

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده علوم ریاضی

رشته ریاضی کاربردی، گرایش گراف و ترکیبیات

پایان نامه کارشناسی ارشد

کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌های مولکولی

نگارنده: محبوبه طالبی

استاد راهنما

دکتر صادق رحیمی شهرباف مقدس

بهمن ماه ۱۳۹۶

شماره:

تاریخ:

باسمه تعالی



دانشگاه صنعتی شاهرود

مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم محبوبه طالبی با شماره دانشجویی ۹۴۱۱۴۲۴ رشته ریاضی کاربردی گرایش گراف و ترکیبیات تحت عنوان کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌های مولکولی که در تاریخ ۱۳۹۶/۱۱/۰۹ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

<input type="checkbox"/> مردود	<input checked="" type="checkbox"/> قبول (با درجه: <u>خیلی خوب</u>)
<input type="checkbox"/> عملی	<input checked="" type="checkbox"/> نظری

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر صادق رحیمی شهرباف مقدس	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم			
۳- استاد مشاور			
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر مهرداد غزنوی	استادیار	
۵- استاد ممتحن اول	دکتر میثم علیشاهی	استادیار	
۶- استاد ممتحن دوم	دکتر عبدالله آل هوز	استادیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر ابراهیم هاشمی

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تبصره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می‌تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع

مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).

این مجموعه را به همسر عزیزم تقدیم می‌کنم...

به پاس عاطفه سرشار و گرمای امید بخش وجودش که در این سردترین روزگار ان بهترین پشتیبان است و سایه مهربانش
سایه ساز زندگی من می‌باشد، او که اسوه صبر و تحمل بوده و مشکلات مسیر را برایم تسهیل نمود.

سپاس‌گزاری...

هزاران حمد سپاس پروردگاری که فرصت و انگیزه‌ی آموختن و اندیشیدن را به من بخشید.

پروردگارا:

پدر و مادرم را به گرمی داشتن نزد خودت و درود از جانب لطفت اختصاص ده، ای مهربانترین مهربانان. الهی در تعقیب نمازهایم و در اوقات شب و در هر ساعتی از ساعات روزم یاد و ذکرشان را از دل و زبانم مبر. خداوندا بر محمد و آل او و ذریه‌اش درود فرست و به پدر و مادرم از لطف و کرمت برتر از آنچه را که به پدران و مادران اهل ایمان عطا فرموده‌ای اختصاص ده ای مهربانترین مهربانان.

از استاد گرانقدر جناب آقای دکترصادق رحیمی شعرباف مقدس که در تمامی مراحل اجرای تحقیق از راهنمایی‌ها و حمایت‌های خردمندانه ایشان بهره‌مند بودم کمال تشکر و قدردانی را دارم.

همچنین از اساتید گرمی آقای دکتر علیشاهی و آقای دکتر آل هوز که زحمت مطالعه و داوری این پایان‌نامه را متقبل شده‌اند، کمال تشکر و سپاس‌گزاری را دارم.

محبوبه طالبی

بهمن ماه ۱۳۹۶

تعهد نامه

اینجانب **محبوبه طالبی** دانشجوی کارشناسی ارشد رشته **ریاضی کاربردی** دانشکده **علوم ریاضی** دانشگاه **شاهرود**، نویسنده پایان نامه با عنوان **کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌های مولکولی**، تحت راهنمایی **دکتر صادق رحیمی شهرباف مقدس** متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های دیگر پژوهش‌گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایان نامه، تا کنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ‌جا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه صنعتی شاهرود تعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام “دانشگاه صنعتی شاهرود” یا “Shahrood University of Technology” به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آوردن نتایج اصلی پایان نامه تاثیرگذار بوده‌اند، در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می‌گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آنها) استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده شده است)، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

محبوبه طالبی

بهمن ماه ۱۳۹۶

مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایان نامه بدون ذکر منبع مجاز نمی‌باشد.

چکیده

در این پایان نامه کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌های مولکولی بررسی می‌شود. در این رابطه ویژگی‌های یکی از مهمترین شاخص‌های توپولوژیکی گراف‌های مولکولی مبتنی بر فاصله یعنی شاخص وینر مورد مطالعه و بررسی قرار می‌گیرد. سپس شاخص‌های توپولوژیکی در بحث اعمال گراف‌ها بررسی می‌شود. در ادامه موضوع شاخص وینر فازی مبتنی بر فاصله فازی و بعضی از ویژگی‌های آن به صورت ابتکاری تعمیم داده می‌شود. همچنین به بررسی بعضی دیگر از کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌ها پرداخته می‌شود.

کلمات کلیدی: شاخص‌های توپولوژیکی، فاصله فازی، گراف مولکولی، گراف مولکولی فازی، ماتریس فاصله، ماتریس فاصله فازی

فهرست مطالب

م	فهرست تصاویر
س	فهرست جداول
ف	پیشگفتار
۱	۱ تعاریف و مباحث مقدماتی
۱	۱.۱ مفاهیم مقدماتی در نظریه گراف
۸	۲.۱ مفاهیم مقدماتی در نظریه فازی
۱۰	۳.۱ مفاهیم مقدماتی در علم شیمی
۱۵	۲ شاخص‌های توپولوژیکی مبتنی بر فاصله
۱۵	۱.۲ برخی از شاخص‌های توپولوژیکی فاصله
۱۸	۲.۲ بررسی شاخص وینر برخی از گراف‌ها
۲۳	۳.۲ کران‌هایی برای شاخص‌های توپولوژیکی
۲۶	۴.۲ مفاهیم مربوط به ماتریس‌های توپولوژیکی
۲۶	۱.۴.۲ ماتریس فاصله
۲۷	۲.۴.۲ ماتریس وینر
۲۸	۳.۴.۲ ماتریس فاصله متقابل
۲۸	۴.۴.۲ ماتریس هاراری
۲۹	۵.۴.۲ ماتریس لاپلاسیان
۳۵	۳ شاخص‌های توپولوژیکی و اعمال گراف‌ها
۳۵	۱.۳ اعمال گراف‌ها
۳۸	۲.۳ شاخص وینر چهار عمل از گراف‌ها
۴۰	۳.۳ درجه فاصله حاصل ضرب کرونا گراف‌ها

۴۵	۴ فاصله فازی در گرافها	
۴۵	۱.۴ گراف فازی	
۴۹	۲.۴ گرافهای خود مرکز فازی	
۵۱	۳.۴ ماتریس فاصله فازی	
۵۴	۴.۴ مرکز فازی درختان	
۵۵	۵.۴ مرکز فازی مکمل گراف فازی	
۵۷	۵ گرافهای مولکولی فازی	
۵۸	۱.۵ گراف مولکولی فازی	
۶۰	۲.۵ شاخصهای توپولوژیکی فازی	
۶۰	۱.۲.۵ فاصله فازی	
۶۰	۲.۲.۵ شاخص وینر فازی	
۶۲	۳.۲.۵ شاخص PI_v فازی	
۶۳	۶ بعضی دیگر از کاربردهای ماتریس فاصله در گرافها	
۶۳	۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در برخی از شاخصهای گراف	
۶۴	۱.۱.۶ کاربرد مربوط به شعاع گراف	
۶۴	۲.۱.۶ کاربرد مربوط به قطر گراف	
۶۵	۳.۱.۶ کاربرد مربوط به مجموع فواصل گراف	
۶۵	۴.۱.۶ کاربرد مربوط به حداقل مجموع فواصل گراف	
۶۵	۵.۱.۶ کاربرد مربوط به جمع مجموع فواصل گراف	
۶۶	۶.۱.۶ کاربرد مربوط به میانگین مجموع فواصل گراف	
۶۶	۷.۱.۶ کاربرد مربوط به تعیین پراکندگی فاصلهها	
۶۶	۸.۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در میانه گراف	
۶۷	۹.۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در میانگین خروج از مرکز	
۶۷	۱۰.۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در شاخصهای پراکندگی	
۶۸	۲.۶ مسائل مکانیابی و تابع فاصله	
۷۰	۱.۲.۶ مسائل p -مرکز	
۷۰	۲.۲.۶ کاربرد مسئله فاصله مربوط به مسائل p -مرکز	
۷۰	۳.۲.۶ کاربرد مسئله فاصله مربوط به مسائل p -میانه	
۷۳	آ	
۷۹	مراجع	

فهرست تصاویر

۴	بلوک‌های گراف G	۱.۱
۴	یک گراف کاکتوس G	۲.۱
۷	دو گراف یکرخت	۳.۱
۸	گراف‌های غیر یکرخت با شاخص وینر برابر	۴.۱
۹	نمایش مثلثی مجموعه فازی	۵.۱
۱۰	نمایش مثلثی مجموعه فازی $\tilde{A} = (20, 150, 195)$	۶.۱
۱۲	ساختار مولکولی آب	۷.۱
۱۳	گراف مولکولی آب	۸.۱
۱۳	ساختار مولکولی استیلن	۹.۱
۱۳	گراف مولکولی استیلن	۱۰.۱
۱۳	ساختار مولکولی پروپان	۱۱.۱
۱۴	گراف مولکولی پروپان	۱۲.۱
۱۴	ساختار مولکولی سیکلو پروپن	۱۳.۱
۱۴	گراف مولکولی سیکلو پروپن	۱۴.۱
۱۶	گراف G مثال ۱.۲	۱.۲
۱۸		۲.۲
۲۱	درخت مثال (۱.۲.۲)	۳.۲
۲۲	درخت دلخواه T	۴.۲
۲۶	درخت دلخواه T_1	۵.۲
۳۰		۶.۲
۳۲		۷.۲
۳۶	حاصلضرب دکارتی دو گراف	۱.۳
۳۶	پیوند دو گراف	۲.۳
۳۷	ترکیب دو گراف	۳.۳
۳۷	گراف $C_6 \odot K_2$	۴.۳

۴۶	یک گراف فازی دلخواه	۱.۴
۴۷	فاصله در گراف فازی	۲.۴
۴۹	خروج از مرکز و مرکز	۳.۴
۵۰	یک گراف فازی و گراف زمینه آن	۴.۴
۵۱	گراف H قضیه (۳.۲.۴)	۵.۴
۵۲	ماتریس فاصله فازی	۶.۴
۵۳	گراف خودمرکز فازی	۷.۴
۵۳	گرافی که خودمرکز فازی نیست	۸.۴
۵۴	درخت فازی	۹.۴
۵۵	مرکز درخت فازی	۱۰.۴
۵۵	گراف فازی و مکمل آن	۱۱.۴
۵۸	ساختار مولکولی (SO_2)	۱.۵
۵۹	ساختار مولکولی (N_2F_2)	۲.۵
۵۹	گراف مولکولی (N_2F_2)	۳.۵
۵۹	گراف مولکولی فازی (N_2F_2)	۴.۵
۶۱	گراف مولکولی دی اکسیدکربن	۵.۵
۶۱	گراف مولکولی فازی CO_2 روش الف مثال (۱.۲.۵)	۶.۵
۶۲	گراف مولکولی فازی CO_2 روش ب مثال (۱.۲.۵)	۷.۵
۶۲	گراف مولکولی فازی C_2H_4	۸.۵
۶۴	گراف G	۱.۶
۶۹	نمایش مسئله ۳- مرکز	۲.۶
۶۹	یک شبکه	۳.۶

فهرست جداول

۱۲ طول پیوندهای مختلف N_2	۱.۱
۷۴ نمایه	۱.آ
۷۵ انرژی پیوند (واحد انرژی پیوند $kJmol^{-1}$ است)	۲.آ
۷۶ الکترونگاتیوی برخی عناصر	۳.آ
۷۶ شعاع اتمی برخی از عناصر (واحد شعاع اتمی pm است)	۴.آ
۷۷ طول پیوند (واحد طول پیوند A) است)	۵.آ
۷۷ معادل سازی بین نظریه گراف و علم شیمی	۶.آ

پیشگفتار

گراف‌های شیمیایی یکی از شاخه‌های علم ریاضی-شیمی است که در واقع ارتباط ریاضیات با دانش شیمی است، شاخه‌ای که با استفاده از نظریه گراف برای مدل سازی اختصاص داده شده است. مدل‌های اصلی در ریاضی-شیمی گراف‌های مولکولی و شاخص‌های توپولوژیکی می‌باشد. شاخص توپولوژیک مفهومی کاملاً گرافی بوده که کاربردهای مختلفی در نانو تکنولوژی، شیمی، علم مواد، داروسازی و دیگر عرصه‌ها دارد و به منظور مطالعه گراف‌های مولکولی در شیمی معرفی شده است. هدف اصلی این پایان‌نامه، بررسی کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌های مولکولی است. شاخص‌های توپولوژیکی علاوه بر اینکه در علم شیمی و بیولوژی کاربردهای فراوانی دارند در علوم ریاضی به‌ویژه در نظریه گراف بسیار مورد توجه هستند و به صورت گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. تا کنون چندین شاخص توپولوژیک تعریف شده‌اند که بسیاری از آن‌ها به عنوان ابزاری برای مشخص کردن خاصیت‌های شیمیایی و فیزیکی مولکول‌ها استفاده می‌شوند. در میان شاخص‌های توپولوژیکی شاخص وینر که یکی از قدیمی‌ترین شاخص‌های توپولوژیکی ساختارهای مولکولی است از جایگاه ویژه‌ای برخوردار است و می‌توان گفت که پرکاربردترین و مهمترین شاخص توپولوژیکی است. این شاخص که به اختصار با w نشان داده شده است در سال ۱۹۴۷ توسط شیمیدانی به نام هارلد وینر^۱ به منظور اثبات روابط بین خواص شیمی فیزیک آلکن‌ها و مشخص کردن ساختار توپولوژیکی گراف‌های مولکولی مطرح شد. او در این سال شاخص وینر را برای بدست آوردن نقطه‌ی جوش پارافین معرفی کرد. به زبان شیمی شاخص وینر، برابر با جمع همه‌ی کوتاه‌ترین مسیرهای زنجیره کربن-کربن در یک مولکول می‌باشد. یکی دیگر از شاخص‌های توپولوژیکی که به تازگی معرفی شده است، شاخص پادماکار-ایوان می‌باشد. این شاخص مخفف نام بنیان‌گذارانش پادماکار خادیکار و ایوان گاتمن است و به اختصار با PI نشان داده می‌شود. این شاخص از شاخص‌هایی است که در پیش‌بینی داروها و نیتروبنزن‌ها کاربرد زیادی دارد. بنابراین شاخص‌های توپولوژیکی مبتنی بر فاصله معرفی و محاسبه شاخص وینر در بحث گراف‌های ترکیبی بررسی می‌شود این گراف‌های ترکیبی توسط اعمال گراف‌ها از جمله پیوند، ترکیب، ضرب دکارتی و غیره روی دو یا چند گراف اولیه بدست می‌آید. هر یک از این گراف‌های ترکیبی می‌توانند یک ترکیب شیمیایی باشند که از مولکول‌های معمولی ساخته شده‌اند. به عنوان مثال

