_G[y] - x) \\ i(G - N_G[a] - x) \end{bmatrix}$$

şeklinde tanımlanır.

4.5.2. Teorem. $G = H(\tau, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (i) şıkında görülebilir). O zaman

$$X = \begin{bmatrix} 21 & -8 & -6 & -8 & 3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 13 & -5 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 15 & -6 & 0 & -5 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -8 & -4 & -6 & 2 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & -6 & 0 & -4 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{axy}(G) = X \cdot i_{klm}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. Merrifield-Simmons vektörü tanımından yola çıkarak $i(G), i(G - N_G[a]), i(G - N_G[x]), i(G - N_G[y]), \dots, i(G - N_G[y] - x), i(G - N_G[a] - x)$ değerlerinin bulunması ispat için gereklidir. Bu değerler kd, lx, my kenarlarının alt graflara göre S grafini naftalin molekülünden ayrılacak şekilde uygun bir kombinasyonda silinerek ve Lemma 3.1.2’de verilen rekürans bağıntıları kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned}
i(G) &= i(G - my) - i(G - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - my - lx) - i(G - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
&\quad - i(G - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - my - lx - kd) - i(G - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - my - lx - kd) - i(G - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
&\quad + i(G - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(G - my - lx - kd) - i(G - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - N_G[m] - N_G[y] - lx - kd) \\
&\quad + i(G - N_G[m] - N_G[y] - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad + i(G - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_6)i(S) - i(P_4)i(S - N_G[k]) - i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[l]) - i(P_4)i(S - N_G[m]) \\
&\quad + i(P_2)i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) + i(P_2)i(S - N_G[l] - N_G[m]) \\
&= (21, -8, -6, -8, 3, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[a]) &= i(G - N_G[a] - my) - i(G - N_G[a] - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - N_G[a] - my - lx) - i(G - N_G[a] - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
&\quad - i(G - N_G[a] - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - N_G[a] - my - lx) - i(G - N_G[a] - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
&\quad - i(G - N_G[a] - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
&\quad + i(G - N_G[a] - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_3)i(S) - i(P_1)i(S - N_G[l]) - i(P_1)i(S - N_G[m]) \\
&\quad + i(S - N_G[l] - N_G[m]) \\
&= (5, 0, -2, -2, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G-N_G[x]) &= i(G-N_G[x] - my) - i(G-N_G[x] - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G-N_G[x] - my - kd) - i(G-N_G[x] - my - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G-N_G[x] - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G-N_G[x] - my - kd) - i(G-N_G[x] - my - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G-N_G[x] - N_G[m] - N_G[y] - kd) \\
&\quad + i(G-N_G[x] - N_G[m] - N_G[y] - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_1)i(P_2)i(S-l) - i(P_1)i(S-N_G[k]) - i(P_2)i(S-N_G[m]-l) \\
&\quad + i(S-N_G[k]-N_G[l]-N_G[m]) \\
&= (0, -2, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 6, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -3, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G-N_G[y]) &= i(G-N_G[y] - lx) - i(G-N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(G-N_G[y] - lx - kd) - i(G-N_G[y] - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G-N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_4)i(S-m) - i(P_2)i(S-N_G[k]-m) - i(P_2)i(S-N_G[l]-m) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 8, 0, 0, 0, 0, -3, 0, -3, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G-N_G[x] - N_G[y]) &= i(G-N_G[x] - N_G[y] - kd) \\
&\quad - i(G-N_G[x] - N_G[y] - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_2)i(S-l-m) - i(S-N_G[k]-m) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 3, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G-N_G[x] - N_G[a]) &= i(G-N_G[x] - N_G[a] - my) \\
&\quad - i(G-N_G[x] - N_G[a] - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(P_1)i(S-l) - i(S-N_G[m]-l) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G-N_G[a] - N_G[x] - N_G[y]) &= i(S-l-m) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$i(G-y) = i(G-y-lx) - i(G-y-N_G[l]-N_G[x])$$

$$\begin{aligned}
&= i(G - y - lx - kd) - i(G - y - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - y - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_5)i(S) - i(P_3)i(S - N_G[k]) - i(P_2)i(S - N_G[l]) \\
&= (13, -5, -3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - x) &= i(G - x - kd) - i(G - x - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(G - x - kd - my) - i(G - x - kd - N_G[m] - N_G[y]) \\
&\quad - i(G - x - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(G - x - kd - my) - i(G - x - kd - N_G[m] - N_G[y]) \\
&\quad - i(G - x - N_G[k] - N_G[d] - my) + i(G - x - N_G[k] - N_G[d] - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(P_2)i(P_3)i(S) - i(P_3)i(S - N_G[m]) - i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[k]) \\
&\quad + i(P_1)i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) \\
&= (15, -6, 0, -5, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - a) &= i(G - a - my) - i(G - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - a - my - lx) - i(G - a - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
&\quad - i(G - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - a - my - lx - kd) - i(G - a - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - a - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - a - my - lx - kd) - i(G - a - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - a - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - a - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
&\quad + i(G - a - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(G - a - my - lx - kd) - i(G - a - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - a - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - a - N_G[m] - N_G[y] - lx - kd) \\
&\quad + i(G - a - N_G[m] - N_G[y] - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad + i(G - a - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_1)i(P_4)i(S) - i(P_4)i(S - N_G[k]) - i(P_1)i(P_1)i(S - N_G[l])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i(P_1)i(P_2)i(S-N_G[m]) + i(P_2)i(S-N_G[k]-N_G[l]-N_G[m]) \\
& + i(P_1)i(S-N_G[l]-N_G[m]) \\
& = (16, -8, -4, -6, 2, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G-x-y) & = i(G-x-y-kd) - i(G-x-y-N_G[k]-N_G[d]) \\
& = i(P_1)i(P_3)i(S) - i(P_1)i(P_1)i(S-N_G[k]) \\
& = (10, -4, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G-x-a) & = i(G-x-a-my) - i(G-x-a-N_G[m]-N_G[y]) \\
& = i(G-x-a-my-kd) - i(G-x-a-my-N_G[k]-N_G[d]) \\
& \quad - i(G-x-a-N_G[m]-N_G[y]) \\
& = i(G-x-a-my-kd) - i(G-x-a-my-N_G[k]-N_G[d]) \\
& \quad - i(G-x-a-N_G[m]-N_G[y]-kd) \\
& \quad + i(G-x-a-N_G[m]-N_G[y]-N_G[k]-N_G[d]) \\
& = i(P_1)i(P_1)i(P_2)i(S) - i(P_1)i(P_2)i(S-N_G[k]) \\
& \quad - i(P_1)i(P_1)i(S-N_G[m]) + i(P_1)i(S-N_G[k]-N_G[l]-N_G[m]) \\
& = (12, -6, 0, -4, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G-N_G[a]-y) & = i(G-N_G[a]-y-lx) - i(G-N_G[a]-y-N_G[l]-N_G[x]) \\
& = i(P_2)i(S) - i(S-N_G[l]) \\
& = (3, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G-N_G[y]-a) & = i(G-N_G[y]-a-lx) - i(G-N_G[y]-a-N_G[l]-N_G[x]) \\
& = i(G-N_G[y]-a-lx-kd) \\
& \quad - i(G-N_G[y]-a-lx-N_G[k]-N_G[d]) \\
& \quad - i(G-N_G[y]-a-N_G[l]-N_G[x]) \\
& = i(P_1)i(P_2)i(S-m) - i(P_2)i(S-N_G[k]-m) \\
& \quad - i(P_1)i(S-N_G[l]-m) \\
& = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 6, 0, 0, 0, 0, -3, 0, -2, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[x] - y) &= i(G - N_G[x] - y - kd) - i(G - N_G[x] - y - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_2)i(S - l) - i(S - N_G[k]) \\
&= (0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[x] - a) &= i(G - N_G[x] - a - my) - i(G - N_G[x] - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - N_G[x] - a - my - kd) \\
&\quad - i(G - N_G[x] - a - my - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - N_G[x] - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - N_G[x] - a - my - kd) \\
&\quad - i(G - N_G[x] - a - my - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - N_G[x] - a - N_G[m] - N_G[y] - kd) \\
&\quad + i(G - N_G[x] - a - N_G[m] - N_G[y] - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_1)i(P_1)i(S - l) - i(P_1)i(S - N_G[k]) - i(P_1)i(S - N_G[m] - l) \\
&\quad + i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) \\
&= (0, -2, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 4, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[y] - x) &= i(G - N_G[y] - x - kd) - i(G - N_G[y] - x - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_3)i(S - m) - i(P_1)i(S - N_G[k] - m) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 5, 0, 0, 0, 0, -2, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[a] - x) &= i(G - N_G[a] - x - my) - i(G - N_G[a] - x - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(P_2)i(S) - i(S - N_G[m]) \\
&= (3, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S).
\end{aligned}$$

Sonuç olarak elde edilen denklemlerden X matrisi yukarıda verilen matris olmak üzere

$$i_{axy}(G) = X \cdot i_{klm}(S)$$

eşitliğine ulaşılır.

Ayrıca, Teorem 4.5.2'deki $G = (V, E)$ grafında $S \cong P_4$ olduğu durum düşünüldüğünde

$$i_{klm}(P_4) = [8, 3, 2, 3, 1, 2, 1, 5, 6, 5, 4, 3, 2, 2, 1, 2, 2, 3]^T \text{ olduğundan}$$

$$i_{axy}(G) = X \cdot [8, 3, 2, 3, 1, 2, 1, 5, 6, 5, 4, 3, 2, 2, 1, 2, 2, 3]^T$$

sonucu ortaya çıkmaktadır.

4.5.3. Teorem. $G = H(\tau, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (i) şıkında görülebilir). O zaman

$$Y = \begin{bmatrix} 21 & -8 & -6 & -8 & 3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -3 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -6 & -6 & -8 & 3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 15 & -5 & -6 & -6 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -8 & -4 & -6 & 2 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & -4 & -6 & -6 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -5 & -4 & -4 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -3 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & -2 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{abc}(G) = Y \cdot i_{klm}(S)$$

denklemini sağlanır.