^۱ Harold Wiener

بنزن یک مولکول شیمیایی با شش کربن و شش هیدروژن است که به راحتی توسط یک شش ضلعی منتظم قابل نمایش می‌باشد. این مولکول در شیمی از اهمیت زیادی برخوردار است، زیرا مولکول‌هایی تحت عنوان بنزنوئیدها که مولکول‌های پرکاربردی هستند، از کنار هم قرار گرفتن این بنزن‌ها با پیوندهای مناسب ایجاد می‌شوند. در فصل اول تعاریف و مباحث مقدماتی از گراف، نظریه فازی و شیمی را آورده ایم فضای اشیاء مورد مطالعه در این پایان‌نامه فضای گراف‌های ساده متناهی، غیربدیهی هستند که در ادامه به طور دقیق تعریف می‌شوند. در فصل دوم سراغ شاخص‌های توپولوژیکی مبتنی بر فاصله می‌رویم ابتدا تعریف دقیقی از شاخص وینر و چند جمله‌ای آن، شاخص سگد و درجه فاصله گراف ارائه می‌دهیم و به معرفی شاخص پادماکار-ایوان می‌پردازیم و سپس شاخص وینر برخی از گراف‌ها و درخت‌ها را می‌یابیم و بعد از آن شاخص وینر یک درخت را محاسبه می‌کنیم. همچنین کران‌هایی مربوط به شاخص وینر را ارائه می‌کنیم در ادامه مفاهیم مربوط به ماتریس‌های توپولوژیکی را معرفی می‌کنیم. فصل سوم به توضیح اعمال گراف‌های پادماکار-ایوان، سپس به محاسبه‌ی شاخص‌های وینر برای چند عمل دودویی گراف‌ها می‌پردازیم. در ادامه درجه فاصله حاصلضرب کرنا گراف‌ها را ارائه می‌دهیم. در فصل چهارم فاصله فازی، گراف فازی مبتنی بر این فاصله و ماتریس فاصله فازی را معرفی و بررسی می‌کنیم. در فصل پنجم به بحث گراف‌های فازی می‌پردازیم. در ابتدا گراف مولکولی فازی را معرفی می‌کنیم و در ادامه دو روش ساخت گراف فازی را ارائه می‌دهیم همچنین شاخص وینر فازی مبتنی بر فاصله فازی جدید را معرفی و به ارائه چند مثال از آن می‌پردازیم. سپس شاخص پادماکار-ایوان فازی را معرفی می‌کنیم و مثالی از آن ارائه می‌دهیم. در فصل آخر نیز بعضی دیگر از کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌ها شامل مفاهیم مدل‌سازی، مسائل مکان‌یابی و تابع فاصله را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

فصل ۱

تعاریف و مباحث مقدماتی

در این فصل مفاهیم مقدماتی مورد نظر پایان نامه را بیان کرده و تقریباً تمامی تعاریفی که پیش نیاز فصل‌های بعد می‌باشد را ذکر می‌نماییم. تعاریف مربوط به نظریه گراف برگرفته از مرجع [۹] و [۴۳] و تعاریف مربوط به نظریه فازی برگرفته از مراجع [۴] و [۳۳] می‌باشد. همچنین مفاهیم و تعاریف مربوط به شیمی از مراجع [۲]، [۵] و [۳۰] می‌باشد.

۱.۱ مفاهیم مقدماتی در نظریه گراف

تعریف ۱.۱.۱. گراف^۱ سه‌تایی $G = (V(G), E(G), \psi_G)$ است به طوری که $V(G) \neq \emptyset$ مجموعه‌ای شامل رئوس، $E(G)$ مجموعه‌ای شامل یال‌ها و ψ_G یک نگاشت «وقوع» است که به هر عضو از $E(G)$ یک جفت نامرتب از رأس‌های G نسبت می‌دهد.

تعریف ۲.۱.۱. اگر e یال u و v رأس‌هایی از $V(G)$ باشند به طوری که $\psi_G(e) = uv$ ، آنگاه می‌گوئیم e را به v وصل می‌کند. در این حالت رأس‌های u و v را مجاور^۲ می‌نامند.

تعریف ۳.۱.۱. تعداد رئوس گراف G را مرتبه^۳ و تعداد یال‌های گراف G را اندازه^۴ می‌گویند و

^۱ Graph

^۲ Adjacent

^۳ Order

^۴ Size

به ترتیب با نمادهای $|V(G)|$ و $|E(G)|$ نشان می‌دهند.

تعریف ۴.۱.۱. اگر در گرافی بیش از یک یال دو رأس را به هم وصل کند، گراف را **گراف چندگانه**^۵ نامند و آن یال‌ها را نیز **یال‌های چندگانه**^۶ گویند.

تعریف ۵.۱.۱. **طوقه**^۷ در یک گراف، یالی است که دو رأس انتهایی‌اش بر هم منطبق باشند. یک کمان به شکل (u, u) یک طوقه روی رأس u است.

تعریف ۶.۱.۱. تعداد یال‌های مرتبط با رأس v در گراف G را **درجه**^۸ رأس v گوئیم و اگر یال مذکور طوقه باشد در محاسبه، درجه رأس دو بار به شمار می‌آید. درجه راس v را با $\deg(v)$ نشان می‌دهیم.

تعریف ۷.۱.۱. **گراف جهت‌دار**^۹ D یک سه تایی مرتب $(V(D), A(D), \psi_D)$ متشکل از مجموعه ناتهی $V(D)$ رأس‌ها، مجموعه $A(D)$ یال‌ها و نگاشت وقوع ψ_D است که به هر یال D یک جفت مرتب (نه لزوماً مجزا) از $V(D)$ را نسبت می‌دهد.

تعریف ۸.۱.۱. گراف H را **زیرگراف**^{۱۰} G نامیم هرگاه $V(H) \subseteq V(G)$ و $E(H) \subseteq E(G)$ و همچنین ψ_H برابر تحدید ψ_G به $E(H)$ باشد.

تعریف ۹.۱.۱. زیرگراف H از G را یک **زیرگراف القایی**^{۱۱} از G نامیم هرگاه هر یال G که انتهای آن در $V(H)$ باشد، یک یال در H نیز باشد. زیرگراف القایی از G با مجموعه رأس $U \subseteq V(G)$ را زیرگراف القا شده از G توسط U نامیم و با نماد $G[U]$ نمایش می‌دهیم.

تعریف ۱۰.۱.۱. گراف G را **منتظم**^{۱۲} گوئیم هرگاه $\Delta(G) = \delta(G) = k$ باشد و k - منتظم است هرگاه $\Delta(G) = \delta(G) = k$.

تعریف ۱۱.۱.۱. گرافی که به هر یال آن عدد یا وزنی نسبت داده شود **گراف وزن‌دار**^{۱۳} گویند.

تعریف ۱۲.۱.۱. گراف بدون طوقه و یال‌های چندگانه را **گراف ساده**^{۱۴} می‌نامند.

تعریف ۱۳.۱.۱. اگر در گراف ساده G هر زوج از رأس‌های متمایز G ، مجاور باشند، آن‌گاه G را **گراف کامل**^{۱۵} گوئیم. یک گراف کامل n رأسی را با K_n نشان می‌دهیم.

^۵Multigraph

^۶Multiple edges

^۷Loop

^۸Degree

^۹Directional graph

^{۱۰}Subgraph

^{۱۱}Induced subgraph

^{۱۲}Regular graph

^{۱۳}Weighted graph

^{۱۴}Simple graph

^{۱۵}Complete graph

تعریف ۱۴.۱.۱. اگر رأس گراف را با برچسب‌هایی مثل v_1, v_2, \dots, v_n و یا یال‌ها را با e_1, e_2, \dots, e_n از یک‌دیگر متمایز کنیم، گراف را **برچسب‌دار**^{۱۶} گوئیم.

تعریف ۱۵.۱.۱. یک **گشت**^{۱۷} در گراف G دنباله‌ی متناوب $W : v_0, e_1, v_1, e_2, \dots, e_r, v_r$ از رأس‌ها و یال‌ها است که شروع و پایان آن با رأس‌ها است و رأس‌های v_i و v_{i-1} انتهای یال e_i هستند. v_0 ابتدا و v_r انتهای W است. گوئیم گشت W رأس v_0 را به v_r وصل می‌کند. این گشت را نیز $v_0 - v_r$ گوئیم. حال گشت را **مسیر**^{۱۸} نامیم، هرگاه همه‌ی رأس‌ها متمایز باشند. اگر یال‌ها در گشت W متمایز باشند، W را یک **گذر**^{۱۹} می‌نامند.

تعریف ۱۶.۱.۱. یک **دور**^{۲۰} مسیر بسته‌ای به طول حداقل یک است که در آن رأس ابتدایی و رأس انتهایی بر یکدیگر منطبق هستند و هیچ رأس تکراری نداریم. یک دور n رأسی را با نماد C_n نمایش می‌دهیم.

تعریف ۱۷.۱.۱. فرض کنید G یک گراف باشد. دو رأس u و v از G را **همبند**^{۲۱} گوئیم هرگاه یک $u-v$ مسیر در G وجود داشته باشد. رابطه‌ی همبند بودن یک رابطه‌ی هم‌ارزی روی $V(G)$ است. فرض کنید V_1, V_2, \dots, V_w رده‌های هم‌ارزی باشند. زیرگراف‌های $G[V_1], G[V_2], \dots, G[V_w]$ را **مؤلفه**^{۲۲} های G گوئیم. در واقع مؤلفه گراف G زیرگراف همبند ماکسیمال از G است. اگر $w = 1$ ، گراف را همبند نامیم. در غیر اینصورت، گراف را ناهمبند با w مؤلفه گوئیم به عبارتی دیگر گراف G ناهمبند است اگر و تنها اگر بتوان مجموعه V را به دو مجموعه V_1 و V_2 چنان افراز کرد که هیچ یالی در E به صورت $\{xy\}$ که $x \in V_1$ و $y \in V_2$ وجود نداشته باشد.

تعریف ۱۸.۱.۱. یک **رأس برشی**^{۲۳} از یک گراف، رأسی است که حذف آن تعداد مؤلفه‌های گراف را افزایش دهد. نماد به کار رفته برای زیرگراف به دست آمده از حذف یک رأس $v \in V(G)$ ، $G - v$ می‌باشد.

تعریف ۱۹.۱.۱. یک **یال برشی**^{۲۴} از یک گراف، یالی است که حذف آن تعداد مؤلفه‌های گراف را افزایش دهد. نماد به کار رفته برای زیرگراف به دست آمده از حذف یک یال $e \in E(G)$ ، $G - e$ می‌باشد.

تعریف ۲۰.۱.۱. یک **بلوک**^{۲۵} از یک گراف G یک زیرگراف همبند ماکسیمال است که فاقد رأس برشی است (مؤلفه‌هایی که دور آن‌ها خط کشیده شده در شکل ۲.۱ بلوک هستند). اگر

^{۱۶}Labeled

^{۱۷}Walk

^{۱۸}Path

^{۱۹}Trail

^{۲۰}Cycle

^{۲۱}Connected

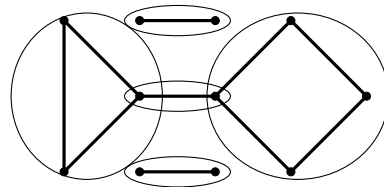
^{۲۲}Component

^{۲۳}Cut vertex

^{۲۴}Cut edge

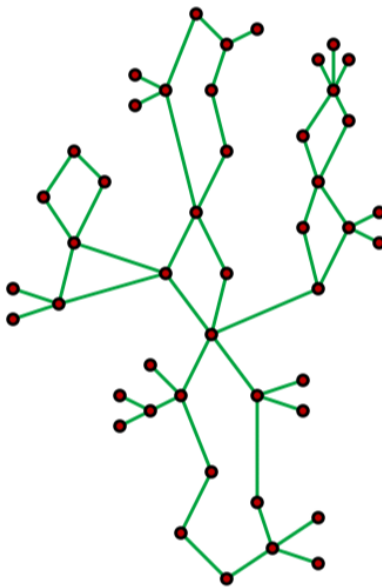
^{۲۵}Block

G همبند و فاقد رأس برشی باشد خود یک بلوک است. یک یال از یک دور بلوک است اگر و تنها اگر یال برشی از G باشد.



شکل ۱.۱: بلوک‌های گراف G

تعریف ۲۱.۱.۱. گراف همبند G که در آن هر دو دور حداکثر در یک رأس باهم مجاور هستند را **گراف کاکتوس**^{۲۶} می‌نامیم. می‌توان مشاهده کرد که گراف G کاکتوس است هرگاه هر بلوک G یک دور باشد.



شکل ۲.۱: یک گراف کاکتوس G

تعریف ۲۲.۱.۱. گرافی که یک رأس داشته باشد را **بدیهی**^{۲۷} گوئیم. یک مؤلفه (یاگراف) **غیربدیهی**^{۲۸} است اگر شامل یک یال باشد.

^{۲۶} cactus graph

^{۲۷} Trivial graph

^{۲۸} Nontrivial graph

تعریف ۲۳.۱.۱. فرض کنید گراف G گرافی n رأسی باشد. **مکمل** ^{۲۹} (متمم) گراف G را با \bar{G} نشان می‌دهیم و بدین صورت تعریف می‌کنیم $V(G) = V(\bar{G})$ و هر دو رأس مانند u و v در \bar{G} مجاورند اگر و تنها اگر در G مجاور نباشند. توجه کنید مکمل گراف کامل گراف تهی و مکمل گراف کامل دوبخشی، اجتماع دو گراف است.

تعریف ۲۴.۱.۱. **گراف دوبخشی** ^{۳۰} گرافی است که مجموعه رأس‌های آن به دو زیرمجموعه X و Y چنان افراز شود که یک سر تمام یال‌های G در X و سر دیگر آن‌ها در Y باشد. به عبارتی گراف G دوبخشی است اگر و تنها اگر فاقد دور فرد باشد.

تعریف ۲۵.۱.۱. یک گراف دوبخشی با بخش‌های X و Y که در آن هر رأس X به هر رأس Y وصل شده باشد، **گراف دوبخشی کامل** ^{۳۱} نامیده می‌شود. اگر $|X| = m$ و $|Y| = n$ ، آن‌گاه گراف دوبخشی کامل را با $K_{m,n}$ نمایش می‌دهیم.

تعریف ۲۶.۱.۱. یک گراف فاقد دور را **جنگل** ^{۳۲} گوئیم. یک جنگل همبند را یک **درخت** ^{۳۳} می‌نامیم. به عبارت دیگر یک گراف همبند فاقد دور را درخت گوئیم.

تعریف ۲۷.۱.۱. فرض کنید T یک درخت باشد رأس $v \in V(G)$ **نقطه انشعابی** ^{۳۴} از T نامیده می‌شود اگر $\deg_T(v) \geq 3$ اگر $\deg_T(v) = 1$ رأس v را **برگ** ^{۳۵} می‌نامیم.

تعریف ۲۸.۱.۱. مسیر با n رأس که دقیقاً دو رأس برگ هستند با P_n و **ستاره** ^{۳۶} که دقیقاً $n-1$ برگ و یک نقطه انشعابی دارد با S_n نمایش داده می‌شود.

تعریف ۲۹.۱.۱. یالی که بر یک رأس درجه یک واقع است را **یال آویزان** ^{۳۷} می‌نامیم.

تعریف ۳۰.۱.۱. رأسی از درجه یک در گراف G را **رأس پایانی** ^{۳۸} نامیم و مجموعه رئوس پایانی از گراف G را با نماد $End(G)$ نمایش می‌دهیم.

تعریف ۳۱.۱.۱. فرض کنید G یک گراف (گراف وزن دار) با مجموعه رئوس $V(G)$ و مجموعه یال‌های $E(G)$ باشد. **فاصله** ^{۳۹} $d_G(u, v)$ بین دو رأس $u, v \in V(G)$ کمترین طول (وزن) تمام $u-v$ مسیرها در G است. اگر هیچ مسیری بین u و v وجود نداشته باشد، تعریف می‌کنیم $d_G(u, v) = \infty$

^{۲۹}Complementary

^{۳۰}Bipartite graph

^{۳۱}Complete bipartite graph

^{۳۲}Forest

^{۳۳}Tree

^{۳۴}branching point

^{۳۵}Leaf

^{۳۶}Star

^{۳۷}Pendant edge

^{۳۸}End-vertex

^{۳۹}distance

تعریف ۳۲.۱.۱. کمیت d تعریف شده در فوق یک تابع از $V(G) \times V(G)$ به مجموعه اعداد صحیحی نامنفی است. در واقع **تابع فاصله** ^{۴۰} در گراف G یک متر روی این گراف تعریف می‌کند. یعنی d نگاشتی است که در شرایط زیر صدق می‌کند. اگر G یک گراف باشد آن‌گاه:

(الف) تابع فاصله نامنفی است. یعنی $d(u, v) \geq 0$

(ب) $d(u, v) = 0$ اگر و تنها اگر $u = v$

(ج) تابع فاصله متقارن است. یعنی برای هر دو رأس u و v از G $d(u, v) = d(v, u)$

(د) هر سه رأس u, v و w از G در نامساوی مثلثی زیر صدق می‌کند:

$$d(u, v) \leq d(u, w) + d(w, v)$$

تعریف ۳۳.۱.۱. بیشترین فاصله زوج رئوس در یک گراف همبند، **قطر** ^{۴۱} گراف G نامیده می‌شود و آن را با نماد $diam(G)$ نمایش می‌دهند.

تعریف ۳۴.۱.۱. فاصله بین رأس v و دورترین رأس از v را **خروج از مرکز** ^{۴۲} v گویند که با نماد $e(v)$ نشان داده می‌شود. به عبارتی دیگر

$$e(v) = \max\{d(u, v) | u \in V(G)\}$$

تعریف ۳۵.۱.۱. شعاع ^{۴۳} گراف همبند G به صورت $rdG = \min\{e(v) | v \in V(G)\}$ تعریف می‌شود.

تعریف ۳۶.۱.۱. مرکز ^{۴۴} گراف همبند G ، $C(G)$ زیرگراف القایی توسط رأس‌هایی از G است که خروج از مرکز آن‌ها برابر شعاع G باشد.

تعریف ۳۷.۱.۱. میانه ^{۴۵} میانه گراف G ، $M(G)$ عبارت است از زیرگراف القایی توسط مجموعه رأس‌هایی که کمترین فاصله را دارند.

تعریف ۳۸.۱.۱. دو گراف $G_1 = (V_1, E_1)$ و $G_2 = (V_2, E_2)$ را **یکریخت** ^{۴۶} گوئیم هرگاه تابع یک به یک و پوشای $f: V(G_1) \rightarrow V(G_2)$ موجود باشد که اگر $uv \in E(G_1)$ آن‌گاه $f(u)f(v) \in E(G_2)$. دو گراف یکریخت G_1 و G_2 را با نماد $G_1 \cong G_2$ نشان می‌دهیم. برای مثال گراف‌های شکل زیر یکریخت هستند. یک **خودریختی** ^{۴۷} گراف G یک یکریختی از G به خودش است.

^{۴۰} Distance function

^{۴۱} Diameter

^{۴۲} eccentric

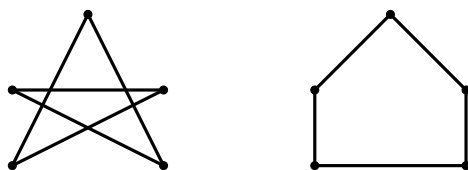
^{۴۳} radius

^{۴۴} Center

^{۴۵} Median

^{۴۶} Isomorphis

^{۴۷} Automorfism



شکل ۳.۱: دو گراف یکرخت

تعریف ۳۹.۱.۱. ماتریس مجاورت A ، گراف G ماتریس متقارن مربعی به صورت زیر است:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{اگر رأس } i \text{ مجاور رأس } j \text{ باشد} \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

تعریف ۴۰.۱.۱. ماتریس وقوع M ماتریسی برای تعریف توپولوژیکی یک گراف به صورت زیر است:

$$m_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{اگر رأس } i \text{ بر یال } j \text{ واقع باشد} \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

تعریف ۴۱.۱.۱. برای یک تابع مفروض $f(n)$ ، عبارت $O(f(n))$ عبارت است از مجموعه همه توابع پیچیدگی مانند $g(n)$ به طوری که یک عدد ثابت حقیقی مثبت c و یک عدد صحیح نامنفی N موجود باشد که

$$\forall n \geq N, \quad g(n) \leq cf(n)$$

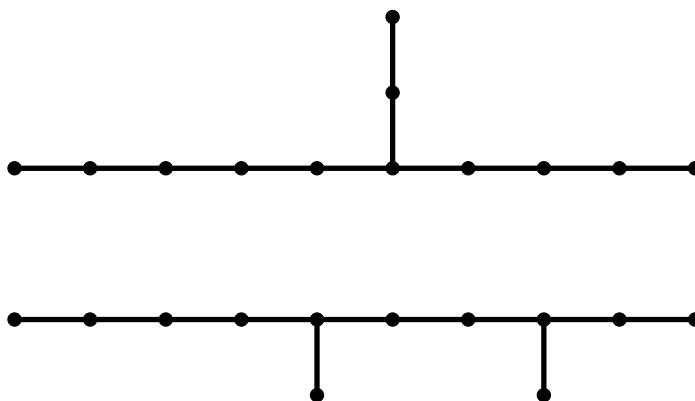
در این صورت اگر $g(n) \in O(f(n))$ آن گاه گفته می شود $g(n)$ از مرتبه ای بزرگ $f(n)$ است.

تعریف ۴۲.۱.۱. ثابت های گرافی^{۴۸} به خاصیت های مربوط به گراف گویند که تحت یکرختی گراف ها پایا هستند. ثابت های گراف وابسته به برچسب گذاری رئوس نیستند. ثابت های گرافی می تواند یک مجموعه یا یک ماتریس و یا یک چند جمله ای باشد.

تعریف ۴۳.۱.۱. به ثابت گرافی که یک عدد حقیقی باشد شاخص توپولوژیکی^{۴۹} گفته می شود. ممکن است دو گراف دارای شاخص توپولوژیک یکسان باشند ولی یکرخت نباشند به عنوان مثال دو گراف غیر یکرخت در شکل ۴.۱ دارای شاخص وینر یکسان $w = ۲۴۶$ هستند.

^{۴۸}Graph constants

^{۴۹}Topological index



شکل ۴.۱: گراف‌های غیر یکرخیخت با شاخص وینر برابر

۲.۱ مفاهیم مقدماتی در نظریه فازی

تعریف ۱.۲.۱. اکثر اتفاقات و رویدادهایی که در زندگی روزمره برای ما اتفاق می‌افتد دارای ابهام می‌باشند. ابهام ممکن است با شکل، مکان، رنگ، ترکیب و محتوی رویدادها همراه باشد و معناها، چه بودن آنها را تشریح می‌کنند. یعنی انسان با استفاده از معانی مختلف، چه بودن و ماهیت آنها را تشریح و توصیف می‌کند. نظریه **مجموعه‌های فازی** برای اولین بار توسط پروفسور لطفی‌زاده در سال ۱۹۶۴ مطرح گردید. و ایده آن با این عبارت توسط ایشان ایجاد شد :

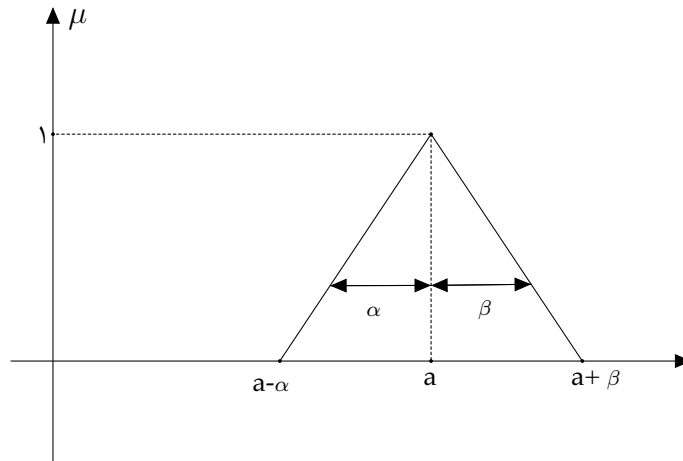
«ما نیازمند یک نوع مختلف از ریاضیات هستیم تا بتوانیم ابهامات و عدم دقت رویدادها را مدل‌سازی نماییم مدلی که متفاوت از نظریه احتمالات می‌باشد.»
نظریه فازی برای بیان و تشریح عدم قطعیت و عدم دقت در رویدادها بکار می‌رود. و کلید اصلی نظریه فازی از منطق چند ارزشی به‌وجود آمده است.

تعریف ۲.۲.۱. فرض کنید X مجموعه‌ای از عناصر x باشد، در این‌صورت مجموعه‌ای از زوج‌های مرتب $\tilde{A} = \{(x, \mu_{\tilde{A}}(x)) / x \in X\}$ که در آن $\mu_{\tilde{A}} : X \rightarrow [0, 1]$ است، یک مجموعه فازی Δ° نامیده می‌شود.

تعریف ۳.۲.۱. **نمایش مثلثی مجموعه‌های فازی** نمودار این نمایش به‌صورت مثلث است که مقدار عضویت عضو مطابق با رأس در آن، برابر ۱ است.
فرض کنیم \tilde{A} یک مجموعه فازی باشد در این‌صورت

$$\mu_{\tilde{A}}(x) = \begin{cases} 1 - \frac{a-x}{\alpha} & a - \alpha \leq x < a \\ 1 - \frac{x-a}{\beta} & a < x \leq a + \beta \\ 0 & O.W \end{cases} \quad (1.1)$$

نمودار مجموعه فازی در حالت کلی به صورت شکل ۵.۱ است که a میانگین، α طول قاعده چپ و β طول قاعده راست نام دارند. با این ویژگی‌ها این مجموعه فازی را به صورت (a, α, β) نشان می‌دهند یعنی $\tilde{A} = (a, \alpha, \beta)$.