İspat. $i_{abc}(G)$ için bu vektörün tanımı göz önüne alındığında $i(G), i(G - N_G[a]), i(G - N_G[b]), i(G - N_G[c]), \dots, i(G - N_G[c] - b), i(G - N_G[a] - b)$ değerlerinin bulunması gereklidir. $i(G) = (21, -8, -6, -8, 3, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S)$, $i(G - N_G[a]) = (5, 0, -2, -2, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S)$ Teorem 4.5.2'nin ispatından bilinmektedir. Bu iki değer haricindeki değerler kd, lx, my kenarlarının her değer için gerekli olan kombinasyonlarda S grafini naftalin molekülünden ayrılacak şekilde silinerek ve Lemma 3.1.2'de verilen rekürans bağıntıları kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned} i(G - N_G[b]) &= i(G - N_G[b] - my) - i(G - N_G[b] - N_G[m] - N_G[y]) \\ &= i(G - N_G[b] - my - kd) - i(G - N_G[b] - my - N_G[k] - N_G[d]) \\ &\quad - i(G - N_G[b] - N_G[m] - N_G[y]) \\ &= i(G - N_G[b] - my - kd) - i(G - N_G[b] - my - N_G[k] - N_G[d]) \\ &\quad - i(G - N_G[b] - N_G[m] - N_G[y] - kd) \\ &\quad + i(G - N_G[b] - N_G[m] - N_G[y] - N_G[k] - N_G[d]) \\ &= i(P_1)i(P_2)i(S) - i(P_2)i(S - N_G[k]) - i(P_1)i(S - N_G[m]) \\ &\quad + i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) \\ &= (6, -3, 0, -2, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\ i(G - N_G[c]) &= i(G - N_G[c] - kd) - i(G - N_G[c] - N_G[k] - N_G[d]) \\ &= i(P_3)i(S) - i(P_1)i(S - N_G[k]) \\ &= (5, -2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[b] - N_G[c]) &= i(G - N_G[b] - N_G[c] - kd) \\
&\quad - i(G - N_G[b] - N_G[c] - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_1)i(S) - i(S - N_G[k]) \\
&= (2, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[b] - N_G[a]) &= i(G - N_G[b] - N_G[a] - my) \\
&\quad - i(G - N_G[b] - N_G[a] - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(P_2)i(S) - i(S - N_G[m]) \\
&= (3, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[a] - N_G[b] - N_G[c]) &= i(S) \\
&= (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - c) &= i(G - c - my) - i(G - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - c - my - lx) - i(G - c - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
&\quad - i(G - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - c - my - lx - kd) - i(G - c - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - c - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - c - my - lx - kd) - i(G - c - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - c - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - c - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
&\quad + i(G - c - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(G - c - my - lx - kd) - i(G - c - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - c - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - c - N_G[m] - N_G[y] - lx - kd) \\
&\quad + i(G - c - N_G[m] - N_G[y] - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad + i(G - c - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_1)i(P_4)i(S) - i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[k]) - i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[l]) \\
&\quad - i(P_4)i(S - N_G[m]) + i(P_2)i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) \\
&\quad + i(P_2)i(S - N_G[l] - N_G[m])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (16, -6, -6, -8, 3, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - b) &= i(G - b - my) - i(G - b - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - b - my - lx) - i(G - b - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
&\quad - i(G - b - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - b - my - lx - kd) - i(G - b - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - b - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - b - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - b - my - lx - kd) - i(G - b - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - b - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - b - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
&\quad + i(G - b - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(G - b - my - lx - kd) - i(G - b - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - b - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - b - N_G[m] - N_G[y] - lx - kd) \\
&\quad + i(G - b - N_G[m] - N_G[y] - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad + i(G - b - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_2)i(P_3)i(S) - i(P_3)i(S - N_G[k]) - i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[l]) \\
&\quad - i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[m]) + i(P_1)i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) \\
&\quad + i(P_2)i(S - N_G[l] - N_G[m]) \\
&= (15, -5, -6, -6, 3, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - b - c) &= i(G - b - c - my) - i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - b - c - my - lx) - i(G - b - c - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
&\quad - i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - b - c - my - lx - kd) \\
&\quad - i(G - b - c - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - b - c - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
&= i(G - b - c - my - lx - kd) \\
&\quad - i(G - b - c - my - lx - N_G[k] - N_G[d])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i(G - b - c - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
& -i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
& +i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
& = i(G - b - c - my - lx - kd) \\
& -i(G - b - c - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
& -i(G - b - c - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
& -i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y] - lx - kd) \\
& +i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y] - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
& +i(G - b - c - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
& = i(P_1)i(P_1)i(P_2)i(S) - i(P_1)i(P_1)i(S - N_G[k]) \\
& -i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[l]) - i(P_1)i(P_2)i(S - N_G[m]) \\
& +i(P_1)i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) + i(P_2)i(S - N_G[l] - N_G[m]) \\
& = (12, -4, -6, -6, 3, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - b - a) & = i(G - b - a - my) - i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
& = i(G - b - a - my - lx) - i(G - b - a - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
& -i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
& = i(G - b - a - my - lx - kd) \\
& -i(G - b - a - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
& -i(G - b - a - my - N_G[l] - N_G[x]) - i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y]) \\
& = i(G - b - a - my - lx - kd) \\
& -i(G - b - a - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
& -i(G - b - a - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
& -i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
& +i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
& = i(G - b - a - my - lx - kd)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i(G - b - a - my - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
& -i(G - b - a - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
& -i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y] - lx - kd) \\
& +i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y] - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
& +i(G - b - a - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
& = i(P_1)i(P_3)i(S) - i(P_3)i(S - N_G[k]) \\
& -i(P_1)i(P_1)i(S - N_G[l]) - i(P_1)i(P_1)i(S - N_G[m]) \\
& +i(P_1)i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) + i(P_1)i(S - N_G[l] - N_G[m]) \\
& = (10, -5, -4, -4, 2, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[a] - c) & = i(G - N_G[a] - c - my) - i(G - N_G[a] - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
& = i(G - N_G[a] - c - my - lx) \\
& -i(G - N_G[a] - c - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
& -i(G - N_G[a] - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
& = i(G - N_G[a] - c - my - lx) \\
& -i(G - N_G[a] - c - my - N_G[l] - N_G[x]) \\
& -i(G - N_G[a] - c - N_G[m] - N_G[y] - lx) \\
& +i(G - N_G[a] - c - N_G[m] - N_G[y] - N_G[l] - N_G[x]) \\
& = i(P_1)i(P_1)i(S) - i(P_1)i(S - N_G[l]) - i(P_1)i(S - N_G[m]) \\
& +i(S - N_G[l] - N_G[m]) \\
& = (4, 0, -2, -2, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[c] - a) & = i(G - N_G[c] - a - kd) - i(G - N_G[c] - a - N_G[k] - N_G[d]) \\
& = i(P_1)i(P_1)i(S) - i(P_1)i(S - N_G[k]) \\
& = (4, -2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[b] - c) & = i(G - N_G[b] - c - my) - i(G - N_G[b] - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
& = i(G - N_G[b] - c - my - kd)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i(G - N_G[b] - c - my - N_G[k] - N_G[d]) \\
& -i(G - N_G[b] - c - N_G[m] - N_G[y]) \\
& = i(G - N_G[b] - c - my - kd) \\
& -i(G - N_G[b] - c - my - N_G[k] - N_G[d]) \\
& -i(G - N_G[b] - c - N_G[m] - N_G[y] - kd) \\
& +i(G - N_G[b] - c - N_G[m] - N_G[y] - N_G[k] - N_G[d]) \\
& = i(P_1)i(P_1)i(S) - i(P_1)i(S - N_G[k]) - i(P_1)i(S - N_G[m]) \\
& +i(S - N_G[k] - N_G[l] - N_G[m]) \\
& = (4, -2, 0, -2, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[b] - a) & = i(G - N_G[b]) \\
& = (6, -3, 0, -2, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[c] - b) & = i(G - N_G[c] - b - kd) - i(G - N_G[c] - b - N_G[k] - N_G[d]) \\
& = i(P_2)i(S) - i(S - N_G[k]) \\
& = (3, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[a] - b) & = i(S - N_G[a]) \\
& = (5, 0, -2, -2, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S).
\end{aligned}$$

Elde edilen denklemlerden Y teoremin ifadesinde verilen matris olmak üzere $i_{abc}(G) = Y \cdot i_{klm}(S)$ sonucuna varılır.

4.5.4. Teorem. $G = H(\tau, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $k, l, m \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (i) şığında görülebilir). O zaman

$$Z = \begin{bmatrix} 21 & -8 & -6 & -8 & 3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -3 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 13 & -5 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -6 & -6 & -8 & 3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 15 & -5 & -6 & -6 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & -3 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & -4 & -6 & -6 & 3 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 4 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{bcy}(G) = Z \cdot i_{klm}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. İlk olarak Teorem 4.5.2 ve Teorem 4.5.3'ün ispatlarından aşağıdaki eşitlikler mevcuttur.

$$i(G) = (21, -8, -6, -8, 3, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S)$$

$$i(G - N_G[b]) = (6, -3, 0, -2, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),$$

$$i(G - N_G[c]) = (5, -2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),$$

$$i(G - N_G[y]) = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 8, 0, 0, 0, 0, -3, 0, -3, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),$$

$$i(G - N_G[c] - N_G[b]) = (2, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),$$

$$i(G - y) = (13, -5, -3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S),$$

$$\begin{aligned}
i(G - c) &= (16, -6, -6, -8, 3, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - b) &= (15, -5, -6, -6, 3, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - c - b) &= (12, -4, -6, -6, 3, 0, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[c] - b) &= (3, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[b] - c) &= (4, -2, 0, -2, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S).
\end{aligned}$$

$i_{bcy}(G)$ vektörünün geriye kalan değerlerinin hesabı kd, lx, my kenarlarının her değer için gerekli olan formlarda S grafini naftalin molekülünden ayrılacak şekilde silinerek ve Lemma 3.1.2’de verilen rekürans bağıntıları kullanılarak şu şekilde tamamlanır:

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[c] - N_G[y]) &= i(G - N_G[c] - N_G[y] - kd) \\
&\quad - i(G - N_G[c] - N_G[y] - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_3)i(S - m) - i(P_1)i(S - N_G[k] - m) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 5, 0, 0, 0, 0, -2, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[b] - N_G[c] - N_G[y]) &= i(G - N_G[b] - N_G[c] - N_G[y] - kd) \\
&\quad - i(G - N_G[b] - N_G[c] - N_G[y] - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_1)i(S - m) - i(S - N_G[k] - m) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - c - y) &= i(G - c - y - lx) - i(G - c - y - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(G - c - y - lx - kd) - i(G - c - y - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - c - y - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_4)i(S) - i(P_2)i(S - N_G[k]) - i(P_2)i(S - N_G[l]) \\
&= (8, -3, -3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[b] - y) &= i(G - N_G[b] - y - kd) - i(G - N_G[b] - y - N_G[k] - N_G[d]) \\
&= i(P_1)i(P_1)i(S) - i(P_1)i(S - N_G[k])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (4, -2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[y] - b) &= i(G - N_G[y] - b - lx) - i(G - N_G[y] - b - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(G - N_G[y] - b - lx - kd) \\
&\quad - i(G - N_G[y] - b - lx - N_G[k] - N_G[d]) \\
&\quad - i(G - N_G[y] - b - N_G[l] - N_G[x]) \\
&= i(P_1)i(P_2)i(S - m) - i(P_1)i(S - N_G[k] - m) \\
&\quad - i(P_2)i(S - N_G[l] - m) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 6, 0, 0, 0, 0, -2, 0, -3, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[c] - y) &= i(G - N_G[c]) \\
&= (5, -2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S), \\
i(G - N_G[y] - c) &= i(G - N_G[y]) \\
&= (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 8, 0, 0, 0, 0, -3, 0, -3, 0, 0, 0) \cdot i_{klm}(S).
\end{aligned}$$

Elde edilen denklemlerden Z teoremin ifadesindeki matris olmak üzere

$$i_{bcy}(G) = Z \cdot i_{klm}(S)$$

denklemini sağlanır.

4.5.5. Sonuç. $G = H(\gamma, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $m, l, k \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (ii) şıkında görülebilir). O zaman

$$X' = \begin{bmatrix} 21 & -8 & -6 & -8 & 0 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 \\ 5 & -2 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -6 & -4 & -8 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 15 & -5 & 0 & -6 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 13 & 0 & -3 & -5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & -4 & 0 & -6 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{yxa}(G) = X' \cdot i_{mlk}(S)$$

denklemini sağlanır.

İspat. Teorem 4.5.2, 4.5.3 ve 4.5.4'ün ispatlarında $i_{yxa}(G)$ vektörünün tüm satırlarındaki değerler X, Y, Z matrislerinden biri ile $i_{klm}(S)$ vektörünün çarpımı olarak elde edildiğinden bu değerlerin düzenlenerek bir matris ile $i_{mlk}(S)$ vektörünün çarpımı formunda da yazılabileceği $i_{mlk}(S)$ ve $i_{klm}(S)$ vektörlerinin tanımından görülebilir.

Bu formda yazıldığında bu matris X' olmak üzere $i_{yxa}(G) = X' \cdot i_{mlk}(S)$ denkleminin sağlandığı görülür.

4.5.6. Sonuç. $G = H(\gamma, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $m, l, k \in V$ köşelerine sahip bir

patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (ii) şikkında görülebilir). O zaman

$$Y' = \begin{bmatrix} 21 & -8 & -6 & -8 & 0 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -2 & 0 & -3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -6 & -4 & -8 & 0 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 15 & -6 & -6 & -5 & 0 & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -8 & -6 & -6 & 0 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -4 & -4 & -5 & 0 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & -6 & -6 & -4 & 0 & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & -2 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -2 & 0 & -3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{cba}(G) = Y' \cdot i_{mlk}(S)$$

denklemini sağlar.

İspat. Teorem 4.5.2, 4.5.3 ve 4.5.4'ün ispatlarında $i_{cba}(G)$ vektörünün tüm satırlarındaki değerler X, Y, Z matrislerinden biri ile $i_{klm}(S)$ vektörünün çarpımı olarak elde edilmiştir. Bu çarpımlarların farklı bir şekilde ifade edilerek bir matris ile $i_{mlk}(S)$ vektörünün çarpımı formunda da yazılabileceği Merrifield-Simmons vektörü tanımından görülebilir. Bu formda yazıldığında bu matris Y' olmak üzere $i_{cba}(G) = Y' \cdot i_{mlk}(S)$ denkleminin sağlandığı görülür.

4.5.7. Sonuç. $G = H(\gamma, \vartheta_2, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi bir çift katlı benzenoid zincir $S = H(\vartheta_2, \vartheta_3, \dots, \vartheta_{h-1})$ grafi ve bir naftalin molekülünün $m, l, k \in V$ köşelerine sahip bir patika olan P_4 boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.4 (ii) şikkında görülebilir). O zaman

$$Z' = \begin{bmatrix} 21 & -8 & -6 & -8 & 0 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -3 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -2 & 0 & -3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 15 & -6 & -6 & -5 & 0 & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -8 & -6 & -6 & 0 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 13 & 0 & -3 & -5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & -6 & -6 & -4 & 0 & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & -3 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & -3 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & -3 & 0 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{ycb}(G) = Z' \cdot i_{mlk}(S)$$

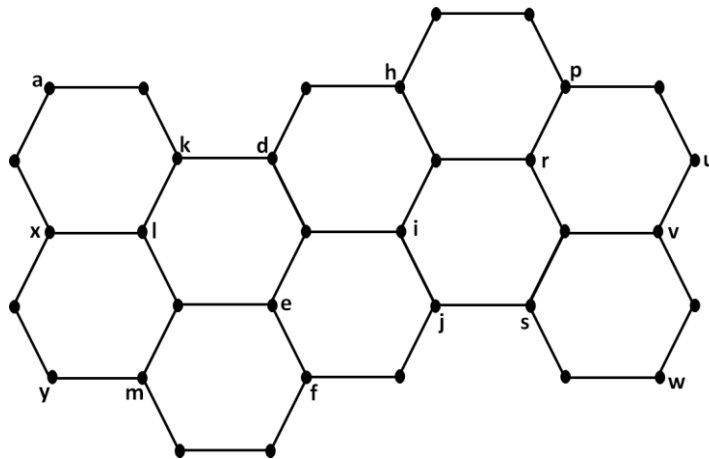
denklemini sağlar.

İspat. Teorem 4.5.2, 4.5.3 ve 4.5.4'ün ispatlarında $i_{ycb}(G)$ vektörünün her içeriğindeki değerler X, Y, Z matrislerinden biri ile $i_{klm}(S)$ vektörünün çarpımı olarak elde edildiğinden bu değerlerin düzenlenerek bir matris ile $i_{mlk}(S)$ vektörünün çarpımı formunda da yazılabileceği m, l, k köşelerini içeren P_4 patikası üzerindeki Merrifield-

Simmons vektörü tanımından gözlemlenebilir. Bu formda yazıldığında bu matris Z' olmak üzere $i_{ycb}(G) = Z' \cdot i_{mlk}(S)$ denkleminin sağlandığı görülür.

Buraya kadar olan teoremler ve sonuçlar ile önerilen metotta çift katlı benzenoid zincirlerin Merrifield-Simmons indeksinin hesabı elde edilen X, X', Y, Y', Z, Z' matrisleri ve $[8, 3, 2, 3, 1, 2, 1, 5, 6, 5, 4, 3, 2, 2, 1, 2, 2, 3]^T$ vektörünün verilen çift katlı benzenoid zincire göre uygun bir çarpımı ile yapılabilmektedir. Aşağıdaki örnekte sunulan metodun bir uygulaması gösterilmektedir.

4.5.8. Örnek. $G = H(\tau, \gamma, \gamma, \tau)$ grafi aşağıdaki şekilde verilen bir çift katlı benzenoid zincir olsun.



Şekil 4.6. Çift katlı benzenoid zincir $G = H(\tau, \gamma, \gamma, \tau)$

$G = H(\tau, \gamma, \gamma, \tau)$ çift katlı benzenoid zincirinin Merrifield-Simmons indeksi önerilen metot kullanılarak $S^I, S^{II}, S^{III}, S^{IV}, S^V$ karşılık gelen alt graflar olmak üzere aşağıdaki şekilde hesaplanabilir:

$$\begin{aligned} i_{axy}(G) &= X \cdot i_{klm}(S^I) = X \cdot Z' \cdot i_{def}(S^{II}) = X \cdot Z' \cdot Y' \cdot i_{hij}(S^{III}) \\ &= X \cdot Z' \cdot Y' \cdot Z \cdot i_{prs}(S^{IV}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= X \cdot Z' \cdot Y' \cdot Z \cdot Y \cdot i_{uvw}(S^V) \\
&= X \cdot Z' \cdot Y' \cdot Z \cdot Y \cdot i_{uvw}(P_4).
\end{aligned}$$

Bu denklemde $i_{uvw}(P_4)$ ifadesi yerine yazılarak

$$i_{axy}(H(\tau, \gamma, \gamma, \tau)) = X \cdot Z' \cdot Y' \cdot Z \cdot Y \cdot [8, 3, 2, 3, 1, 2, 1, 5, 6, 5, 4, 3, 2, 2, 1, 2, 2, 3]^T$$

denkleme ulaşılır.

Sonuç olarak

$$\begin{aligned}
i_{axy}(G = H(\tau, \gamma, \gamma, \tau)) &= [5967989, 1555736, 1253034, 1733170, 526867, 485079, \\
&204036, 4234819, 4714955, 4412253, 3508652, 3644298, 1076343, 1253777, 7261 \\
&67, 767955, 1206303, 1070657]^T
\end{aligned}$$

ifadesi elde edilir.

Bu eşitlikten $i(G) = 5967989$ başta olmak üzere

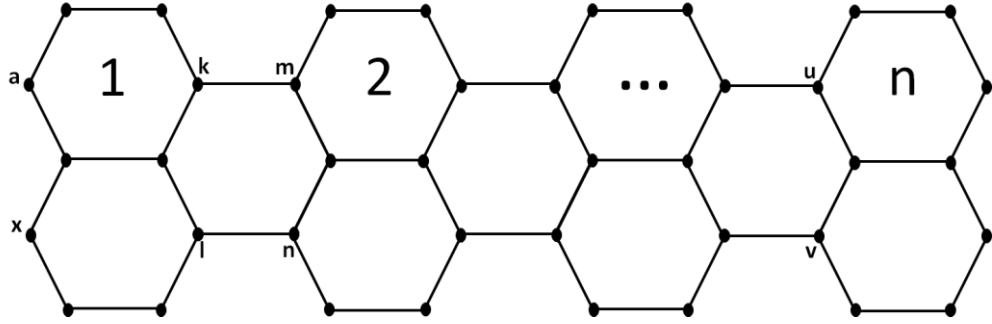
$$\begin{aligned}
i(G - N_G[a]) &= 1555736, i(G - N_G[x]) = 1253034, i(G - N_G[y]) = 1733170 \\
, \dots, i(G - N_G[y] - x) &= 1206303, i(G - N_G[a] - x) = 1070657
\end{aligned}$$

değerleri de elde edilmektedir.

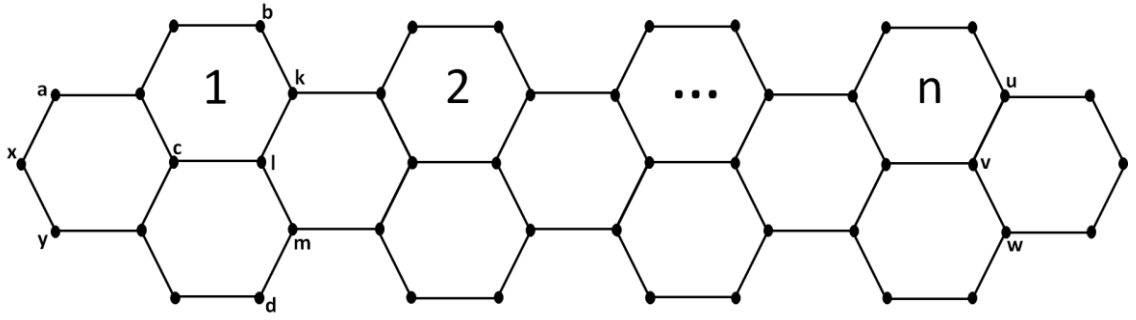
4.6. Bazı Özel Tipteki İç Noktalı-Yoğunlaştırılmış Benzenoid Sistemlerin Hosoya ve Merrifield-Simmons İndekslerinin Hesaplanması

Bu bölümde Gutman ve ark. (1989) tarafından Hosoya indekslerinin hesabına yönelik indirgeme bağıntıları verilmiş olan iki özel tipteki iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem türünün Hosoya ve Merrifield-Simmons indekslerinin hesaplarını matris ve vektör çarpımları yoluyla hesaplayan metotlar önerilecektir. Bu metotlarda kullanılmak üzere önceki bölümlerde tanımlanan vektörlerin uyarlamaları olan yeni vektörler tanımlanarak teoremler ve ispatlar bu vektörler üzerinden inşa edilecektir.

Gutman ve ark. (1989) tarafından yapılan çalışmada R_n ve P_n adlarıyla kullanılan iki özel tipte iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem örneği aşağıdaki şekillerde gösterilmektedir.

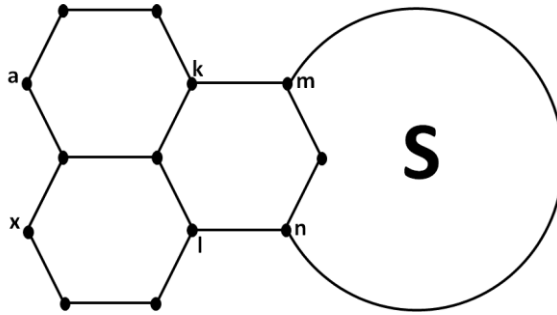


Şekil 4.7. İç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem R_n

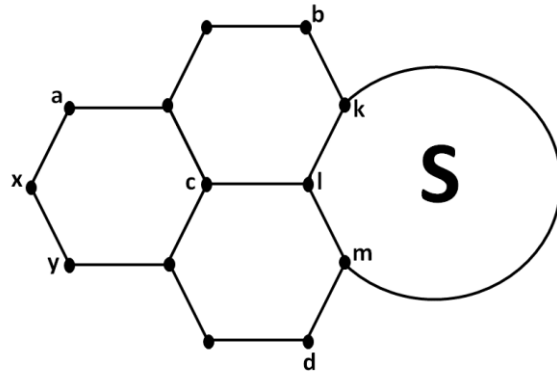


Şekil 4.8. İç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem P_n

Aşağıdaki iki şekilde bu bölüm boyunca sunulacak olan teoremler ve sonuçların görselleştirilmesinde kullanılacak olan R_n ve P_n sistemlerinin graf modeli verilmektedir.



Şekil 4.9. R_n sisteminin graf yapısı



Şekil 4.10. P_n sisteminin graf yapısı

Bir sonraki tanımda Bölüm 4.4'te $j = 4$ veya $j = 5$ için P_j üzerinde tanımlanan genelleştirilmiş Hosoya vektörünün bir uyarlaması olacak şekilde bir P_3 patikası üzerinde bir vektör 3-Hosoya vektörü adıyla tanımlanacaktır.

4.6.1. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. $a, x \in V$ köşelerini uç köşeler olarak içeren bir P_3 patikası üzerindeki 3-Hosoya vektörü

$$Z_{ax}(G) = \begin{bmatrix} Z(G) \\ Z(G - a) \\ Z(G - x) \\ Z(G - a - x) \end{bmatrix}$$

olarak tanımlanır (Oz ve Cangul 2021).

4.6.2. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafı ve üç tane hekzagona sahip bir iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin $m, n \in V$ uç köşelerine sahip bir P_3 patikası boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.9'da görülebilir). O halde

$$A = \begin{bmatrix} 148 & 70 & 70 & 30 \\ 70 & 36 & 34 & 16 \\ 70 & 34 & 36 & 16 \\ 30 & 16 & 16 & 8 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$Z_{ax}(G) = A \cdot Z_{mn}(S)$$

denklemini sağlanır (Oz ve Cangul 2021).

İspat. $Z_{ax}(G)$ tanımı gereği $Z(G), Z(G-a), Z(G-x), Z(G-a-x)$ değerlerinin hesaplanması gereklidir. Bu değerler $mk, nl \in E$ kenarları silinerek ve Lemma 3.1.1 kullanılarak şu şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned} Z(G) &= Z(G - mk - nl) + Z(G - mk - n - l) \\ &\quad + Z(G - m - k - nl) + Z(G - m - k - n - l) \\ &= 148Z(S) + 70Z(S - n) + 70Z(S - m) + 30Z(S - m - n) \\ &= (148, 70, 70, 30) \cdot Z_{mn}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G - a) &= Z(G - a - mk - nl) + Z(G - a - mk - n - l) \\ &\quad + Z(G - a - m - k - nl) + Z(G - a - m - k - n - l) \\ &= 70Z(S) + 34Z(S - n) + 36Z(S - m) + 16Z(S - m - n) \\ &= (70, 36, 34, 16) \cdot Z_{mn}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G - x) &= Z(G - x - mk - nl) + Z(G - x - mk - n - l) \\ &\quad + Z(G - x - m - k - nl) + Z(G - x - m - k - n - l) \\ &= 70Z(S) + 36Z(S - n) + 34Z(S - m) + 16Z(S - m - n) \\ &= (70, 34, 36, 16) \cdot Z_{mn}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G - a - x) &= Z(G - a - x - mk - nl) + Z(G - a - x - mk - n - l) \\ &\quad + Z(G - a - x - m - k - nl) + Z(G - a - x - m - k - n - l) \\ &= 30Z(S) + 16Z(S - n) + 16Z(S - m) + 8Z(S - m - n) \\ &= (30, 16, 16, 8) \cdot Z_{mn}(S). \end{aligned}$$

Bu denklemlerden $A = \begin{bmatrix} 148 & 70 & 70 & 30 \\ 70 & 36 & 34 & 16 \\ 70 & 34 & 36 & 16 \\ 30 & 16 & 16 & 8 \end{bmatrix}$ olmak üzere $Z_{ax}(G) = A \cdot Z_{mn}(S)$

eşitliğine varılır.