شکل ۵.۱: نمایش مثلثی مجموعه فازی

تعریف ۴.۲.۱

مثال ۱.۲.۱. عدد مثلثی فازی $\tilde{A} = (۲۰, ۱۵۰, ۱۹۵)$ [۱]:

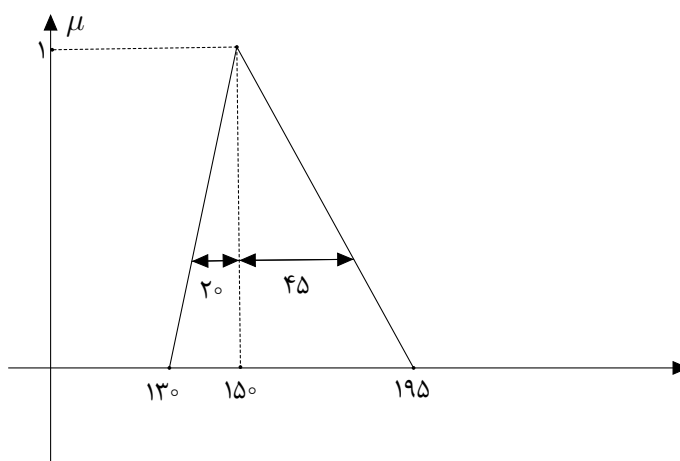
$$\mu_{\tilde{A}}(x) = \begin{cases} 1 - \frac{۱۵۰-x}{۲۰} & ۱۳۰ \leq x < ۱۵۰ \\ 1 - \frac{x-۱۵۰}{۴۵} & ۱۵۰ < x \leq ۱۹۵ \\ ۰ & O.W \end{cases}$$

ونمایش نموداری آن به صورت شکل ۶.۱ است. مقادیر عضویت چند مقدار با توجه به این تابع عضویت به صورت زیر است:

$$\mu_{\tilde{A}}(۱۳۵) = 1 - \frac{۱۵۰ - ۱۳۵}{۲۰} = ۰,۲۵, \mu_{\tilde{A}}(۱۷۰) = 1 - \frac{۱۷۰ - ۱۵۰}{۴۵} = ۰,۴۴, \mu_{\tilde{A}}(۱۵۲) = 1 - \frac{۱۵۲ - ۱۵۰}{۴۵} = ۰,۴۰$$

تعریف ۵.۲.۱. α -برش یک مجموعه فازی: برای مجموعه فازی \tilde{A} با تابع عضویت $\mu_{\tilde{A}}$ ، α -برش آن به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu_{\alpha} = \{x | \mu_{\tilde{A}}(x) > \alpha, \alpha \in [۰, ۱)\}$$



شکل ۶.۱: نمایش مثلثی مجموعه فازی $\tilde{A} = (۲۰, ۱۵۰, ۱۹۵)$

۳.۱ مفاهیم مقدماتی در علم شیمی

تعریف ۱.۳.۱. مولکول^{۵۲} کوچکترین ذره یک ماده شیمیایی خالص است که ویژگی‌های آن ماده را دارد. یک مولکول از دو یا چند اتم تشکیل شده است که با پیوند شیمیایی به یکدیگر متصل‌اند.

تعریف ۲.۳.۱. به نیروهایی که اتم‌ها و یا مولکول‌ها را کنار یکدیگر نگه می‌دارد پیوند شیمیایی^{۵۳} می‌گویند که به دو دسته پیوندهای میان‌اتمی (مانند پیوند کوالانسی، پیوندیونی و...) و پیوندهای بین‌مولکولی (مانند پیوند هیدروژنی، پیوند واندروالسی و...) تقسیم می‌شوند.

تعریف ۳.۳.۱. پیوند کوالانسی^{۵۴} پیوندی است که در آن اتم‌ها، الکترون‌های خود را برای رسیدن به حالت اکتان (هشت تایی) پایدار به اشتراک می‌گذارند. در این پایان‌نامه منظور از پیوند بین اتم‌ها، پیوند کوالانسی است.

تعریف ۴.۳.۱. پیوند یگانه پیوندی است که در آن اتم‌های پیوند دهنده هر کدام یک الکترون برای تشکیل پیوند به اشتراک می‌گذارند و با یک خط منفرد نشان داده می‌شود.

تعریف ۵.۳.۱. پیوند دوگانه پیوندی است که در آن اتم‌های پیوند دهنده، هر کدام دو الکترون برای تشکیل پیوند به اشتراک می‌گذارند و با علامت دو خط منفرد به‌روی هم (علامت مساوی) به نمایش گذاشته می‌شود مانند:



^{۵۲} molecule

^{۵۳} chemical bond

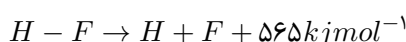
^{۵۴} covalant bond

تعریف ۶.۳.۱. پیوند سه‌گانه پیوندی است که در آن اتم‌های پیونددهنده، سه الکترون برای تشکیل پیوند به اشتراک می‌گذارند و با سه خط منفرد به‌روی یکدیگر نشان داده می‌شود مانند



تعریف ۷.۳.۱. در حالت ساده به تعداد جفت الکترون‌هایی که برای تشکیل پیوند توسط دو اتم به اشتراک گذاشته می‌شوند، مرتبه پیوند^{۵۵} گفته می‌شود که شامل یک، دو و سه است.

تعریف ۸.۳.۱. به طور کلی انرژی لازم برای شکستن یک پیوند، انرژی پیوند^{۵۶} نامیده می‌شود و واحد آن $kJmol^{-1}$ است. برای مثال داریم:



انرژی پیوند معمولاً به عنوان انرژی متوسط پیوند شناخته می‌شود. انرژی متوسط پیوند بعضی از پیوندها (مهم و پر تکرار) در جدول شماره ۲.آ پیوست نگاشته شده است.

تعریف ۹.۳.۱. الکترونگاتیوی^{۵۷} هر عنصر میزان تمایل آن عنصر به جذب الکترون‌های پیوندی به سمت خود در یک پیوند است. الکترونگاتیوی یک کمیت بدون واحد برای عناصر است. در جدول تناوبی الکترونگاتیوی عناصر در یک دوره از چپ به راست افزایش و در یک گروه از بالا به پایین کاهش می‌یابد. در جدول شماره ۳.آ پیوست، الکترونگاتیوی چند عنصر مهم نگاشته شده است. بیشترین الکترونگاتیوی در بین عناصر مربوط به فلئور (F) به میزان ۳/۹۸ و کمترین مقدار، مربوط به فرانسیم (Fr) به میزان ۰/۷ است.

تعریف ۱۰.۳.۱. در یک اتم به مقدار متوسط فاصله بین هسته اتم و ابرالکترونی آن شعاع اتمی^{۵۸} گفته می‌شود که واحد آن pm (پیکومتر) است. شعاع اتمی عناصر مختلف در جدول شماره ۴.آ پیوست نگاشته شده است.

تعریف ۱۱.۳.۱. در یک پیوند به فاصله‌های بین هسته‌های دو اتم پیوندی طول پیوند^{۵۹} می‌گویند و واحد آن آنگستروم (A) است. برای مثال طول پیوند $I - H$ برابر با $1/61A$ است. طول پیوند عناصر مختلف در جدول شماره ۵.آ پیوست نگاشته شده است.

میزان طول پیوند به عوامل مختلفی بستگی دارد. سه عامل از این عوامل به‌صورت زیر هستند:

۱. میزان اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم پیوندی: هر چه اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم پیوندی بیشتر باشد، اتم الکترونگاتیوی‌تر با شدت بیشتری الکترون‌های پیوندی را جذب کرده و طول پیوند کوتاه‌تر می‌شود و انرژی پیوند افزایش می‌یابد.

^{۵۵} bond order

^{۵۶} Bond energy

^{۵۷} electronegativity

^{۵۸} atomic radius

^{۵۹} Bond length

۲. اندازه اتم‌ها: هر چه اندازه اتم‌ها بزرگتر باشد، طول پیوند کوتاه‌تر و انرژی لازم برای شکستن پیوند بیشتر است.

۳. مرتبه پیوند: هرچه مرتبه پیوند بیشتر باشد، طول پیوند کوتاه‌تر و انرژی لازم برای شکستن پیوند بیشتر است. برای مثال برای پیوند N_2 داریم:

پیوند	طول پیوند (Å)
$N - N$	۱٫۴۵
$N = N$	۱٫۲۳
$N \equiv N$	۱٫۰۹

جدول ۱.۱: طول پیوندهای مختلف N_2

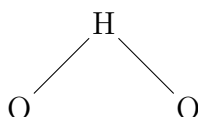
تعریف ۱۲.۳.۱. ساختار مولکولی^{۶۰} به شکل واقعی یک مولکول در علم شیمی می‌گویند که معمولاً به صورت سه‌بعدی است.

تعریف ۱۳.۳.۱. آلکان^{۶۱} هیدروکربن‌هایی هستند که در آن هر اتم کربن با ۴ پیوند کوالانسی به ۴ اتم هیدروژن یا کربن می‌چسبد. در واقع پیوند دو یا سه‌گانه بین اتم‌های کربن وجود ندارد.

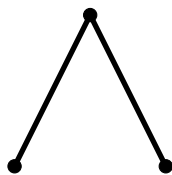
تعریف ۱۴.۳.۱. بسیاری از مولکول‌ها و ترکیبات شیمیایی به شکل گراف می‌باشند که هر رأس نمایشگر یک اتم از مولکول است و همچنین پیوند کوالانسی بین اتم‌ها متناظر با یال‌های موجود بین رأس‌های گراف می‌باشد. این گراف به‌دست آمده از ترکیبات شیمیایی، **گراف مولکولی**^{۶۲} نامیده می‌شود. یک گراف مولکولی می‌تواند یک مسیر، یک درخت یا درحالت کلی یک گراف باشد، که شبیه سازی شده یک مولکول به صورت دوبعدی است.

مثال ۱.۳.۱. گراف ساختاری چند مولکول

مولکول آب H_2O

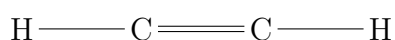


شکل ۷.۱: ساختار مولکولی آب



شکل ۸.۱: گراف مولکولی آب

مولکول استیلن C_2H_2 ^{۶۳}



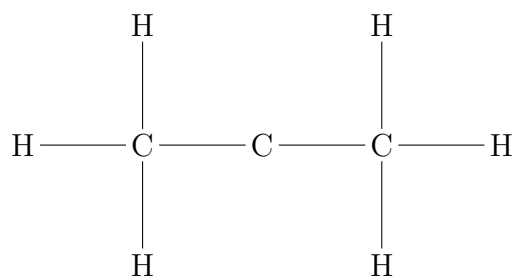
شکل ۹.۱: ساختار مولکولی استیلن

در گراف ساختاری این مولکول پیوند سه‌گانه به یک یال تبدیل می‌شود



شکل ۱۰.۱: گراف مولکولی استیلن

مولکول پروپان C_3H_8 ^{۶۴}



شکل ۱۱.۱: ساختار مولکولی پروپان

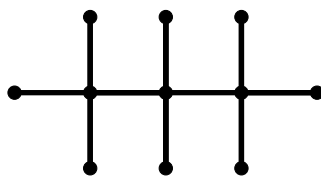
^{۶۰} Molecular structure

^{۶۱} Alkan

^{۶۲} Molecular graph

^{۶۳} acetelen

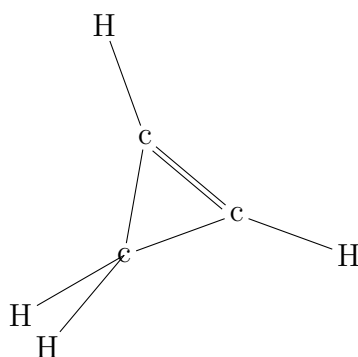
^{۶۴} Propane



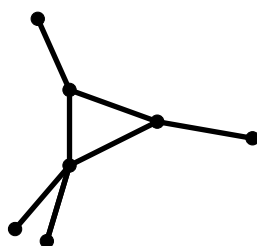
شکل ۱۲.۱: گراف مولکولی پروپان

مولکول سیکلو پروپین C_3H_4 ^{۶۵}

در گراف ساختاری سیکلو پروپین علاوه بر تبدیل پیوند دوگانه به یک یال، حلقه آن در ساختار مولکولی به یک دور در گراف ساختاری تبدیل شده است.



شکل ۱۳.۱: ساختار مولکولی سیکلو پروپین



شکل ۱۴.۱: گراف مولکولی سیکلو پروپین

معادل سازی بین نظریه گراف و علم شیمی در جدول شماره ۶.آ پیوست نگاشته شده است.

^{۶۵}Cyclopropen

فصل ۲

شاخص‌های توپولوژیکی مبتنی بر فاصله

در این فصل ابتدا به معرفی و محاسبه برخی شاخص‌های توپولوژیکی می‌پردازیم، همچنین گراف‌هایی با توزیع فاصله یکسان را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در ادامه نیز به مفاهیم مربوط به ماتریس‌های توپولوژیکی می‌پردازیم.

۱.۲ برخی از شاخص‌های توپولوژیکی فاصله

تعریف ۱.۱.۲. شاخص وینر^۱ $W(G)$ از گراف همبند G به عنوان مجموع فاصله‌های بین تمام جفت رأس‌های G تعریف می‌شود [۳۷]:

$$W = W(G) = \sum_{u,v \subseteq V(G)} d_G(u,v)$$

که در آن $V(G)$ مجموعه رئوس G و $d_G(u,v)$ فاصله بین رئوس u و v در G است.

فاصله میانگین^۲ $\mu(G)$ بین رئوس G به صورت $\mu(G) = \frac{W(G)}{|V(G)|}$ معرفی می‌شود [۳۷].

^۱ Wiener index

^۲ average distance

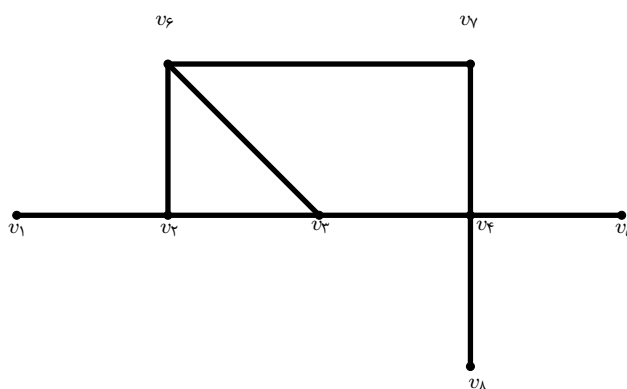
تعریف ۲.۱.۲. فاصله $d_G(v)$ از رأس v مجموع تمام فاصله‌های بین v و همه رئوس G است. بنابراین در ابتدا می‌توانیم شاخص وینر را به وضوح از مسیر متفاوت زیر معرفی کنیم [۳۷]:

$$W(G) = \frac{1}{\#} \sum_{v \in V(G)} d_G(v)$$

که وجود ضریب $\frac{1}{\#}$ به این دلیل است که هر مسیر بین u و v در $d_G(u)$ و هم در $d_G(v)$ محاسبه می‌شود.