4.6.3. Sonuç. Şekil 4.7’de verilen n tane naftalin molekülüne sahip iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem R_n için

$$Z_{ax}(R_n) = A^{n-1} \cdot [148, 70, 70, 30]^T$$

denklemini sağlanır (Oz ve Cangul 2021).

İspat. Teorem 4.6.2’den $Z_{ax}(G) = A \cdot Z_{mn}(S)$ denklemi mevcuttur. Bu denklemde $G = R_n$ alınırsa $Z_{ax}(R_n) = A \cdot Z_{mn}(R_{n-1})$ elde edilir. Devamında $Z_{mn}(R_{n-1})$ için Teorem 4.6.2 uygulanır ve bu şekilde toplamda $(n - 1)$ defa olacak şekilde ingirdeme yapılır ise S^I sistemin en sonuncu naftalin molekülü olmak üzere $Z_{ax}(R_n) = A^{n-1} \cdot Z_{uv}(S^I)$ denkleminde ulaşılır. S^I naftalin molekülü olduğundan $Z_{uv}(S^I) = [148, 70, 70, 30]^T$ olarak hesaplandığında istenen sonuç elde edilir.

Aşağıdaki tanımda Bölüm 4.4’te $j = 4$ veya $j = 5$ için P_j üzerinde tanımlanan genelleştirilmiş Hosoya vektörünün bir diğer uyarlaması olacak şekilde bir P_3 patikası üzerinde bir vektör genelleştirilmiş 3-Hosoya vektörü adıyla tanımlanacaktır.

4.6.4. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. $a, x, y \in V$ köşelerine sahip olan bir P_3 patikası üzerindeki genelleştirilmiş 3-Hosoya vektörü

$$Z_{axy}(G) = \begin{bmatrix} Z(G) \\ Z(G - a) \\ Z(G - x) \\ Z(G - y) \\ Z(G - a - x) \\ Z(G - x - y) \\ Z(G - a - y) \\ Z(G - a - x - y) \end{bmatrix}$$

olarak tanımlanır (Oz ve Cangul 2021).

4.6.5. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafı ve üç tane hekzagona sahip bir iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin $k, l, m \in V$ köşelerinden oluşan bir P_3 patikası boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.10'da görülebilir). O halde

$$B = \begin{bmatrix} 107 & 63 & 55 & 63 & 34 & 34 & 37 & 21 \\ 52 & 32 & 24 & 31 & 16 & 15 & 19 & 10 \\ 45 & 26 & 25 & 26 & 15 & 15 & 15 & 9 \\ 52 & 31 & 24 & 32 & 15 & 16 & 19 & 10 \\ 31 & 19 & 15 & 18 & 10 & 9 & 11 & 6 \\ 31 & 18 & 15 & 19 & 9 & 10 & 11 & 6 \\ 21 & 13 & 9 & 13 & 6 & 6 & 8 & 4 \\ 21 & 13 & 9 & 13 & 6 & 6 & 8 & 4 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$Z_{axy}(G) = B \cdot Z_{klm}(S)$$

denklemini sağlanır (Oz ve Cangul 2021).

İspat. Tanım 4.6.4'ten $Z(G), Z(G - a), Z(G - x), Z(G - y), Z(G - a - x), Z(G - x - y), Z(G - a - y), Z(G - a - x - y)$ değerlerinin hesaplanması gereklidir. Bu değerler md, lc, kb kenarları silinerek ve Lemma 3.1.1 kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned} Z(G) &= Z(G - md - lc - kb) + Z(G - md - lc - k - b) \\ &\quad + Z(G - md - l - c - kb) + Z(G - md - l - c - k - b) \\ &\quad + Z(G - m - d - lc - kb) + Z(G - m - d - lc - k - b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +Z(G - m - d - l - c - kb) + Z(G - m - d - l - c - k - b) \\
& = 107Z(S) + 63Z(S - k) + 55Z(S - l) + 34Z(S - k - l) \\
& + 63Z(S - m) + 37Z(S - k - m) + 34Z(S - l - m) + 21Z\left(\begin{smallmatrix} S - k \\ l - m \end{smallmatrix}\right) \\
& = (107, 63, 55, 63, 34, 34, 37, 21) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a) &= Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - md \\ lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - md \\ -lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - md \\ -l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - md \\ -l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - m \\ -d - lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - m \\ -d - lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - m \\ -d - l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - m \\ -d - l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& = 52Z(S) + 32Z(S - k) + 24Z(S - l) + 16Z(S - k - l) \\
& + 31Z(S - m) + 19Z(S - k - m) + 15Z(S - l - m) + 10Z\left(\begin{smallmatrix} S - k \\ l - m \end{smallmatrix}\right) \\
& = (52, 32, 24, 31, 16, 15, 19, 10) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - x) &= Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - md \\ lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - md \\ -lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& + Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - md \\ -l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - md \\ -l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& + Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - m \\ -d - lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - m \\ -d - lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& + Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - m \\ -d - l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - x - m \\ -d - l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& = 45Z(S) + 26Z(S - k) + 25Z(S - l) + 15Z(S - k - l) \\
& + 26Z(S - m) + 15Z(S - k - m) + 15Z(S - l - m) + 9Z\left(\begin{smallmatrix} S - k \\ l - m \end{smallmatrix}\right) \\
& = (45, 26, 25, 26, 15, 15, 15, 9) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - y) &= Z\left(\begin{smallmatrix} G - y - md \\ lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - y - md \\ -lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
& + Z\left(\begin{smallmatrix} G - y - md \\ -l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - y - md \\ -l - c - k - b \end{smallmatrix}\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-y-m \\ -d-lc-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-y-m \\ -d-lc-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-y-m \\ -d-l-c-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-y-m \\ -d-l-c-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& = 52Z(S) + 31Z(S-k) + 24Z(S-l) + 15Z(S-k-l) \\
& + 32Z(S-m) + 19Z(S-k-m) + 16Z(S-l-m) + 10Z\left(\begin{smallmatrix} S-k \\ l-m \end{smallmatrix}\right) \\
& = (52, 31, 24, 32, 15, 16, 19, 10) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G-a-x) &= Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x \\ -md-lc-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x-md \\ -lc-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x-md \\ -l-c-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x-md \\ -l-c-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x-m \\ -d-lc-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x-m \\ -d-lc-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x-m \\ -d-l-c-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-a-x-m \\ -d-l-c-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& = 31Z(S) + 19Z(S-k) + 15Z(S-l) + 10Z(S-k-l) \\
& + 18Z(S-m) + 11Z(S-k-m) + 9Z(S-l-m) + 6Z\left(\begin{smallmatrix} S-k \\ l-m \end{smallmatrix}\right) \\
& = (31, 19, 15, 18, 10, 9, 11, 6) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G-x-y) &= Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y \\ -md-lc-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y-md \\ -lc-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y-md \\ -l-c-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y-md \\ -l-c-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y-m \\ -d-lc-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y-m \\ -d-lc-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& +Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y-m \\ -d-l-c-kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G-x-y-m \\ -d-l-c-k-b \end{smallmatrix}\right) \\
& = 31Z(S) + 18Z(S-k) + 15Z(S-l) + 9Z(S-k-l) \\
& + 19Z(S-m) + 11Z(S-k-m) + 10Z(S-l-m) + 6Z\left(\begin{smallmatrix} S-k \\ l-m \end{smallmatrix}\right) \\
& = (31, 18, 15, 19, 9, 10, 11, 6) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a - y) &= Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y \\ -md - lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y - md \\ -lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&+ Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y - md \\ -l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y - md \\ -l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&+ Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y - m \\ -d - lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y - m \\ -d - lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&+ Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y - m \\ -d - l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - y - m \\ -d - l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&= 21Z(S) + 13Z(S - k) + 9Z(S - l) + 6Z(S - k - l) \\
&+ 13Z(S - m) + 8Z(S - k - m) + 6Z(S - l - m) + 4Z\left(\begin{smallmatrix} S - k \\ l - m \end{smallmatrix}\right) \\
&= (21, 13, 9, 13, 6, 6, 8, 4) \cdot Z_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(G - a - x - y) &= Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y \\ -md - lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y \\ -md - lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&+ Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y \\ -md - l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y - md \\ -l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&+ Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y - m \\ -d - lc - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y - m \\ -d - lc - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&+ Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y - m \\ -d - l - c - kb \end{smallmatrix}\right) + Z\left(\begin{smallmatrix} G - a - x - y - m \\ -d - l - c - k - b \end{smallmatrix}\right) \\
&= 21Z(S) + 13Z(S - k) + 9Z(S - l) + 6Z(S - k - l) \\
&+ 13Z(S - m) + 8Z(S - k - m) + 6Z(S - l - m) \\
&+ 4Z\left(\begin{smallmatrix} S - k \\ l - m \end{smallmatrix}\right) \\
&= (21, 13, 9, 13, 6, 6, 8, 4) \cdot Z_{klm}(S).
\end{aligned}$$

Elde edilen denklemlerden B yukarıda verilen matris olmak üzere

$$Z_{axy}(G) = B \cdot Z_{klm}(S)$$

ifadesine ulaşılır (Oz ve Cangul 2021).

4.6.6. Sonuç. Şekil 4.8’de verilen n tane naftalin molekülüne sahip iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistem $\mathbf{P}_n$ için

$$Z_{axy}(\mathbf{P}_n) = B^n \cdot [18, 8, 8, 8, 5, 5, 3, 3]^T$$

denklemini sağlanır (Oz ve Cangul 2021).

İspat. Teorem 4.6.5’ten $Z_{axy}(G) = B \cdot Z_{klm}(S)$ denklemini sağlanır. Bu denklemde G yerine $\mathbf{P}_n$ alındığında $Z_{axy}(\mathbf{P}_n) = B \cdot Z_{klm}(\mathbf{P}_{n-1})$ elde edilir. Bu şekilde $Z_{klm}(\mathbf{P}_{n-1})$ için Teorem 4.6.5 tekrar uygulandığında ve ardından elde edilen denklem için uygulanarak bu şekilde devam ederek toplamda n defa olacak şekilde ingirdeme yapıldığında S^I , $\mathbf{P}_n$ sisteminin en sonuncu hekzagonu (benzeni) olmak üzere $Z_{axy}(\mathbf{P}_n) = B^n \cdot Z_{uvw}(S^I)$ denkleminde ulaşılır. S^I bir hekzagon (benzen) olduğundan $Z_{uv}(S^I) = [18, 8, 8, 8, 5, 5, 3, 3]^T$ olarak açıktır. Sonuç olarak $Z_{axy}(\mathbf{P}_n) = B^n \cdot [18, 8, 8, 8, 5, 5, 3, 3]^T$ denklemini ispatlanmış olur.

Bölümün ilk kısmında 3-Hosoya vektörü tanımlanarak R_n sisteminin Hosoya indeksinin hesabı için açık bir fonksiyon elde edilmişti. Şimdi ise Bölüm 4.5’te $j = 4$ veya $j = 5$ için P_j üzerinde tanımlanan Merrifield-Simmons vektörünün bir uyarlamasını teşkil edecek şekilde bir P_3 patikası üzerinde bir vektör 3-Merrifield-Simmons vektörü adıyla tanımlanacaktır.

4.6.7. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. $a, x \in V$ köşelerini uç köşeler olarak içeren bir P_3 patikası üzerindeki 3-Merrifield-Simmons vektörü

$$i_{ax}(G) = \begin{bmatrix} i(G) \\ i(G - N_G[a]) \\ i(G - N_G[x]) \\ i(G - N_G[a] - N_G[x]) \end{bmatrix}$$

olarak tanımlanır (Oz ve Cangul 2021).

4.6.8. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve üç tane hekzagona sahip bir iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin $m, n \in V$ uç köşelerine sahip bir P_3 patikası boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.9’da görülebilir). O halde

$$C = \begin{bmatrix} 114 & -34 & -34 & 13 \\ 34 & -8 & -9 & 3 \\ 34 & -9 & -8 & 3 \\ 13 & -3 & -3 & 1 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{ax}(G) = C \cdot i_{mn}(S)$$

denklemini sağlanır (Oz ve Cangul 2021).

İspat. $i_{ax}(G)$ vektörünün tanımı gereği $i(G), i(G - N_G[a]), i(G - N_G[x]), i(G - N_G[a] - N_G[x])$ değerlerinin bir vektör ile $i_{mn}(S)$ vektörünün çarpımı şeklinde yazılması gereklidir. Bu formda bir yazım elde etmek için mk ve nl kenarları G grafindan silinerek ve Lemma 3.1.2 kullanılarak aşağıdaki denklemler elde edilir:

$$\begin{aligned} i(G) &= i(G - mk - nl) - i(G - mk - N_G[n] - N_G[l]) \\ &\quad - i(G - N_G[m] - N_G[k] - nl) + i(G - N_G[m] - N_G[k] - N_G[n] - N_G[l]) \end{aligned}$$

$$= 114i(S) - 34i(S - N_G[n]) - 34i(S - N_G[m]) + 13i \begin{pmatrix} S - N_G[m] \\ -N_G[n] \end{pmatrix}$$

$$= (114, -34, -34, 13) \cdot i_{mn}(S),$$

$$\begin{aligned} i(G - N_G[a]) &= i(G - N_G[a] - mk - nl) - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - mk \\ -N_G[n] - N_G[l] \end{pmatrix} \\ &\quad - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[m] \\ -N_G[k] - nl \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[m] \\ -N_G[k] - N_G[n] - N_G[l] \end{pmatrix} \\ &= 34i(S) - 9i(S - N_G[n]) - 8i(S - N_G[m]) + 3i \begin{pmatrix} S - N_G[m] \\ -N_G[n] \end{pmatrix} \\ &= (34, -8, -9, 3) \cdot i_{mn}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i(G - N_G[x]) &= i(G - N_G[x] - mk - nl) - i \begin{pmatrix} G - N_G[x] - mk \\ -N_G[n] - N_G[l] \end{pmatrix} \\ &\quad - i \begin{pmatrix} G - N_G[x] - N_G[m] \\ -N_G[k] - nl \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} G - N_G[x] - N_G[m] \\ -N_G[k] - N_G[n] - N_G[l] \end{pmatrix} \\ &= 34i(S) - 8i(S - N_G[n]) - 9i(S - N_G[m]) + 3i \begin{pmatrix} S - N_G[m] \\ -N_G[n] \end{pmatrix} \\ &= (34, -9, -8, 3) \cdot i_{mn}(S), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i \begin{pmatrix} G - N_G[a] \\ -N_G[x] \end{pmatrix} &= i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[x] \\ -mk - nl \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[x] \\ -mk - N_G[n] - N_G[l] \end{pmatrix} \\ &\quad - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[x] \\ -N_G[m] - N_G[k] - nl \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[x] - N_G[m] \\ -N_G[k] - N_G[n] - N_G[l] \end{pmatrix} \\ &= 13i(S) - 3i(S - N_G[n]) - 3i(S - N_G[m]) + i \begin{pmatrix} S - N_G[m] \\ -N_G[n] \end{pmatrix} \\ &= (13, -3, -3, 1) \cdot i_{mn}(S). \end{aligned}$$

Sonuç olarak $C = \begin{bmatrix} 114 & -34 & -34 & 13 \\ 34 & -8 & -9 & 3 \\ 34 & -9 & -8 & 3 \\ 13 & -3 & -3 & 1 \end{bmatrix}$ olmak üzere $i_{ax}(G) = C \cdot i_{mn}(S)$

sonucuna ulaşılır.

4.6.9. Sonuç. Şekil 4.7’de verilen n tane naftalin molekülüne sahip olan R_n sistemi için

$$i_{ax}(R_n) = C^{n-1} \cdot [114, 34, 34, 13]^T$$

denklemini sağlanır (Oz ve Cangul 2021).

İspat. Teorem 4.6.8’den $i_{ax}(G) = C \cdot i_{mn}(S)$ denklemini mevcuttur. Dolayısıyla Şekil 4.7’de verilen R_n için $i_{ax}(R_n) = C \cdot i_{mn}(R_{n-1})$ eşitliğine ulaşılır. $i_{mn}(R_{n-1})$ için Teorem 4.6.8 uygulanarak bu şekilde toplamda $n - 1$ defa olacak şekilde ingirdeme yapıldığında S^I sistemin en sonuncu naftalin molekülü olmak üzere $i_{ax}(R_n) = C^{n-1} \cdot i_{uv}(S^I)$ denklemini elde edilir. S^I naftalin olduğundan $i_{uv}(S^I) = [114, 34, 34, 13]^T$ olduğu açıktır. Buradan $i_{ax}(R_n) = C^{n-1} \cdot [114, 34, 34, 13]^T$ denklemini elde edilir.

Tanım 4.6.4’te genelleştirilmiş 3-Hosoya vektörü tanımlanarak P_n sisteminin Hosoya indeksinin hesabı için açık bir fonksiyon elde edilmişti. Bu sonucun devamı niteliğinde P_n sisteminin Merrifield-Simmons indeksinin hesabı için açık bir fonksiyon elde etme amacıyla Bölüm 4.5’te $j = 4$ veya $j = 5$ için P_j üzerinde tanımlanan Merrifield-Simmons vektörünün bir diğer uyarlamasını oluşturacak biçimde bir P_3 patika grafi üzerinde bir vektör genelleştirilmiş 3-Merrifield-Simmons vektörü adıyla aşağıdaki şekilde tanımlanacaktır.

4.6.10. Tanım. $G = (V, E)$ bir graf olsun. $a, x, y \in V$ köşelerine sahip bir P_3 patikası üzerindeki genelleştirilmiş 3-Merrifield-Simmons vektörü

$$i_{axy}(G) = \begin{bmatrix} i(G) \\ i(G - N_G[a]) \\ i(G - N_G[x]) \\ i(G - N_G[y]) \\ i(G - N_G[a] - N_G[y]) \end{bmatrix}$$

olarak tanımlanır (Oz ve Cangul 2021).

4.6.11. Teorem. $G = (V, E)$ bir S grafi ve üç tane hekzagona sahip bir iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin $k, l, m \in V$ köşelerinden oluşan bir P_3 patikası boyunca kaynaşması ile oluşan bir graf olsun (Şekil 4.10’da görülebilir). O halde

$$D = \begin{bmatrix} 134 & -49 & -45 & -49 & 18 \\ 42 & -14 & -18 & -15 & 5 \\ 34 & -13 & -9 & -13 & 5 \\ 42 & -15 & -18 & -14 & 5 \\ 18 & -6 & -9 & -6 & 2 \end{bmatrix}$$

olmak üzere

$$i_{axy}(G) = D \cdot i_{klm}(S)$$

denklemini sağlar (Oz ve Cangul 2021).

İspat. Verilen G grafında $a, x, y \in V$ köşelerinden oluşan bir P_3 patikası üzerindeki genelleştirilmiş 3-Merrifield-Simmons vektörü tanımından hareket edilerek $i(G), i(G - N_G[a]), i(G - N_G[x]), i(G - N_G[y])$ ve $i(G - N_G[a] - N_G[y])$ değerlerinin bir vektör ile $i_{klm}(S)$ vektörünün çarpımı şeklinde yazılması durumunda ispat tamamlanacaktır. Bu amaç doğrultusunda G grafından md, lc ve kb kenarlarının silinerek ve denklemler arasındaki geçişlerde de Lemma 3.1.2 kullanılarak istenilen sonuca aşağıdaki şekilde varılabilir:

$$\begin{aligned} i(G) &= i(G - md - lc - kb) - i(G - md - lc - N_G[k] - N_G[b]) \\ &\quad - i(G - md - N_G[l] - N_G[c]) - i(G - N_G[m] - N_G[d] - kb) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +i(G - N_G[m] - N_G[d] - N_G[k] - N_G[b]) \\
& = 134i(S) - 49i(S - N_G[k]) - 45i(S - N_G[l]) - 49i(S - N_G[m]) \\
& + 18i(S - N_G[k] - N_G[m]) \\
& = (134, -49, -45, -49, 18) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[a]) &= i(G - N_G[a] - md - lc - kb) - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - md \\ -lc - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - md \\ -N_G[l] - N_G[c] \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[m] \\ -N_G[d] - kb \end{pmatrix} \\
& + i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[m] \\ -N_G[d] - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& = 42i(S) - 14i(S - N_G[k]) - 18i(S - N_G[l]) \\
& - 15i(S - N_G[m]) + 5i(S - N_G[k] - N_G[m]) \\
& = (42, -14, -18, -15, 5) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[x]) &= i(G - N_G[x] - md - lc - kb) - i \begin{pmatrix} G - N_G[x] - md \\ -lc - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& - i \begin{pmatrix} G - N_G[x] - md \\ -N_G[l] - N_G[c] \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} G - N_G[x] - N_G[m] \\ -N_G[d] - kb \end{pmatrix} \\
& + i \begin{pmatrix} G - N_G[x] - N_G[m] \\ -N_G[d] - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& = 34i(S) - 13i(S - N_G[k]) - 9i(S - N_G[l]) \\
& - 13i(S - N_G[m]) + 5i(S - N_G[k] - N_G[m]) \\
& = (34, -13, -9, -13, 5) \cdot i_{klm}(S),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i(G - N_G[y]) &= i(G - N_G[y] - md - lc - kb) - i \begin{pmatrix} G - N_G[y] - md \\ -lc - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& - i \begin{pmatrix} G - N_G[y] - md \\ -N_G[l] - N_G[c] \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} G - N_G[y] - N_G[m] \\ -N_G[d] - kb \end{pmatrix} \\
& + i \begin{pmatrix} G - N_G[y] - N_G[m] \\ -N_G[d] - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& = 42i(S) - 15i(S - N_G[k]) - 18i(S - N_G[l])
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -14i(S - N_G[m]) + 5i(S - N_G[k] - N_G[m]) \\
& = (42, -15, -18, -14, 5) \cdot i_{klm}(S), \\
& i \begin{pmatrix} G - N_G[a] \\ -N_G[y] \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[y] \\ -md - lc - kb \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[y] - md \\ -lc - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& \quad - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[y] \\ -md - N_G[l] - N_G[c] \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[y] \\ -N_G[m] - N_G[d] - kb \end{pmatrix} \\
& \quad + i \begin{pmatrix} G - N_G[a] - N_G[y] - N_G[m] \\ -N_G[d] - N_G[k] - N_G[b] \end{pmatrix} \\
& = 18i(S) - 6i(S - N_G[k]) - 9i(S - N_G[l]) \\
& \quad - 6i(S - N_G[m]) + 2i(S - N_G[k] - N_G[m]) \\
& = (18, -6, -9, -6, 2) \cdot i_{klm}(S).
\end{aligned}$$

Elde edilen denklemlerin sonucu olarak $D = \begin{bmatrix} 134 & -49 & -45 & -49 & 18 \\ 42 & -14 & -18 & -15 & 5 \\ 34 & -13 & -9 & -13 & 5 \\ 42 & -15 & -18 & -14 & 5 \\ 18 & -6 & -9 & -6 & 2 \end{bmatrix}$ olmak

üzere $i_{axy}(G) = D \cdot i_{klm}(S)$ sonucuna ulaşılır.

4.6.12. Sonuç. Şekil 4.8’de verilen n tane naftalin molekülüne sahip olan $\mathbf{P}_n$ sistemi için

$$i_{axy}(\mathbf{P}_n) = D^n \cdot [18, 5, 5, 5, 2]^T$$

denklemini sağlanır (Oz ve Cangul 2021).