مثال ۱.۱.۲. فرض کنید G گراف نشان داده‌شده در تصویر ۱.۲ باشد. به‌طور مثال فاصله بین v_6 و v_4 با استفاده از مسیر (v_6, v_7, v_4) ، $d_G(v_6, v_4) = 2$ است. همچنین فاصله از v_1 برابر $d_G(v_1) = 1+2+3+4+2+3+4 = 19$ است. شاخص وینر G به‌صورت زیر محاسبه می‌شود [۳۷]:

$$\begin{aligned} W(G) &= \sum_{i=1}^7 \sum_{j=i+1}^8 d_G(v_i, v_j) = (1+2+3+4+2+3+4) + (1+2+3+1+2+3) \\ &+ (1+2+1+2+2) + (1+2+1+1) + (3+2+2) + (1+3) + 2 = 57 \end{aligned}$$



شکل ۱.۲: گراف G مثال ۱.۲

بنابراین فاصله میانگین G به صورت زیر است:

$$\mu(G) = \frac{57}{\binom{8}{2}} = \frac{57}{28} \approx 2.0357$$

تعریف ۳.۱.۲. چند جمله‌ای هوسیا $H(G)$ از گراف همبند G توسط هوسیا^۳ معرفی شد که آنرا چند جمله‌ای وینر^۴ از یک گراف نامگذاری کرد [۳۴].

$$H = H(G, x) = \sum_{k=1}^d d(G, k) x^k$$

که d قطر گراف G و $d(G, k)x^k$ تعداد جفت رئوس در k فاصله از یکدیگر است.

^۳Hosoya

^۴Wiener polynomial

تعریف ۴.۱.۲. دنباله $(d(G, 1), d(G, 2), \dots)$ را **توزیع فاصله گراف** G می‌نامند و آن را با $Dd(G)$ نمایش می‌دهند که یکی از مهم‌ترین شاخص‌های توپولوژیکی برای گراف‌های مولکولی است.

قضیه ۱.۱.۲. اگر $G, G^* \in \zeta_{n,m}$ و $diam(G) = diam(G^*) = 2$ آنگاه $Dd(G) = Dd(G^*)$.

برهان. اگر $G, G^* \in \zeta_{n,m}$ و $diam(G) = diam(G^*) = 2$ در این صورت:

$$d(G, 1) = d(G^*, 1) = m, d(G, 2) = d(G^*, 2) = \binom{n}{2} - m$$

و برای $k \geq 3$ داریم $d(G, k) = d(G^*, k) = 0$. بنابراین $Dd(G) = Dd(G^*)$. \square

مثال ۲.۱.۲. برای مثال توزیع فاصله برای گراف‌های شکل ۲.۲ به صورت زیر است:

$$Dd(T_1) = (\lambda, 14, 6, 8), Dd(T_1^*) = (\lambda, 13, 9, 5, 1)$$

$$Dd(T_2) = (\lambda, 10, 8, 5, 4, 1), Dd(T_2^*) = (\lambda, 11, 6, 5, 6)$$

تعریف ۵.۱.۲. **درجه فاصله گراف** G نخستین بار در ارتباط با کاربردهای شیمیایی خاص توسط دوبراینین و کوچه‌توا^۷ [۲۰] در ۱۹۹۴ مورد توجه قرار گرفت، همچنین در زمان یکسانی گاتمن^۸ [۳۹] شاخص درجه فاصله را به عنوان نسخه وزنی شاخص وینر، شاخص شولتز نامید که این نام‌گذاری بیشتر مورد توجه قرار گرفت. درجه فاصله گراف G به صورت $DD(G)$ نمایش داده می‌شود و به صورت

$$DD(G) = \frac{1}{2} \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v)[d_G(u) + d_G(v)]$$

معرفی می‌شود. $d_G(u)$ و $d_G(v)$ درجه رئوس u و v گراف G است.

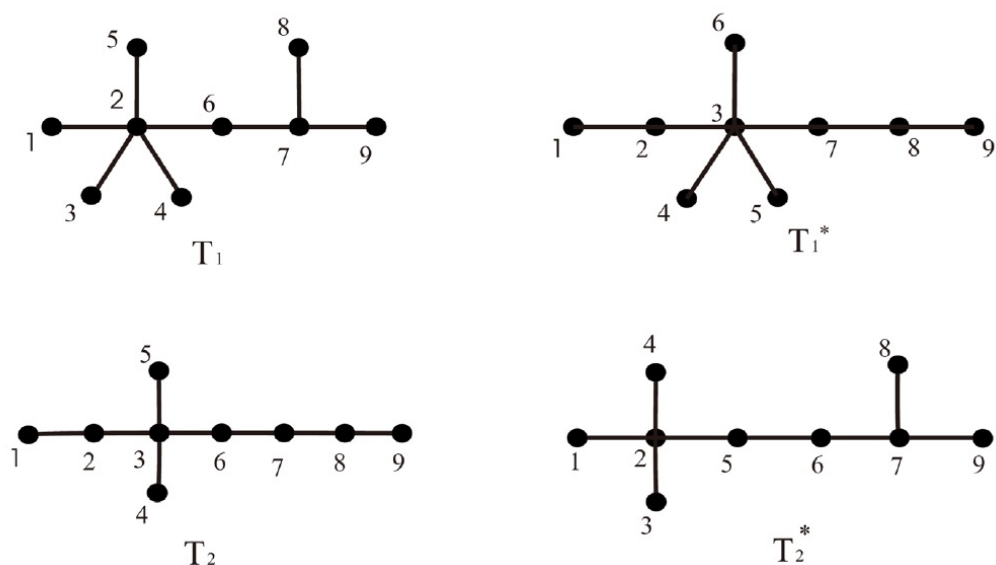
تعریف ۶.۱.۲. برای یال $e = uv \in E(G)$ فاصله e از رأس w را مینیمم فاصله دو انتهای آن از w در نظر می‌گیریم، یعنی $d(w, e) := \min\{d(w, u), d(w, v)\}$. فرض کنید تعداد رأس‌هایی که به رأس u نزدیکتر از رأس v است را با $n_u(e|G)$ و تعداد رئوس نزدیکتر به v نسبت به u را با $n_v(e|G)$ نمایش دهیم. بنابراین $n_u(e|G) := |\{a \in V(G) | d(u, a) < d(v, a)\}|$ و به طور مشابه $n_v(e|G) := |\{a \in V(G) | d(v, a) < d(u, a)\}|$. [۴۲]

^۵ distance distribution

^۶ degree distance

^۷ Dobrynin and Kochetova

^۸ Gutman



شکل ۲.۲:

تعریف ۷.۱.۲. شاخص پادماکار-ایوان^۹ (PI) و شاخص پادماکار-ایوان رأسی^{۱۰} (PI_v) به صورت زیر تعریف می‌شوند [۴۲]:

$$PI(G) := \sum_{e \in E(G)} m_e(G) \text{ و } PI_v(G) := \sum_{e \in E(G)} n_e(G)$$

که $m_e(G) = m_u(e|G) + m_v(e|G)$ و $n_e(G) = n_u(e|G) + n_v(e|G)$ همچنین $m_u(e|G)$ تعداد یال‌هایی از G است که فاصله آن‌ها به رأس u نزدیکتر از فاصله آن‌ها به رأس v است.

ملاحظه ۱.۱.۲. توجه کنید رؤس با فاصله مساوی از رؤس انتهائی یال e شمارش نمی‌شود.

تعریف ۸.۱.۲. شاخص سگد^{۱۱} گراف G به صورت $Sz(G) := \sum_{e \in E(G)} n_u(e|G)n_v(e|G)$ است [۲۵].

۲.۲ بررسی شاخص وینر برخی از گراف‌ها

تمام قضایا، تعاریف و مفاهیم این بخش از مرجع [۳۷] است.

لم ۱.۲.۲. فرض کنید G گراف همبند با $|V(G)| = n$ و $|E(G)| = m$ باشد بعلاوه فرض کنید طول تمام مسیرهای در G کمتر از ۳ باشد، بنابراین $W(G) = n(n-1) - m$.

^۹Padmakar-Ivan

^{۱۰}vertex PI index

^{۱۱}Szeged index

برهان. از آنجاکه G شامل m یال است، m جفت از رئوس با فاصله ۱ وجود دارد. بعلاوه ما فرض کردیم، که طول تمام مسیره‌ها کمتر از ۳ است، بنابراین $m - \binom{n}{2}$ جفت رأس باقیمانده فاصله ۲ دارند. پس

$$W(G) = 1 \times m + 2 \left[\binom{n}{2} - m \right] = n(n-1) - m$$

□

قضیه ۱.۲.۲. شاخص وینر دور C_n به صورت زیر است:

$$W(C_n) = \begin{cases} \frac{n^2}{4} & \text{اگر } n \text{ زوج باشد} \\ \frac{n^2-n}{4} & \text{اگر } n \text{ فرد باشد} \end{cases}$$

برهان. ابتدا مجموع فاصله رئوس از یک رأس ثابت مانند v_1 را محاسبه می‌کنیم.

- فاصله رأس v_1 از رئوس v_2 تا v_k به ترتیب برابر ۱ تا $k-1$ می‌باشد.
- فاصله رأس v_1 از رئوس v_{k+1} تا v_n به ترتیب برابر $k-1$ تا ۱ می‌باشد.
- فاصله رأس v_1 تا رأس v_{k+1} برابر k می‌باشد.

لذا داریم:

$$\sum_{i=1}^n d(v_1, v_n) = 0 + 1 + \dots + (k-1) + k + (k-1) + \dots + 1 = k^2$$

بنابراین

$$\begin{aligned} W(G) &= \frac{1}{2} \sum_j \sum_i d(v_j, v_i) \\ &= \frac{1}{2} k \cdot k^2 \\ &= k^3 \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^3 \\ &= \frac{n^3}{8}. \end{aligned}$$

به همین ترتیب برای دور فرد داریم:

$$\sum_{i=1}^n d(v_1, v_n) = 0 + 1 + \dots + (k-1) + k + k + (k-1) + \dots + 1 = k^2 + k$$

در این صورت اندیس وینر به صورت زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned} W(G) &= \frac{1}{\gamma} \sum_j \sum_i d(v_1, v_n) \\ &= \frac{1}{\gamma} n(k^\gamma + k) \\ &= \frac{1}{\gamma} n \left\{ \left(\frac{n-1}{\gamma} \right)^\gamma + \frac{n-1}{\gamma} \right\} \\ &= \frac{n^\gamma - n}{\gamma} \end{aligned}$$

□

ملاحظه ۱.۲.۲. شاخص وینر مربوط به گراف‌های مولکولی به صورت ستاره و مسیر P_n به ترتیب زیر است:

$$W(S_n) = \underbrace{(n-1)}_{\text{نقطه انشعابی به برگ‌ها}} + \underbrace{2 \sum_{i=1}^{n-2} i}_{\text{بین هر جفت از برگ‌ها}} = (n-1)^2$$

$$W(P_n) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{i-1} j = \sum_{i=1}^n \binom{i}{2} = \binom{n+1}{3}$$

شاخص وینر گراف مولکولی به صورت گراف کامل K_n با n رأس به صورت زیر است:

$$W(K_n) = \sum_{i=1}^{n-1} i = \frac{n(n-1)}{2}$$

همچنین

$$W(K_{m,n}) = (m+n)^2 - mn - m - n.$$

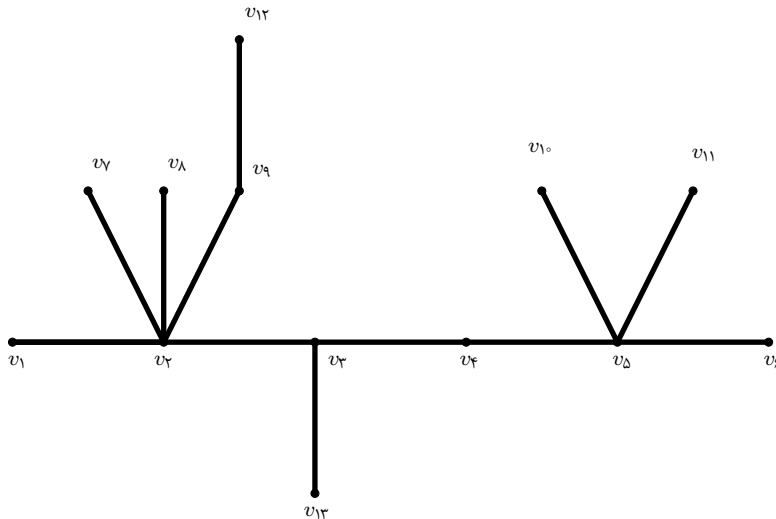
تعریف ۱.۲.۲. فرض کنید T یک درخت باشد یک **بخش S** ^{۱۲} از T یک مسیر-زیردرخت است که در آن رئوس پایانی نقاط انشعابی یا برگ‌ها و رئوس میانی v ، درجه $\deg_T(v) = 2$ دارند. **طول بخش S** ^{۱۳} برابر تعداد یال‌های S است و آن را با l_S نمایش می‌دهیم. مجموعه رئوس پایانی یک بخش $SP(T)$ نامیده می‌شود. S^* یک زیر بخش S شامل l_S رأس می‌باشد به طور مثال $S^* = S \setminus \{v\}$ که v رأس پایانی از S است و S^* را S ، بدون هر دو رأس پایانی فرض می‌کنیم [۳۷].