İspat. Teorem 4.6.11’den $i_{axy}(G) = D \cdot i_{klm}(S)$ eşitliği mevcuttur. Bu denklemde G grafi yerine Şekil 4.8’de verilen $\mathbf{P}_n$ yazıldığında $i_{axy}(\mathbf{P}_n) = D \cdot i_{klm}(\mathbf{P}_{n-1})$ eşitliğine varılır. $i_{klm}(\mathbf{P}_{n-1})$ için Teorem 4.6.11 tekrar uygulandığında ve eşitliğin sağ tarafında bu şekilde indirgemeler yaparak ulaşılan her denklemde de yeni elde edilen genelleştirilmiş

3 -Merrifield-Simmons vektörü için bu doğrultuda devam ederek toplamda n defa ingirdeme yapıldığında S^I en sonuncu hekzagon (benzen) olmak üzere $i_{axy}(\mathbf{P}_n) = D^n \cdot i_{uvw}(S^I)$ denklemi elde edilir. Gelineen noktada S^I hekzagon (benzen) olduğundan $i_{uvw}(S^I) = [18, 5, 5, 5, 2]^T$ eşitliğinin olduğu açıktır. Sonuç olarak $i_{axy}(\mathbf{P}_n) = D^n \cdot [18, 5, 5, 5, 2]^T$ denklemi elde edilir.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin $\forall k \geq 0$ değeri için $m(G, k)$ değerini tanımlanan yeni bir vektör yardımıyla $4(k + 1) \times 4(k + 1)$ boyutlu matrislerin ve $4(k + 1) \times 1$ boyutlu bir vektörün seçilen uygun bir çarpımına dayanarak hesaplayabilen bir metot önerilmiştir. Ayrıca, bu metodun kolay bir şekilde uygulanabilmesini sağlayan MATLAB algoritmaları sunulmuştur. Ayrıca iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin $\forall k \geq 0$ değeri için $n(G, k)$ değerini tanımlanan bir başka yeni vektör sayesinde $5(k + 1) \times 5(k + 1)$ boyutlu matrislerin ve $5(k + 1) \times 1$ boyutlu bir vektörün seçilen uygun bir çarpımı yoluyla hesaplayabilen bir metot önerilmiştir. Ek olarak, bu metodun basit şekilde uygulanabilmesini sağlayan MATLAB algoritmaları sunulmuştur. Bu sonuçların devamı niteliğinde, iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlerin Merrifield-Simmons indeksinin hesabına yönelik yeni bir vektör tanımlanarak 5×5 boyutlu matrislerin ve 5×1 boyutlu bir vektörün uygun bir formda çarpımına dayanan bir metot sunulmuştur. Sonrasında, iç noktasız-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemler daha kapsamlı yapılar olan iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemlere genişletilerek bu sistemlerin önemli bir türü olan çift katlı benzenoid zincirlerin Hosoya indeksi ve Merrifield-Simmons indeksinin hesabı için vektörler tanımlanmıştır. Bu vektörler yardımıyla verilen her çift katlı benzenoid zincirin hem Hosoya hem de Merrifield-Simmons indeksinin hesabını sırasıyla 8×8 boyutlu matrisler ile 8×1 boyutlu bir vektörün ve 18×18 boyutlu matrisler ile 18×1 boyutlu bir vektörün seçilen uygun bir çarpımı yoluyla gerçekleştiren metotlar sunulmuştur. Son olarak R_n ve P_n adlarıyla tanımlanarak literatürde halihazırda mevcut bulunan iki özel tipteki iç noktalı-yoğunlaştırılmış benzenoid sistemin Hosoya ve Merrifield-Simmons indekslerinin hesabı için elde edilen matrislerin ve bir vektörün çarpımını içeren ayrı ayrı metotlar sunulmuştur.

Elde edilen bu sonuçların devamı olarak, benzenoid sistemler üzerinde bu tez çalışması kapsamında gerçekleştirilen çalışmalar üçgensel zincirlere, dörtgensel zincirler olan polyominolara, beşgen zincirlere hatta k -poligonal zincirlere genişletilerek çalışılabilir.

Ayrıca bu zincir yapıları iç noktasız-yoğunlaştırılmış ve iç noktalı-yoğunlaştırılmış üçgensel, dörtgensel, beşgensel veya k -poligonal sistemlere genişletilebilir.

KAYNAKLAR

- Balaban, A. T. 1976.** Chemical applications of graph theory. Academic Press, London, 389 pp.
- Barnett, J. H. 2009.** Early writings on graph theory: Hamiltonian Circuits and the Icosian Game: Resources for Teaching Discrete Mathematics: Classroom Projects, History Modules, and Articles, Editörler: Hopkins B., Mathematical Association of America, s. 217-223.
- Bell, M. V. 2015.** Polya's Enumeration Theorem and Its Applications. *Master Thesis*, University of Helsinki, Department of Mathematics and Statistics, Helsinki.
- Bollobas, B. 2004.** Extremal Graph Theory. Courier Corporation, New York, 488 pp.
- Bonchev, D. 1991.** Chemical Graph Theory: Introduction and Fundamentals, CRC Press, London, 300 pp.
- Bonchev, D. D., Mekenyan O. G. 2012.** Graph Theoretical Approaches to Chemical Reactivity, Springer, Dordrecht, 283 pp.
- Bondy, J. A., Murty, U. S. R. 1976.** Graph Theory with Applications, London:Macmillan, North-Holland, 264 pp.
- Cao, Y., Zhang, F. 2008.** Extremal polygonal chains on k-matchings. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 60(1): 217-235.
- Chen, A. 2015.** Merrifield-Simmons index in random phenylene chains and random hexagon chains. *Discrete Dynamics in Nature and Society*, 2015: 1-7.
- Christofides, N. 1975.** Graph theory: An algorithmic approach (Computer science and applied mathematics). Academic Press, London, 400 pp.
- Cruz, R., Marin, C. A., Rada, J. 2017.** Computing the Hosoya index of catacondensed hexagonal systems. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 77(3): 749-764.
- Cyvin, S. J., Gutman, I. 1988.** Kekule Structures in Benzenoid Hydrocarbons, Springer-Verlag, Berlin, 348 pp.
- Diestel, R. 2005.** Graph Theory 3rd ed. Graduate texts in mathematics, Springer-Verlag Heidelberg, New York, 422 pp.
- Gross, J. L., Yellen, J. 2003.** Handbook of Graph Theory, CRC Press, Boca Raton, 1192 pp.
- Gutman, I., Polansky, O. E. 1986.** Mathematical Concepts in Organic Chemistry. Springer, Berlin, 212 pp.

Gutman, I., Cyvin, S. J. 1989. Introduction to the Theory of Benzenoid Hydrocarbons, Springer-Verlag, Berlin, 348 pp.

Gutman, I., Kolakovic, N., Graovac, A., Babic, D. 1989. A method for calculation of the Hosoya index of polymers. *Studies in physical and theoretical chemistry*, 63:141-154.

Gutman, I. 1990. Fragmentation formulas for the number of Kekule structures, Hosoya and Merrifield-Simmons indices and related graph invariants. *Coll. Sci. Pap. Fac. Sci. Kragujevac*, 11: 11-18.

Gutman, I. 1993. Extremal hexagonal chains. *Journal of Mathematical Chemistry*, 12(1): 197-210.

Gutman, I. 2016. Total π – electron energy of conjugated molecules with non-bonding molecular orbitals. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 71(2): 161-164.

Gutman, I., Gültekin, I., Şahin, B. 2016. On Merrifield-Simmons index of molecular graphs. *Kragujevac Journal of Science*, 38: 83-95.

Harary, F. 1969. Graph Theory, Addison-Wesley, Reading, 274 pp.

Hosoya, H. 1971. Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 44(9): 2332-2339.

Hosoya, H., Ohkami, N. 1983. Operator technique for obtaining the recursion formulas of characteristic and matching polynomials as applied to polyhex graphs. *Journal of Computational Chemistry*, 4(4): 585-593.

Hosoya, H. 2019. The most private features of the topological index. *MATI*, 1(1): 25-33.

Klabjan, D., Mohar, B. 1998. The number of matchings of low order in hexagonal systems. *Discrete mathematics*, 186(1-3), 167-175.

Kirby, E. C., Mallion, R. B., Pollak P., Skrzynski, P. J. 2017. What Kirchhoff Actually did Concerning Spanning Trees in Electrical Networks and its Relationship to Modern Graph-Theoretical Work. *Croat. Chem. Acta*, 89(4): 403-417.

Luna, G. D. I., Marcial-Romero, J. R., Lopez, P. B., Gonzalez, M. C. 2018. Linear-time algorithms for computing the Merrifield-Simmons index on polygonal trees. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 79(1): 55-78.

Luna, G. D. I., Marcial-Romero, J. R., Hernandez-Servin, J. A. 2019. Extremal polygonal arrays for the Merrifield-Simmons index. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 81(2): 505-522.

- Maritz, P., Mouton, S. 2012.** Francis Guthrie: A Colourful Life. *The Mathematical Intelligencer*, 34(3): 67-75.
- Mekenyan, O., Bonchev, D., Balaban, A. 1988.** Topological indices for molecular fragments and new graph invariants. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2(4): 347-375.
- Merrifield, R. E., Simmons, H. E. 1989.** Topological Methods in Chemistry, Wiley-Interscience, New York, 256 pp.
- Merrifield, R. E., Simmons, H. E. 1980.** The structure of molecular topological spaces. *Theoretica Chimica Acta*, 55(1): 55-75.
- Merrifield, R. E., Simmons, H. E. 1981a.** Enumeration of structure-sensitive graphical subsets. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 78(2): 692-695.
- Merrifield, R. E., Simmons, H. E. 1981b.** Enumeration of structure-sensitive graphical subsets: Calculations. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 78(3): 1329-1332.
- Merrifield, R. E., Simmons, H. E. 1985.** Topology of bonding in π – electron systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 82(1): 1-3.
- Oz, M. S., Cangul, I. N. 2021.** Computing the Hosoya and the Merrifield-Simmons Indices of Two Special Benzenoid Systems. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 12(3): 161-174.
- Oz, M. S., Cangul, I. N. 2022a.** Computing the Number of k -Matchings in Benzenoid Chains. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 88: 79-92.
- Oz, M. S., Cangul, I. N. 2022b.** Enumeration of Independent Sets in Benzenoid Chains. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 88: 93-107.
- Plummer, M. D., Lovasz, L. 1986.** Matching Theory, Elsevier, North-Holland, 544 pp.
- Polansky, O. E., Randic, M., Hosoya H. 1989.** Transfer matrix approach to the Wiener numbers of cata-condensed benzenoids. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 24: 3-28.
- Prodinger, H., Tichy R. 1982.** Fibonacci numbers of graphs. *The Fibonacci Quarterly*, 20(1): 16-21.
- Randic, M., Hosoya H., Polansky, O. E. 1989.** On the construction of the matching polynomial for unbranched catacondensed benzenoids. *Journal of Computational Chemistry*, 10(5): 683-697.
- Ren, S. 2011.** Merrifield-Simmons index of tree-type hexagonal systems. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 66(3): 837-848.

- Ren, H., Zhang, F. 2007a.** Double hexagonal chains with maximal Hosoya index and minimal Merrifield–Simmons index. *Journal of Mathematical Chemistry*, 42(4): 679-690.
- Ren, H., Zhang, F. 2007b.** Extremal double hexagonal chains with respect to k-matchings and k-independent sets. *Discrete applied mathematics*, 155(17): 2269-2281.
- Saoub, K. R. 2021.** Graph Theory: An Introduction to Proofs, Algorithms and Applications (Textbooks in Mathematics), CRC Press, Boca Raton, 437 pp.
- Schmuck, N. S. 2010.** The Wiener index of a graph. *Diploma Tezi*, Graz University of Technology, Institut für Mathematik A, Graz.
- Shiu, W. C. 2008.** Extremal Hosoya index and Merrifield-Simmons index of hexagonal spiders. *Discrete applied mathematics*, 156(15): 2978-2985.
- Simmons, H. E., Merrifield, R. E. 1977.** Mathematical description of molecular structure: Molecular topology. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 74(7): 2616-2619.
- Şahin, B. 2016.** Fibonacci Sayıları ve Topolojik İndeksin Kimyasal Formüllerde İncelenmesi. *Doktora Tezi*, AÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Matematik Anabilim Dalı, Erzurum.
- Trinajstić, N. 1992.** Chemical graph theory. CRC Press, USA, 352 pp.
- Todeschini, R., Consonni, V. 2008.** Handbook of Molecular Descriptors, Wiley-VCH, Weinheim, 688 pp.
- Zhang, L. Z., Tian, F. 2003.** Extremal catacondensed benzenoids. *Journal of Mathematical Chemistry*, 34(1): 111-122.
- Zhang, L. Z. 1998.** The proof of Gutman's conjectures concerning extremal hexagonal chains. *Journal of Systems Science and Mathematical Sciences*, 18(4): 460-465.
- Zhang, L. Z., Zhang, F. J. 2000.** Extremal hexagonal chains concerning k-matchings and k-independent sets. *Journal of Mathematical Chemistry*, 27(4): 319-329.
- Zhang, L. Z. 2000.** On the ordering of a class of hexagonal chains with respect to Merrifield-Simmons index. *Journal of Systems Science and Mathematical Sciences*, 13(2): 219-224.
- Zhang, Z. 2014.** Merrifield-Simmons index and its entropy of the $4 - 8 - 8$ lattice. *Journal of Statistical Physics*, 154(4): 1113-1123.
- Wagner, S., Gutman, I. 2010.** Maxima and minima of the Hosoya index and the Merrifield-Simmons index. *Acta Applicandae Mathematicae*, 112(3): 323-346.