ملاحظه ۲.۲.۲. هر یال از یک درخت T با n رأس دقیقاً در یک بخش قرار دارد بنابراین واضح است که [۳۷]

$$\sum_{S \text{ بخشی از } T} l_S = n - 1.$$

^{۱۲} segment

^{۱۳} length segment



شکل ۳.۲: درخت مثال (۱.۲.۲)

مثال ۱.۲.۲. درخت T نشان داده شده در شکل ۳.۲ را در نظر بگیرید. به عنوان مثال v_1 برگ و v_2 نقطه انشعابی است اما v_9 نه برگ و نه نقطه انشعابی است بنابراین $deg_T(v_9) = 2$. به عنوان مثال $S_1(v_2, v_9, v_{12})$ را با طول $l_{S_1} = 2$ بخشی از T در نظر بگیرید. بنابراین S_1^* هر یک از دو مسیر (v_2, v_9) و (v_9, v_{12}) می تواند باشد و S_1^* مسیری شامل تنها رأس v_9 است [۳۷].

تعریف ۲.۲.۲. فرض کنید $e = (u, v) \in E(T)$ یالی از درخت T باشد. زیردرخت‌های T_v و T_u اجزای همبند T شامل v و u هستند. مرتبه این زیردرخت‌ها به ترتیب به صورت زیر هستند:

$$n_u(e|T) = |V(T_u)| \text{ و } n_v(e|T) = |V(T_v)|$$

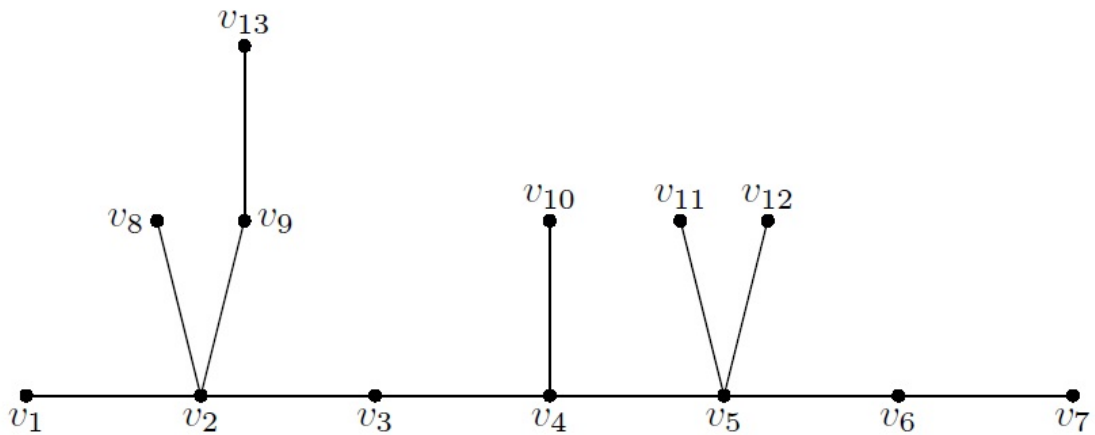
قضیه ۲.۲.۲. فرض کنید T یک درخت باشد در این صورت:

$$W(T) = \sum_{e \in E(T)} n_u(e|T)n_v(e|T) \quad (1.2)$$

برهان. مسیر منحصر به فرد بین رئوس $x \in V(T_u)$ و $y \in V(T_v)$ شامل e در T را در نظر بگیرید. اگر x و y به صورتی متفاوت انتخاب شوند e قسمتی از مسیر بین آن‌ها نیست. بنابراین $n_u(e|T)n_v(e|T)$ دقیقاً تعداد دفعاتی است که e به مسیر بین دو رأس T تعلق دارد. بنابراین مجموع $n_u(e|T)n_v(e|T)$ روی همه یال‌های T شاخص وینر درخت T است. \square

مثال ۲.۲.۲. اگر یال $e = (u, v)$ از یک درخت پل باشد. بدیهی است که $n_u(e|T) + n_v(e|T) = n$ و بنابراین کافی است تنها رئوس در یک طرف e را بشماریم. بنابراین با در نظر گرفتن قضیه ۲.۲.۲ به راحتی می توانیم شاخص وینر درخت T از مرتبه $n = 13$ در شکل ۴.۲ را محاسبه کنیم.

$$W(T) = 7 \cdot 1 \cdot 12 + 2 \cdot 2 \cdot 11 + 2 \cdot 5 \cdot 8 + 1 \cdot 6 \cdot 7 + = 250.$$



شکل ۴.۲: درخت دلخواه T

قضیه ۳.۲.۲. فرض کنید T درختی با n رأس باشد. بنابراین شاخص وینر می‌تواند از روش زیر محاسبه شود:

$$W(T) = \frac{1}{4} [n^2(n-1) - \sum_{(u,v) \in E(T)} [d_T(v) - d_T(u)]^2]$$

برهان. فرض کنید: $n_e(T) = n_u(e|T) + n_v(e|T)$ بعلاوه ما داریم:

$$\begin{aligned} d_T(v) - d_T(u) &= \left(\sum_{x \in B_u(e)} d_T(v, x) + \sum_{y \in B_v(e)} d_T(v, y) \right) \\ &\quad - \left(\sum_{x \in B_u(e)} d_T(u, x) + \sum_{y \in B_u(e)} d_T(u, y) \right) \\ &= \sum_{x \in B_u(e)} (d_T(v, x) - d_T(u, x)) - \sum_{y \in B_v(e)} (d_T(u, y) - d_T(v, y)) \\ &= \sum_{x \in B_u(e)} 1 - \sum_{y \in B_v(e)} 1 \\ &= n_u(e|T) - n_v(e|T) \end{aligned}$$

که

$$B_u(e) = \{x \in V(G) : d_G(x, u) < d_G(x, v)\}$$

$$B_v(e) = \{y \in V(G) : d_G(y, v) < d_G(y, u)\}$$

بنابراین ما معادله‌های $n_u(e|T) = n + (d_T(v) - d_T(u))$ و $n_v(e|T) = n - (d_T(v) - d_T(u))$ را داریم. با در نظر گرفتن معادله (۱.۲) به روابط زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} W(T) &= \sum_{(u,v) \in E(T)} \frac{1}{4} (n + d_T(v) - d_T(u)) \frac{1}{4} (n - d_T(v) + d_T(u)) \\ &= \sum_{(u,v) \in E(T)} [n^2 - (d_T(v) - d_T(u))^2] \\ &= \frac{1}{4} [n^2(n-1) - \sum_{(u,v) \in E(T)} (d_T(v) - d_T(u))^2] \end{aligned}$$

□ که اثبات کامل می‌شود.

مثال ۳.۲.۲. درخت شکل ۴.۲ را در نظر بگیرید، با به کار بردن قضیه (۳.۲.۲) و با استفاده از رابطه $d_T(v) - d_T(u) = n_u(e|T) - n_v(e|T)$ همانند آنچه در اثبات قضیه نشان دادیم که این روش محاسبه را به مراتب ساده‌تر می‌کند، داریم:

$$W(T) = \frac{1}{4} [13^2 \cdot 12 - (7 \cdot 11^2 + 2 \cdot 9^2 + 2 \cdot 3^2 + 1^2)] = 250$$

تعریف ۳.۲.۲. فرض کنید G یک گراف باشد. **گراف خطی**^{۱۴} $L(G)$ ، گرافی است که مجموعه رئوس آن متناظر با مجموعه یال‌های (G) ، $E(G)$ است و دو رأس باهم مجاورند، هرگاه یال‌های متناظر آن‌ها دارای یک رأس انتهایی مشترک باشند.

تعریف ۴.۲.۲. شاخص وینر یالی گراف G به صورت $W_e(G) = \frac{1}{4} \sum_{g \in E(G)} \sum_{f \in E(G)} D(g, f)$ تعریف می‌شود.

ملاحظه ۳.۲.۲. بنابراین شاخص وینر یالی گراف G با شاخص وینر گراف خطی G معادل است.

$$W_e(G) = W(L(G)).$$

قضیه ۴.۲.۲. در سال ۱۹۸۱، باکلی^{۱۵} رابطه بین شاخص وینر درخت T با n رأس و گراف خطی آن را به دست آورد که به صورت $W(L(T)) = W(T) - \binom{n}{2}$ است [۸].

۳.۲ کران‌هایی برای شاخص‌های توپولوژیکی

تمام قضایای این بخش از مرجع [۳۷] است.

قضیه ۱.۳.۲. اگر G گراف همبندی باشد و $e \in E(G)$ بعلاوه G گرافی با مجموعه رئوس $v(G)$ و مجموعه یال‌های $E(G) \setminus \{e\}$ آنگاه $W(G) < W(G')$.

^{۱۴} line graph

^{۱۵} Buckley

برهان. فرض کنید $e = (uv)$ بنابراین برای هر جفت رأس x و y با e که روی مسیر بین x و y قرار دارد داریم: $d_G(x, y) \leq d_G(x, y)$ و بنابراین $d_G(u, v) < d_G(u, v)$ و بنابراین $W(G) < W(G)$.
□

تعریف ۱.۳.۲. درخت فراگیر^{۱۶} از گراف همبند و بدون جهت G درختی است که شامل تمام رئوس و حداقل برخی از یال‌ها باشد.

به عنوان نتیجه‌ای فوری از قضیه (۱.۳.۲) قضیه زیر را پیرامون گراف‌ها و درخت‌های فراگیر آن‌ها داریم.

قضیه ۲.۳.۲. اگر G گراف همبندی باشد و τ درخت فراگیر آن باشد، آنگاه

$$W(G) \leq W(\tau).$$

نامساوی در شرایطی که G یک درخت باشد برقرار است.

قضیه ۳.۳.۲. اگر G زیرگراف فراگیری از گراف کامل با n رأس باشد، آنگاه

$$W(G) \geq \frac{n(n-1)}{2}.$$

برهان. شاخص وینر گراف کامل K_n با n رأس به صورت زیر است $W(K_n) = \sum_{i=1}^{n-1} i = \frac{n(n-1)}{2}$. بنا به قضیه (۱.۳.۲) هر زیرگراف G از K_n با $E(G) \subset E(K_n)$ شاخص وینر بزرگتر از شاخص وینر K_n دارد. از آنجاکه هر گراف از مرتبه n زیرگرافی از گراف کامل است، نابرابری برقرار است.
□

قضیه ۴.۳.۲. اگر G گراف همبند با n رأس و m یال باشد، آنگاه

$$n(n-1) - m \leq W(G) \leq \frac{n^2 + 5n - 6}{6} - m.$$

برهان. به منظور اثبات اولین نامساوی، فاصله بین u و v را در نظر می‌گیریم. می‌دانیم $d_G(u, v) = 1$ هرگاه u و v مجاور باشند، در غیراینصورت $d_G(u, v) \geq 2$ ، از آنجاکه $|E(G)| = m$ دقیقاً m جفت رأس نامرتب با فاصله ۱ و $\binom{n}{2} - m$ جفت رأس نامرتب با فاصله بزرگتر از ۱ وجود دارد. بنابراین

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d_G(u, v) \geq m + 2 \left[\binom{n}{2} - m \right] = n(n-1) - m.$$

نامساوی دوم به وسیله استقرا به روی $\binom{n}{2}$ نشان داده می‌شود. از آنجا که K_2 تنها گراف همبند است و $1 = 1 \leq \frac{1+1-6}{6} - 1 = 1$ ، برای $n = 2$ نامساوی برقرار است. اکنون

^{۱۶}spanning tree

فرض می‌کنیم نامساوی دوم برای همه گراف‌های همبند از مرتبه n برقرار باشد. فرض کنید T درختی با $n+1$ رأس و v یک برگ از آن باشد. بعلاوه فرض کنید T' زیردرختی از T با مجموعه رئوس $V(T) \setminus v$ باشد. بنابراین نامساوی دوم برای T' برقرار است و داریم:

$$\begin{aligned} W(T) &= W(T') + d_T(v) \leq \frac{n^3 + 5n - 6}{6} - (n-1) + \sum_1^n i \\ &= \frac{(n+1)^3 + 5(n+1) - 6}{6} - n \end{aligned}$$

حال فرض می‌کنیم نامساوی دوم برای تمام گراف‌های همبند با n رأس و $m \geq n-1$ یال برقرار باشد. گراف همبند G با n و $m+1$ یال را در نظر می‌گیریم از آن جاکه G درخت نیست بنابراین شامل یالی مانند e است به طوری که G' با مجموعه رئوس $V(G)$ و مجموعه یال‌های $E(G) \setminus \{e\}$ زیرگراف همبند از G است بنا به قضیه (۱.۳.۲) داریم $W(G) < W(G') - 1$ چونکه فرض برای G' برقرار است، داریم:

$$W(G) < W(G') - 1 \leq \frac{n^3 + 5n - 6}{6} - m - 1$$

□

قضیه ۵.۳.۲. در بین تمام گراف‌های همبند مرتبه n ، مسیر P_n بیشترین شاخص وینر را دارد. **برهان.** فرض کنید G گراف همبند با n رأس و m یال باشد. از آن جاکه G همبند است، داریم $n-1 \leq m$. بنا به قضیه (۴.۳.۲) داریم:

$$\begin{aligned} W(G) &\leq \frac{n^3 + 5n - 6}{6} - m \leq \frac{n^3 + 5n - 6}{6} - (n-1) \\ &= \frac{n^3 - n}{6} = \binom{n+1}{3} = W(P_n) \end{aligned}$$

□

قضیه ۶.۳.۲. در میان تمام درختان از مرتبه n ، ستاره S_n کمترین شاخص وینر را دارد.

برهان. از آنجاکه تعداد یال‌های درخت با مرتبه n ، $m = n-1$ است. بنا به قضیه (۴.۳.۲) $(n-1)^2 \leq W(T)$. بنابراین چونکه $W(S_n) = (n-1)^2$ ستاره S_n کمترین شاخص وینر را در میان تمام درختان از مرتبه n دارد.