Wiener, H. 1947. Structural determination of paraffin boiling points. *Journal of the American Chemical Society*, 69(1): 17-20.

EKLER

- EK 1.** E_1 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 2.** E_2 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 3.** E_3 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 4.** E_4 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 5.** $G = (V, E)$ olmak üzere $\forall uv \in E$ için $m_{kh}(P_2, k) = m_{uv}(P_2, k)$ vektörünü elde etmek için MATLAB kodu
- EK 6.** A matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 7.** B matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 8.** C matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 9.** D matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 10.** Örnek 4.1.8'de kullanılan Z matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 11.** Örnek 4.1.8'de kullanılan L matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 12.** k -bağımsızlık sayısı için E'_1 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 13.** k -bağımsızlık sayısı için E'_2 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 14.** k -bağımsızlık sayısı için E'_3 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 15.** k -bağımsızlık sayısı için E'_4 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 16.** k -bağımsızlık sayısı için E'_5 matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 17.** $G = (V, E)$ olmak üzere $\forall uv \in E$ için $n_{kh}(P_2, k) = n_{uv}(P_2, k)$ vektörünü elde etmek için MATLAB kodu
- EK 18.** A' matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 19.** B' matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 20.** C' matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 21.** D' matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 22.** Örnek 4.2.8'de Z' matrisini elde etmek için MATLAB kodu
- EK 23.** Örnek 4.2.8'de L' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

EK 1. E_1 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
E1=zeros(4*k+4,4*k+4);
t1=0;
for i=2:k+1
E1(1,k+1)=1;
E1(i,k+3-i)=1;
E1(i,k+2-i)=1;
E1(i,2*k+2-t1)=1;
t1=t1+1;
end
t2=1;
for i=k+4:2*k+2;
E1(k+3,k+1)=1;
E1(i,k+1-t2)=1;
E1(i,2*k+3-t2)=1;
t2=t2+1;
end
t3=0;
for i=2*k+5:3*k+3
E1(2*k+4,3*k+3)=1;
E1(i,3*k+3-t3)=1;
E1(i,3*k+2-t3)=1;
E1(i,4*k+4-t3)=1;
t3=t3+1;
end
t4=0;
for i=3*k+7:4*k+4
E1(3*k+6,3*k+3)=1;
E1(i,3*k+2-t4)=1;
E1(i,4*k+4-t4)=1;
t4=t4+1;
end
```

EK 2. E_2 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
E2=zeros(4*k+4,4*k+4);
for i=1:k+1
E2(i,k+3-i-1)=1;
end
t2=0;
for i=k+3:2*k+2
E2(i,k+1-t2)=1;
t2=t2+1;
end
t3=0;
for i=2*k+4:3*k+3
E2(i,3*k+3-t3)=1;
t3=t3+1;
end
t4=0;
for i=3*k+6:4*k+4
E2(i,3*k+3-t4)=1;
t4=t4+1;
end
```

EK 3. E_3 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
E3=zeros(4*k+4,4*k+4);
t1=0;
for i=2:k+1
E3(1,k+1)=1;
E3(i,k+2-i)=1;
E3(i,2*k+2-t1)=1;
t1=t1+1;
end
t2=0;
for i=2*k+5:3*k+3
E3(2*k+4,3*k+3)=1;
E3(i,3*k+2-t2)=1;
E3(i,4*k+4-t2)=1;
t2=t2+1;
end
```

EK 4. E_4 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');  
E4=zeros(4*k+4,4*k+4);  
for i=1:k+1  
E4(i,k+3-i-1)=1;  
end  
t3=0;  
for i=2*k+4:3*k+3  
E4(i,3*k+3-t3)=1;  
t3=t3+1;  
end
```

EK 5. $G = (V, E)$ olmak üzere $\forall uv \in E$ için $m_{kh}(P_2, k) = m_{uv}(P_2, k)$ vektörünü elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');  
M=zeros(1,4*k+4);  
M(k)=1;  
M(k+1)=1;  
M(2*k+2)=1;  
M(3*k+3)=1;  
M(4*k+4)=1;  
V=transpose(M);
```

EK 6. A matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
A=zeros(4*k+4,4*k+4);
L1=zeros(1,4*k+4);
L1(1)=1;
L1(2)=3;
L1(3)=1;
L1(k+3)=1;
L1(k+4)=2;
L1(2*k+4)=1;
L1(2*k+5)=2;
L1(3*k+6)=1;
L1(3*k+7)=1;
L2=zeros(1,4*k+4);
L2(1)=1;
L2(2)=1;
L2(k+3)=1;
L2(k+4)=1;
L2(2*k+4)=1;
L2(3*k+6)=1;
L3=zeros(1,4*k+4);
L3(1)=1;
L3(2)=1;
L3(k+3)=1;
L3(2*k+4)=1;
L3(2*k+5)=1;
L3(3*k+6)=1;
L4=zeros(1,4*k+4);
L4(1)=1;
L4(k+3)=1;
L4(2*k+4)=1;
L4(3*k+6)=1;
A(1,:)=L1;
A(k+2,:)=L2;
A(2*k+3,:)=L3;
A(3*k+4,:)=L4;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
        A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
        A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
```

EK 6. (devam) A matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);  
    end  
end    for i=3*k+4:4*k+3  
    for j= 1:k  
A(i+1,j+1)=A(i,j);  
A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);  
A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);  
A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);  
    end  
end
```

EK 7. B matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
B=zeros(4*k+4,4*k+4);
L1=zeros(1,4*k+4);
L1(1)=1;
L1(2)=3;
L1(3)=1;
L1(k+3)=1;
L1(k+4)=2;
L1(2*k+4)=1;
L1(2*k+5)=2;
L1(3*k+6)=1;
L1(3*k+7)=1;
L2=zeros(1,4*k+4);
L2(1)=1;
L2(2)=2;
L2(2*k+4)=1;
L2(2*k+5)=1;
L3=zeros(1,4*k+4);
L3(1)=1;
L3(2)=1;
L3(k+3)=1;
L3(k+4)=1;
L3(2*k+4)=1;
L3(3*k+6)=1;
L4=zeros(1,4*k+4);
L4(1)=1;
L4(2)=1;
L4(2*k+4)=1;
B(1,:)=L1;
B(k+2,:)=L2;
B(2*k+3,:)=L3;
B(3*k+4,:)=L4;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        B(i+1,j+1)=B(i,j) ;
        B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
        B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
        B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        B(i+1,j+1)=B(i,j);
        B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
        B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
        B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        B(i+1,j+1)=B(i,j);
        B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
        B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
        B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
    end
end
en
```

EK 7. (devam) B matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        B(i+1,j+1)=B(i,j);
        B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
        B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
        B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
    end
end
```

EK 8. C matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
C=zeros(4*k+4,4*k+4);
L1=zeros(1,4*k+4);
L1(1)=1;
L1(2)=3;
L1(3)=1;
L1(k+3)=1;
L1(k+4)=2;
L1(2*k+4)=1;
L1(2*k+5)=2;
L1(3*k+6)=1;
L1(3*k+7)=1;
L2=zeros(1,4*k+4);
L2(1)=1;
L2(2)=1;
L2(k+3)=1;
L2(2*k+4)=1;
L2(2*k+5)=1;
L2(3*k+6)=1;
L3=zeros(1,4*k+4);
L3(1)=1;
L3(2)=2;
L3(k+3)=1;
L3(k+4)=1;
L4=zeros(1,4*k+4);
L4(1)=1;
L4(2)=1;
L4(k+3)=1;
C(1,:)=L1;
C(k+2,:)=L2;
C(2*k+3,:)=L3;
C(3*k+4,:)=L4;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        C(i+1,j+1)=C(i,j);
        C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
        C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
        C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        C(i+1,j+1)=C(i,j);
        C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
        C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
        C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        C(i+1,j+1)=C(i,j);
        C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
        C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
        C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
    end
end
end
```

EK 8. (devam) C matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        C(i+1,j+1)=C(i,j);
        C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
        C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
        C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
    end
end
```

EK 9. D matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
D=zeros(4*k+4,4*k+4);
L1=zeros(1,4*k+4);
L1(1)=1;
L2=zeros(1,4*k+4);
L2(2*k+3)=1;
L3=zeros(1,4*k+4);
L3(k+2)=1;
L4=zeros(1,4*k+4);
L4(3*k+4)=1;
D(1,:)=L1;
D(k+2,:)=L2;
D(2*k+3,:)=L3;
D(3*k+4,:)=L4;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
    end
end
end
```

EK 10. Örnek 4.1.8’de kullanılan Z matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
Z=zeros(4*k+4,4*k+4);
Z1=E1*B*A*A*V;
Z2=E2*B*A*A*V;
Z3=E3*B*A*A*V;
Z4=E4*B*A*A*V;
Z(1,:)=transpose(Z1);
Z(k+2,:)=transpose(Z2);
Z(2*k+3,:)=transpose(Z3);
Z(3*k+4,:)=transpose(Z4);
for i=1:k+1
    for j= i:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
    end
end
end
```

EK 11. Örnek 4.1.8’de kullanılan L matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
L=zeros(4*k+4,4*k+4);
L1=E1*A*V;
L2=E2*A*V;
L3=E3*A*V;
L4=E4*A*V;
L(1,:)=transpose(L1);
L(k+2,:)=transpose(L2);
L(2*k+3,:)=transpose(L3);
L(3*k+4,:)=transpose(L4);
for i=1:k+1
    for j= i:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
    end
end
end
```

EK 12. k -bağımsızlık sayısı için E'_1 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
E1=zeros(5*k+5,5*k+5);
t1=0;
E1(1,k+1)=1;
E1(2,k+1)=2;
E1(2,k)=1;
for i=3:k+1
E1(1,k+1)=1;
E1(2,k+1)=2;
E1(2,k)=1;
E1(i,k+3-i)=2;
E1(i,k+2-i)=1;
E1(i,2*k+2-t1)=-1;
t1=t1+1;
end
t2=0;
for i=k+4:2*k+2;
E1(i,k+1-t2)=-1;
t2=t2+1;
end
t3=0;
for i=2*k+6:3*k+3
E1(2*k+5,3*k+3)=-1;
E1(i,3*k+3-t3)=-2;
E1(i,3*k+2-t3)=-1;
t3=t3+1;
end
```

EK 13. k -bağımsızlık sayısı için E'_2 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');  
E2=zeros(5*k+5,5*k+5);  
t1=0;  
for i=1:k+1  
E2(i,4*k+4-t1)=1;  
t1=t1+1;  
end  
t2=0;  
for i=2*k+5:3*k+3  
E2(i,3*k+3-t2)=-1;  
t2=t2+1;  
end
```

EK 14. k -bağımsızlık sayısı için E'_3 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');  
E3=zeros(5*k+5,5*k+5);  
t1=0;  
for i=2*k+5:3*k+3  
E3(i,3*k+3-t1)=-1;  
t1=t1+1;  
end  
t2=0;  
for i=3*k+4:4*k+4;  
E3(i,k+1-t2)=1;  
t2=t2+1;  
end
```

EK 15. k -bağımsızlık sayısı için E'_4 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
E4=zeros(5*k+5,5*k+5);
for i=2:k+1
E4(1,k+1)=1;
E4(i,k+3-i)=1;
E4(i,k+2-i)=1;
end
t1=0;
for i=k+4:2*k+2;
E4(i,k+1-t1)=-1;
t1=t1+1;
end
t2=0;
for i=2*k+6:3*k+3
E4(2*k+5,3*k+3)=-1;
E4(i,3*k+3-t2)=-1;
E4(i,3*k+2-t2)=-1;
t2=t2+1;
end
```

EK 16. k -bağımsızlık sayısı için E'_5 matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
E5=zeros(5*k+5,5*k+5);
t1=0;
E5(1,k+1)=1;
E5(2,k)=1;
E5(2,k+1)=1;
for i=3:k+1
E5(i,k+3-i)=1;
E5(i,k+2-i)=1;
E5(i,2*k+2-t1)=-1;
t1=t1+1;
end
t2=0;
for i=2*k+6:3*k+3
E5(2*k+5,3*k+3)=-1;
E5(i,3*k+3-t2)=-1;
E5(i,3*k+2-t2)=-1;
t2=t2+1;
end
```

EK 17. $G = (V, E)$ olmak üzere $\forall uv \in E$ için $n_{kh}(P_2, k) = n_{uv}(P_2, k)$ vektörünü elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');  
M=zeros(1,5*k+5);  
M(k)=2;  
M(k+1)=1;  
M(2*k+2)=1;  
M(3*k+3)=1;  
M(4*k+3)=1;  
M(4*k+4)=1;  
M(5*k+4)=1;  
M(5*k+5)=1;  
V=transpose(M);
```