□

قضیه ۷.۳.۲. اگر G گرافی دوبخشی با $a+b$ رأس باشد، آنگاه

$$W(G) \geq (a+b)(a+b-1) - ab.$$

نامساوی برقرار است هرگاه $G = K_{a,b}$.

برهان. اگر G گرافی دوبخشی با $a + b$ رأس متفاوت از $K_{a,b}$ باشد (بخش‌هایی از $K_{a,b}$ با حذف برخی از یال‌ها) بنابراین بنا به قضیه (۱.۳.۲) داریم:

$$\begin{aligned} W(G) > W(K_{a,b}) &= ab + 2 \sum_{i=1}^{a-1} i + 2 \sum_{i=1}^{b-1} i \\ &= ab + a(a-1) + b(b-1) \\ &= (a+b)(a+b-1) - ab \end{aligned}$$

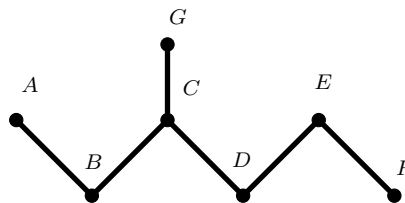
□

۴.۲ مفاهیم مربوط به ماتریس‌های توپولوژیکی

روش کدگذاری ساختارهای شیمیایی از گراف مولکولی به سه شکل بزرگ طبقه‌بندی می‌شوند که شامل شکل ماتریس، اندیس توپولوژیکی و خواص اتمی از ساختار هندسی مولکول است [۲۱]. اولین نمایش گراف مولکولی، از ماتریس‌ها استفاده می‌کند. این نمایش با توجه به قضیه هاکل است و از بیان مشتق ریاضی در ساختمان مولکولی استفاده می‌کند [۳۱]. برخی ماتریس‌ها برای بیان گراف مولکولی استفاده می‌شود. بعضی از ماتریس‌ها که مرتبط با مفهوم فاصله هستند را معرفی و مورد بحث قرار می‌دهیم.

۱.۴.۲ ماتریس فاصله

تعریف ۱.۴.۲. ماتریس فاصله^{۱۷} گراف G با N رأس، $D(G) = D$ ماتریس متقارن $N \times N$ مربعی است که ورودی‌های آن تعداد یال‌های بین i و j روی کوتاه‌ترین مسیر بین آن‌ها است [۲۳].



شکل ۵.۲: درخت دلخواه T_1

^{۱۷}distance matrix

مثال ۱.۴.۲. ماتریس فاصله درخت شکل ۵.۲ به صورت زیر است [۲۳]:

$$D(T_1) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 2 & 3 & 4 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 3 \\ 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & 4 \\ 3 & 2 & 1 & 2 & 3 & 4 & 0 \end{bmatrix}$$

تعریف ۲.۴.۲. شاخص وینر گراف همبند G ، مجموع فاصله‌های بین جفت رئوس G به صورت زیر است [۳۷]:

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N D_{ij}$$

مجموع فاصله از رأس i ، DS_i به صورت مجموع فاصله‌های توپولوژیکی بین رأس i و هر رأس در گراف مولکولی است. پس $DS_i = \sum_{j=1}^N (D)_{ij}$ بنابراین:

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N D_{ij} = \sum_{i=1}^N DS_i$$

تعریف ۳.۴.۲. شاخص توپولوژیکی مولکولی شولتز^{۱۸} برای توصیف آلکان‌ها به وسیله عدد صحیح از گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۶]:

$$MTI(G) = \sum_{i=1}^N [d(A+D)]_i$$

که ماتریس‌های A و D به ترتیب ماتریس‌های مجاورت و فاصله گراف G هستند. بردار $d = (d_1, d_2, \dots, d_N)$ از درجه رئوس G است [۱۶].

۲.۴.۲ ماتریس وینر

تعریف ۴.۴.۲. به عنوان توسیعی از شاخص وینر یک درخت، رندیج^{۱۹} ماتریس وینر W درخت را معرفی کرد. برای هر دو رأس i و j در T فرض کنید $\pi(i, j)$ مسیر منحصر به فردی با رئوس انتهایی i و j و طول d_{ij} در T باشد و فرض کنید $T_{1, \pi(i, j)}$ و $T_{2, \pi(i, j)}$ به ترتیب اجزا $T - E(\pi(i, j))$ شامل i و j باشد و $n_{1, \pi(i, j)}$ و $n_{2, \pi(i, j)}$ به ترتیب تعداد رئوس $T_{1, \pi(i, j)}$ و $T_{2, \pi(i, j)}$ باشد. بنابراین ماتریس وینر W به صورت زیر ارائه می‌شود [۳۴]:

$$W = (w_{ij}), w_{ij} = n_{1, \pi(i, j)} \cdot n_{2, \pi(i, j)}$$

^{۱۸}“Schultz molecular topological index” (MTI)

^{۱۹}Randić

۳.۴.۲ ماتریس فاصله متقابل

ما ماتریس مولکولی جدیدی را تعریف می‌کنیم که وزن فاصله بین دو اتم با افزایش فاصله کاهش می‌یابد.

تعریف ۵.۴.۲. ماتریس فاصله متقابل^{۲۰} از گراف G با N رأس $RD(G) = RD$ ماتریس متقارن $N \times N$ است که ورودی‌های $(RD)_{ij}$ فاصله متقابل بین رئوس i و j برای عناصر غیرقطری هستند و برای عناصر قطری برابر صفر هستند [۲۳].

$$(RD)_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{اگر } i = j \\ d_{ij}^{-1} & \text{اگر } i \neq j \end{cases}$$

مثال ۲.۴.۲. ماتریس RD درخت شکل ۵.۲ مربوط به گراف مولکولی تری متیل هگزان به صورت زیر است:

$$RD(T_1) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0.50 & 0.33 & 0.25 & 0.20 & 0.33 \\ 1 & 0 & 1 & 0.50 & 0.33 & 0.25 & 0.50 \\ 0.50 & 1 & 0 & 1 & 0.50 & 0.33 & 1 \\ 0.33 & 0.50 & 1 & 0 & 1 & 0.50 & 0.50 \\ 0.25 & 0.33 & 0.50 & 1 & 0 & 1 & 0.33 \\ 0.20 & 0.25 & 0.33 & 0.50 & 1 & 0 & 0.25 \\ 0.33 & 0.50 & 1 & 0.50 & 0.33 & 0.25 & 0 \end{bmatrix}$$

۴.۴.۲ ماتریس هاراری

تعریف ۶.۴.۲. شاخص هاراری^{۲۱} از گراف G که با $H(G)$ نمایش داده می‌شود به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۰]:

$$H(G) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (RD)_{i,j}$$

تعریف ۷.۴.۲. فرض کنید G یک گراف و A ماتریس مجاورت آن و \bar{A} ماتریس مجاورت گراف مکمل آن یعنی \bar{G} باشد، بنابراین $d(u, v) = 1$ اگر u و v در G مجاور باشند و $d(u, v) = 2$ اگر u و v در \bar{G} مجاور باشند. بنابراین ماتریس هاراری^{۲۲} به صورت $A + \frac{1}{\sqrt{2}} \bar{A}$ است [۱۰].

تعریف ۸.۴.۲. اگر $x \in \mathbb{C}^n$ ، $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ و $\lambda \in \mathbb{C}$ معادله زیر را در نظر می‌گیریم:

$$Ax = \lambda x, \quad x \neq 0$$

^{۲۰} reciprocal distance matrix

^{۲۱} Harary index

^{۲۲} Harary matrix

اگر یک اسکالر λ و یک بردار غیرصفر x در معادله بالا صدق کند، λ را یک مقدار ویژه^{۲۳} ماتریس A و بردار x را بردار ویژه^{۲۴} وابسته به λ می‌نامند. جفت (λ, x) جفت ویژه^{۲۵} نامیده می‌شود.

۵.۴.۲ ماتریس لاپلاسیان

روشی کاملاً متفاوت برای محاسبه شاخص وینر یک درخت استفاده از مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسیان آن است. فرمول محاسبه شاخص وینر که قصد داریم در اینجا ارائه دهیم در چندین مقاله در سال ۱۹۹۰ به‌طور مستقل چاپ شده است، اما ما خودمان را محدود به ذکر اثبات ارائه شده توسط مریس^{۲۶} در مرجع [۲۹]، خواهیم کرد.

تعریف ۹.۴.۲. فرض کنید G یک گراف باشد **ماتریس لاپلاسیان**^{۲۷} $L(G)$ به‌صورت زیر است:

$$L(G) = D(G) - A(G)$$

که $D(G)$ ماتریس قطری از درجه رئوس و $A(G)$ ماتریس مجاورت است.

تعریف ۱۰.۴.۲. چند جمله‌ای مشخصه لاپلاسیان گراف G که آن را با $p(G, x)$ نمایش می‌دهیم چند جمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسیان گراف G است و به‌صورت زیر نمایش داده می‌شود:

$$p(G, x) = \det(xI_n - L(G)) = \sum_{i=0}^n (-1)^i c_i x^{n-i}$$

مثال ۳.۴.۲. درخت T شکل ۶.۲ را در نظر بگیرید. ماتریس لاپلاسیان آن به‌صورت زیر است:

$$L(T) = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 3 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

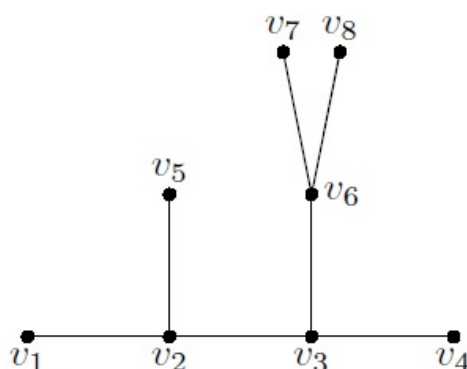
^{۲۳} eigenvalue

^{۲۴} eigenvector

^{۲۵} eigenpair

^{۲۶} Merris

^{۲۷} Laplacian matrix



شکل ۶.۲:

قضیه ۱.۴.۲. (قضیه ماتریس-درخت) فرض کنید $L(G)$ ماتریس لاپلاسیان گراف G با n رأس باشد و L_{ij} زیرماتریس از L که با حذف سطر i و ستون j به دست می‌آید. بنابراین تعداد درخت‌های پوشای $\tau(G)$ به صورت زیر به دست می‌آید [۳۷]:

$$\tau(G) = (-1)^{i+j} \det(L_{ij})$$

لم ۱.۴.۲. اگر G گرافی جهت‌دار با $|E(G)| = m$ باشد و $Q = Q(G) = (q_{ij})$ ماتریس وقوع رأس-یال به صورت زیر باشد:

$$q_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{اگر } v_i \text{ انتهای مثبت } e_j \text{ باشد} \\ -1 & \text{اگر } v_i \text{ انتهای منفی } e_j \text{ باشد} \\ 0 & \text{اگر } v_i \text{ متعلق به } e_j \text{ نباشد} \end{cases}$$

آنگاه

$$L(G) = QQ^t.$$

برهان. فرض کنید $R = (r_{ij})$ ماتریس طرف راست باشد. بنابراین $r_{ij} = \sum_{a=1}^m q_{ia}q_{ja}$.

• اگر $i \neq j$: حاصلضرب $q_{ia}q_{ja}$ صفر نیست، اگر v_i و v_j هر دو رئوس میانی e_a باشند. به

دلیل جهت‌گیری G ما به رابطه $q_{ia}q_{ja} = -1$ می‌رسیم و بنابراین $r_{ij} = -a_{ij}$.

• اگر $i = j$: بنابراین رابطه $r_{ii} = \sum_{a=1}^m q_{ia}^2$ با $q_{ia}^2 = 1$ به دست می‌آید اگر v_i رأس میانی e_a

باشد و در غیراین صورت $q_{ia}^2 = 0$. این به این معنی است که $r_{ij} = \deg_G(v_i)$.

□

ملاحظه ۱.۴.۲. توجه کنید که اگرچه ورودی‌های Q بستگی به انتخاب جهت دارند، ماتریس لاپلاسیان $L(G)$ وابسته به آن نیست. $L(G)$ نسبت به جایگزینی منحصر به فرد است. بدین منظور که مقادیر ویژه $L(G)$ وابسته به جهت‌گیری G یا مرتبه رئوس آن نیست.

برخلاف $L(G)$ نسخه یالی آن $K(G) = Q^t Q$ وابسته به جهت علامت ورودی‌های غیرقطری آن است. به واسطه تجزیه مقادیر منحصر به فرد Q ، مقادیر ویژه ناصفر $K(G)$ و $L(G)$ یکسان هستند. مقادیر ویژه $L(G)$ را به صورت $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ نشان می‌دهیم. مجموع سطری و ستونی صفر است، و $\lambda_n = 0$ و $\lambda_{n-1} > 0$ اگر و تنها اگر G همبند باشد.

لم ۲.۴.۲. اگر T درختی با n رأس باشد آنگاه $\det(K(T)) = n$.

برهان. بنا به ملاحظه رابطه زیر به دست می‌آید: (۱.۴.۲)

$$\det(K(T)) = \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i$$

برای λ_i هایی که $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ مقادیر ویژه $L(T)$ ناصفر هستند. با در نظر گرفتن چند جمله‌ای مشخصه $L(T)$ ، ضریب coeff_λ از λ به صورت زیر است:

$$\text{coeff}_\lambda = (-1)^{n-1} \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i$$

و بنابراین

$$\text{coeff}_\lambda = (-1)^{n-1} \sum_{i=1}^n \det(L_{ii}).$$

پس

$$\det(K(T)) = \sum_{i=1}^n \det(L_{ii}) = n.$$

□

تعریف ۱۱.۴.۲. فرض کنید A ماتریسی $n \times n$ باشد، دترمینان ماتریس مربعی و کوچکتری که از حذف سطر i ام و ستون j ام ماتریس A به دست می‌آید را **کهاد** (مینور) $^{28} A$ می‌نامند و با M_{ij} نشان می‌دهند. **همسازه** $^{29} (\Delta_{ij})$ از درایه a_{ij} به صورت زیر می‌باشد:

$$\Delta_{ij} = (-1)^{i+j} |M_{ij}|$$

اگر بجای هر a_{ij} همسازه آن یعنی Δ_{ij} را قرار دهیم، ماتریس به دست آمده را **ماتریس همسازه** $^{30} A$ گویند و با نماد N نشان می‌دهند یعنی $N = [\Delta_{ij}]$ ترانهاده ماتریس همسازه A را **ماتریس الحاقی** $^{31} A$ می‌نامند و با $\text{adj} A$ نشان می‌دهند.