EK 18. A' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
A=zeros(5*k+5,5*k+5);
L1=zeros(1,5*k+5);
L1(1)=1;
L1(2)=4;
L1(3)=3;
L1(k+4)=-1;
L1(k+5)=-2;
L1(2*k+5)=-1;
L1(2*k+6)=-2;
L2=zeros(1,5*k+5);
L2(1)=1;
L2(2)=1;
L2(2*k+5)=-1;
L3=zeros(1,5*k+5);
L3(1)=1;
L3(2)=1;
L3(k+4)=-1;
L4=zeros(1,5*k+5);
L4(1)=1;
L4(2)=3;
L4(3)=2;
L4(k+4)=-1;
L4(k+5)=-2;
L4(2*k+5)=-1;
L4(2*k+6)=-1;
L5=zeros(1,5*k+5);
L5(1)=1;
L5(2)=3;
L5(3)=2;
L5(k+4)=-1;
L5(k+5)=-1;
L5(2*k+5)=-1;
L5(2*k+6)=-2;
A(1,:)=L1;
A(k+2,:)=L2;
A(2*k+3,:)=L3;
A(3*k+4,:)=L4;
A(4*k+5,:)=L5;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
        A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);
        A(i+1,j+4*k+5)=A(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
        A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);
        A(i+1,j+4*k+5)=A(i,j+4*k+4);
    end
end
```

EK 18. (devam) A' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
        A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);
        A(i+1,j+4*k+5)=A(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
        A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);
        A(i+1,j+4*k+5)=A(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=4*k+5:5*k+4
    for j= 1:k
        A(i+1,j+1)=A(i,j);
        A(i+1,j+k+2)=A(i,j+k+1);
        A(i+1,j+2*k+3)=A(i,j+2*k+2);
        A(i+1,j+3*k+4)=A(i,j+3*k+3);
        A(i+1,j+4*k+5)=A(i,j+4*k+4);
    end
end
```

EK 19. B' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
B=zeros(5*k+5,5*k+5);
L1=zeros(1,5*k+5);
L1(1)=1;
L1(2)=4;
L1(3)=3;
L1(k+4)=-1;
L1(k+5)=-2;
L1(2*k+5)=-1;
L1(2*k+6)=-2;
L2=zeros(1,5*k+5);
L2(2*k+5)=-1;
L2(3*k+4)=1;
L2(3*k+5)=2;
L3=zeros(1,5*k+5);
L3(1)=1;
L3(2)=1;
L3(2*k+5)=-1;
L4=zeros(1,5*k+5);
L4(1)=1;
L4(2)=3;
L4(3)=1;
L4(2*k+5)=-1;
L4(2*k+6)=-1;
L5=zeros(1,5*k+5);
L5(1)=1;
L5(2)=3;
L5(3)=2;
L5(k+4)=-1;
L5(k+5)=-2;
L5(2*k+5)=-1;
L5(2*k+6)=-1;
B(1,:)=L1;
B(k+2,:)=L2;
B(2*k+3,:)=L3;
B(3*k+4,:)=L4;
B(4*k+5,:)=L5;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        B(i+1,j+1)=B(i,j) ;
        B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
        B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
        B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
        B(i+1,j+4*k+5)=B(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        B(i+1,j+1)=B(i,j);
        B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
        B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
        B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
        B(i+1,j+4*k+5)=B(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
```

EK 19. (devam) B' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
    for j= 1:k
B(i+1,j+1)=B(i,j);
B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
B(i+1,j+4*k+5)=B(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
B(i+1,j+1)=B(i,j);
B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
B(i+1,j+4*k+5)=B(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=4*k+5:5*k+4
    for j= 1:k
B(i+1,j+1)=B(i,j);
B(i+1,j+k+2)=B(i,j+k+1);
B(i+1,j+2*k+3)=B(i,j+2*k+2);
B(i+1,j+3*k+4)=B(i,j+3*k+3);
B(i+1,j+4*k+5)=B(i,j+4*k+4);
    end
end
```

EK 20. C' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
C=zeros(5*k+5,5*k+5);
L1=zeros(1,5*k+5);
L1(1)=1;
L1(2)=4;
L1(3)=3;
L1(k+4)=-1;
L1(k+5)=-2;
L1(2*k+5)=-1;
L1(2*k+6)=-2;
L2=zeros(1,5*k+5);
L2(1)=1;
L2(2)=1;
L2(k+4)=-1;
L3=zeros(1,5*k+5);
L3(k+4)=-1;
L3(4*k+5)=1;
L3(4*k+6)=2;
L4=zeros(1,5*k+5);
L4(1)=1;
L4(2)=3;
L4(3)=2;
L4(k+4)=-1;
L4(k+5)=-1;
L4(2*k+5)=-1;
L4(2*k+6)=-2;
L5=zeros(1,5*k+5);
L5(1)=1;
L5(2)=3;
L5(3)=1;
L5(k+4)=-1;
L5(k+5)=-1;
C(1,:)=L1;
C(k+2,:)=L2;
C(2*k+3,:)=L3;
C(3*k+4,:)=L4;
C(4*k+5,:)=L5;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        C(i+1,j+1)=C(i,j) ;
        C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
        C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
        C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
        C(i+1,j+4*k+5)=C(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        C(i+1,j+1)=C(i,j);
        C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
        C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
        C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
        C(i+1,j+4*k+5)=C(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
```

EK 20. (devam) C' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
    for j= 1:k
C(i+1,j+1)=C(i,j);
C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
C(i+1,j+4*k+5)=C(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
C(i+1,j+1)=C(i,j);
C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
C(i+1,j+4*k+5)=C(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=4*k+5:5*k+4
    for j= 1:k
C(i+1,j+1)=C(i,j);
C(i+1,j+k+2)=C(i,j+k+1);
C(i+1,j+2*k+3)=C(i,j+2*k+2);
C(i+1,j+3*k+4)=C(i,j+3*k+3);
C(i+1,j+4*k+5)=C(i,j+4*k+4);
    end
end
end
```

EK 21. D' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
D=zeros(5*k+5,5*k+5);
L1=zeros(1,5*k+5);
L1(1)=1;
L2=zeros(1,5*k+5);
L2(2*k+3)=1;
L3=zeros(1,5*k+5);
L3(k+2)=1;
L4=zeros(1,5*k+5);
L4(4*k+5)=1;
L5=zeros(1,5*k+5);
L5(3*k+4)=1;
D(1,:)=L1;
D(k+2,:)=L2;
D(2*k+3,:)=L3;
D(3*k+4,:)=L4;
D(4*k+5,:)=L5;
for i=1:k+1
    for j= i:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
        D(i+1,j+4*k+5)=D(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
        D(i+1,j+4*k+5)=D(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
        D(i+1,j+4*k+5)=D(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
        D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);
        D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);
        D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);
        D(i+1,j+4*k+5)=D(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=4*k+5:5*k+4
    for j= 1:k
        D(i+1,j+1)=D(i,j);
```

EK 21. (devam) D' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
D(i+1,j+k+2)=D(i,j+k+1);  
D(i+1,j+2*k+3)=D(i,j+2*k+2);  
D(i+1,j+3*k+4)=D(i,j+3*k+3);  
D(i+1,j+4*k+5)=D(i,j+4*k+4);  
    end  
end
```

EK 22. Örnek 4.2.8’de Z' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
Z=zeros(5*k+5,5*k+5);
Z1=E1*B*A*A*V;
Z2=E2*B*A*A*V;
Z3=E3*B*A*A*V;
Z4=E4*B*A*A*V;
Z5=E5*B*A*A*V;
Z(1,:)=transpose(Z1);
Z(k+2,:)=transpose(Z2);
Z(2*k+3,:)=transpose(Z3);
Z(3*k+4,:)=transpose(Z4);
Z(4*k+5,:)=transpose(Z5);
for i=1:k+1
    for j= i:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
        Z(i+1,j+4*k+5)=Z(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
        Z(i+1,j+4*k+5)=Z(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
        Z(i+1,j+4*k+5)=Z(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
        Z(i+1,j+4*k+5)=Z(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=4*k+5:5*k+4
    for j= 1:k
        Z(i+1,j+1)=Z(i,j);
        Z(i+1,j+k+2)=Z(i,j+k+1);
        Z(i+1,j+2*k+3)=Z(i,j+2*k+2);
        Z(i+1,j+3*k+4)=Z(i,j+3*k+3);
        Z(i+1,j+4*k+5)=Z(i,j+4*k+4);
    end
end
```

end

EK 23. Örnek 4.2.8’de L' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
k=input('k ≥ 3 değeri giriniz');
L=zeros(5*k+5,5*k+5);
L1=E1*A*V;
L2=E2*A*V;
L3=E3*A*V;
L4=E4*A*V;
L5=E5*A*V;
L(1,:)=transpose(L1);
L(k+2,:)=transpose(L2);
L(2*k+3,:)=transpose(L3);
L(3*k+4,:)=transpose(L4);
L(4*k+5,:)=transpose(L5);
for i=1:k+1
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
        L(i+1,j+4*k+5)=L(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=k+2:2*k+1
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
        L(i+1,j+4*k+5)=L(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=2*k+3:3*k+2
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
        L(i+1,j+4*k+5)=L(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=3*k+4:4*k+3
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
        L(i+1,j+4*k+5)=L(i,j+4*k+4);
    end
end
for i=4*k+5:5*k+4
    for j= 1:k
        L(i+1,j+1)=L(i,j);
        L(i+1,j+k+2)=L(i,j+k+1);
        L(i+1,j+2*k+3)=L(i,j+2*k+2);
        L(i+1,j+3*k+4)=L(i,j+3*k+3);
        L(i+1,j+4*k+5)=L(i,j+4*k+4);
    end
end
```

EK 23. (devam) Örnek 4.2.8’de L' matrisini elde etmek için MATLAB kodu

```
end  
end
```

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Mert Sinan ÖZ
Doğum Yeri ve Tarihi : Bursa / 08.04.1992
Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Bursa Ali Karasu Anadolu Lisesi / 2010
Lisans : Ege Üniversitesi /
Fen Fakültesi / Matematik Bölümü / 2015
Doktora : Bursa Uludağ Üniversitesi /
Fen Bilimleri Enstitüsü /
Matematik Anabilim Dalı / 2022

Çalıştığı Kurum ve Yıl : Bursa Teknik Üniversitesi / 2017-halen

İletişim (e-posta) : sinan.oz@btu.edu.tr

Yayınları :

Yamac, C., Oz, M. S., Cangul, I. N. 2018. Edge Adjacency in Graphs. *Proceedings of the Jangjeon Mathematical Society*, 21(3): 357-373.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2019. Matching number in relation with maximal-minimal nullity conditions and cyclomatic number by coefficient relations. *Advanced Studies in Contemporary Mathematics*, 29(4): 461-476.

Oz, M. S., Yamac, C., Cangul, I. N. 2019. Sum-edge characteristic polynomials of graphs. *Journal of Taibah University for Science*, 13(1): 193-200.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2020. Bounds for Matching Number of Fundamental Realizations According to New Graph Invariant Omega. *Proceedings of the Jangjeon Mathematical Society*, 23(1): 23-37.

Yamac, C., Oz, M. S., Cangul, I. N. 2020. Edge-Zagreb Indices of Graphs. *TWMS Journal of Applied and Engineering Mathematics*, 10(1): 1-10.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2020. Algebraic Method for Characteristic Edge-Zagreb and Laplacian Polynomials of Graphs. *Advanced Studies in Contemporary Mathematics*, 30(3): 289-296.

Yurttas Gunes, A., Demirci, M., Oz, M. S., Cangul, I. N. 2020. Matching Number and Characteristic Polynomial of a Graph. *Journal of Taibah University for Science*, 14(1): 993-999.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2021. Recurrence Relations of Edge-Zagreb and Sum-Edge Characteristic Polynomials of Some Graphs. *New Trends in Applied Analysis and Computational Mathematics*. Springer, Singapore, 99-106.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2021. Computing the Hosoya and the Merrifield-Simmons Indices of Two Special Benzenoid Systems. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 12(3): 161-174.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2022. Computing the Number of k -Matchings in Benzenoid Chains. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 88(1): 79-92.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2022. Enumeration of Independent Sets in Benzenoid Chains. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 88(1): 93-107.

Oz, M. S., Cangul, I. N. 2022. A New Method for the Sum-Edge Characteristic Polynomials of Graphs. *Boletim da Sociedade Paranaense de Matemática*, 40: 1-8.