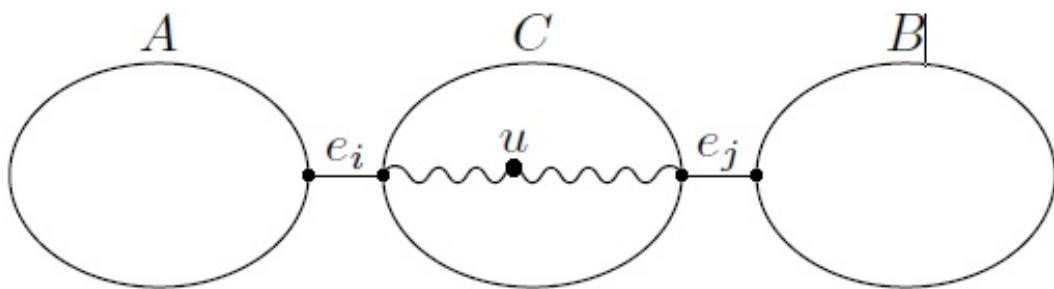
²⁸ minor matrix

²⁹ cofactor

³⁰ cofactor matrix

³¹ adjugate matrix

تعریف ۱۲.۴.۲. فرض کنید T یک درخت باشد و e_i, e_j دو یال از آن باشند. همچنین فرض کنید $\hat{T} = (V(T), E(T) \setminus \{e_i, e_j\})$ جنگل با سه مولفه A و B و C باشد که A و B در طرف دیگر e_i و e_j باشند بطوریکه هر مسیر در T از هر رأس A به رأس دیگری از B شامل e_i و e_j باشد. همانند شکل ۷.۲ بنابراین ما $n(e_i, e_j) = |A||B|$ تعریف می‌کنیم. به‌طور مشابه روابط $n_{e_i}(T) = n_u(e_i|T)n_v(e_i|T)$ را برای $e_i = (u, v)$ به کار می‌گیریم. رأس u از C بین e_i و e_j نامیده می‌شود هرگاه هر مسیر از یک رأس از A به رأسی از B از u بگذرد. تعداد رئوس بین e_i و e_j را با s_{ij} نشان می‌دهیم.



شکل ۷.۲:

لم ۳.۴.۲. فرض کنید T درختی با n رأس به‌گونه‌ای باشد که $K(T)$ نامنفی باشد. فرض کنید $X = (x_{ij})$ ماتریس الحاقی از $K(T)$ باشد. پس [۳۷]

$$x_{ij} = \begin{cases} n(e_i) & \text{اگر } i = j \\ (-1)^{s_{ij}} n(e_i, e_j) & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

تعریف ۱۳.۴.۲. اثر ۳۲ یک ماتریس مربعی $n \times n$ برابر است با حاصلضرب درایه‌های قطر اصلی آن یا به عبارت دیگر:

$$tr(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii}$$

قضیه ۲.۴.۲. فرض کنید T درختی با n باشد و $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_{n-1} > \lambda_n = 0$ مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسین مربوطه باشد. بنابراین شاخص وینر می‌تواند به صورت زیر محاسبه شود:

$$W(T) = n \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\lambda_i}$$

برهان. ما T را به گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که $K(T)$ نامنفی باشد. بنا به لم (۳.۴.۲) اثر ماتریس الحاقی X از $K(T)$ به صورت زیر است:

$$tr(X) = \sum_{i=1}^n x_{ii} = \sum_{e \in E(T)} n_{e_i}(T) \quad (2.2)$$

همانطور که در قضیه (۲.۲.۲) نشان داده شده است این مجموع برابر شاخص وینر درخت T می‌باشد. از سویی دیگر می‌دانیم که اثر یک ماتریس می‌تواند با استفاده از مقادیر ویژه آن محاسبه گردد. برای همه $\lambda_i, i = 1, \dots, n-1$ می‌دانیم که مقدار ویژه‌ای از $X = nK^{-1}(T)$ است. بنابراین

$$tr(X) = \sum_{i=1}^n n \frac{1}{\lambda_i} \quad (3.2)$$

بنابراین از معادلات (۲.۲) و (۳.۲) داریم:

$$W(T) = n \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\lambda_i}$$

□

مثال ۴.۴.۲. دوباره درخت T شکل ۶.۲ را در نظر می‌گیریم، مقادیر ویژه ناصفر $L(T)$ به طور تقریبی به صورت زیر هستند:

$$\lambda_1 = 4/81361,$$

$$\lambda_2 = 3/73205,$$

$$\lambda_3 = 2/52932,$$

$$\lambda_4 = \lambda_5 = 1,$$

$$\lambda_6 = 0/657077,$$

$$\lambda_7 = 0/267949$$

بنابراین با به کار بردن قضیه (۲.۴.۲) شاخص وینر را به صورت $W(T) = 8 \sum_{i=1}^7 \frac{1}{\lambda_i} = 65$ محاسبه می‌کنیم.

فصل ۳

شاخص‌های توپولوژیکی و اعمال گراف‌ها

۱.۳ اعمال گراف‌ها

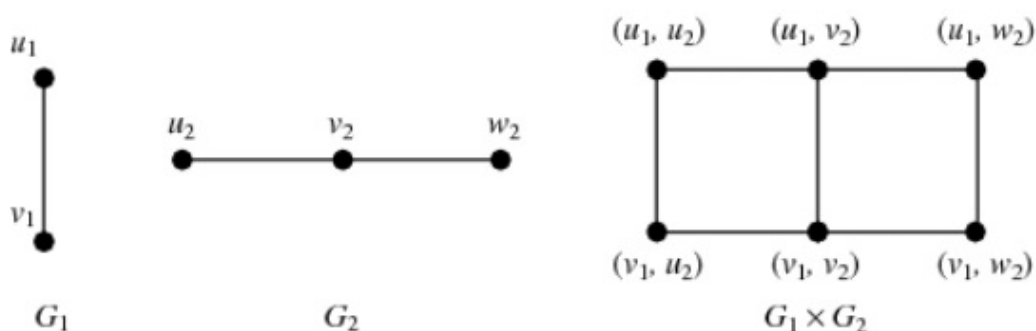
برخی از اعمال دوتایی جفت گراف‌ها به شکل زیر است:

الف حاصلضرب دکارتی^۱ $G_1 \times G_2$ دارای مجموعه رئوس $V(G_1 \times G_2) = V(G_1) \times V(G_2)$ و مجموعه یال‌های $\{(u_1, u_2)(v_1, v_2) : u_1v_1 \in E_1 \text{ و } u_2v_2 \in E_2 \text{ یا } u_1 = v_1 \text{ و } u_2 = v_2\}$ است.

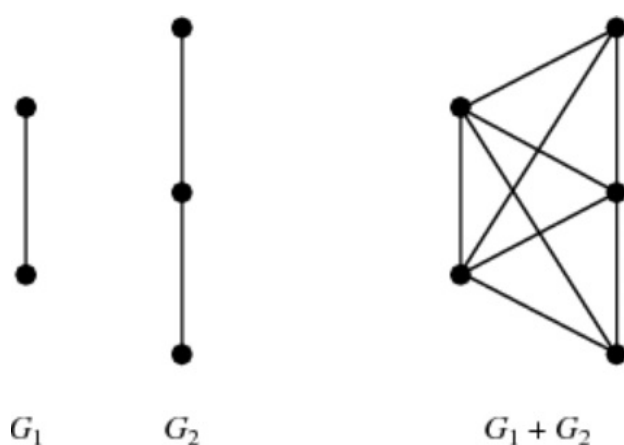
ب پیوند^۲ $G_1 + G_2$ با مجموعه رئوس $V(G_1 + G_2) = V(G_1) \cup V(G_2)$ و مجموعه یال‌های $E(G_1 + G_2) = E_1 \cup E_2 \cup \{uv : u \in V_1, v \in V_2\}$ است. به عبارت دیگر پیوند $G = G_1 + G_2$ از گراف‌های G_1 و G_2 با مجموعه رئوس مجزا V_1 و V_2 و مجموعه یال‌های E_1 و E_2 همراه با تمام یال‌های پیوند $G_1 \cup G_2$ است. اگر $G = H + \dots + H$ را با nH نشان می‌دهیم.

^۱Cartesian product

^۲join



شکل ۱.۳: حاصلضرب دکارتی دو گراف



شکل ۲.۳: پیوند دو گراف

ج ترکیب: $G_1[G_2]$ با مجموعه رئوس $V(G_1[G_2]) = V(G_1) \times V(G_2)$ و مجموعه یال‌های

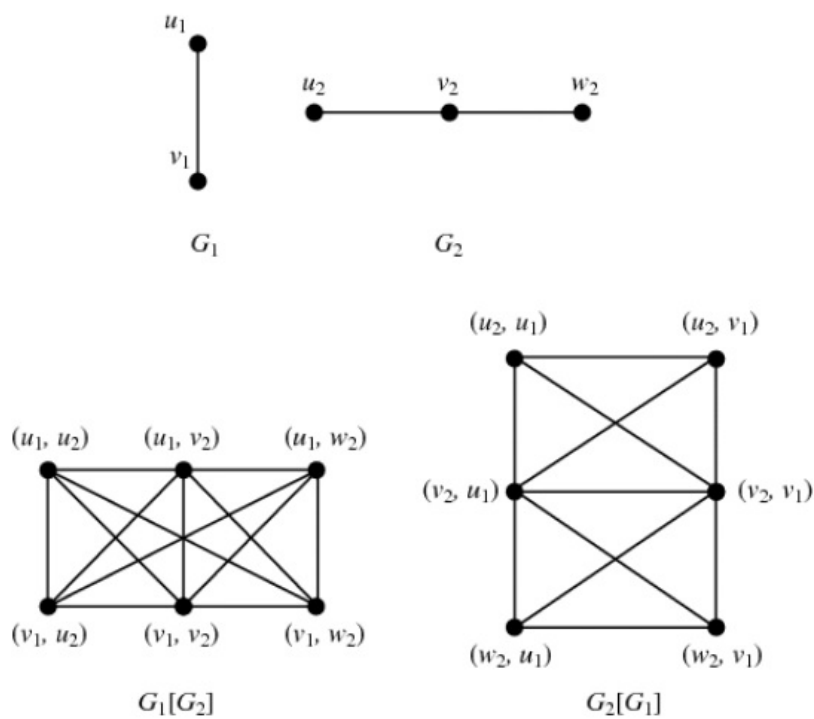
$$E(G_1[G_2]) = \{(u_1, u_2)(v_1, v_2) : u_1v_1 \in E_1 \text{ یا } u_2v_2 \in E_2 \text{ و } u_1 = v_1\}$$

است. در واقع $u = (u_1, v_1)$ مجاور با $v = (u_2, v_2)$ هر گاه $(u_1 \text{ مجاور } u_2)$ یا $u_1 = u_2$ و v_1 مجاور v_2).

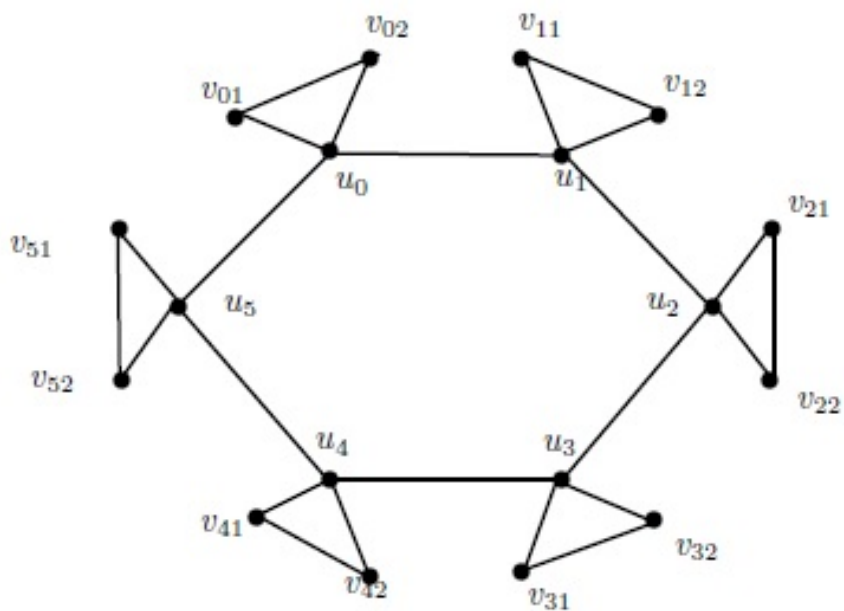
د حاصلضرب کرونا^۴ گراف‌های G_1 و G_2 را با $G_1 \odot G_2$ نمایش می‌دهیم که گراف بدست آمده از گرفتن یک کپی از G_1 و $|V(G_1)|$ کپی مجزا از G_2 و اتصال رأس i از G_1 به هر رأس در i آمین کپی از G_2 است. شکل ۴.۳ را ببینید.

^۳ composition

^۴ corona product



شکل ۳.۳: ترکیب دو گراف



شکل ۴.۳: گراف $C_6 \odot K_2$

۲.۳ شاخص وینر چهار عمل از گراف‌ها

قضیه ۱.۲.۳. اگر

• G_1 و G_2 گراف‌های همبندی باشند. آنگاه

$$W(G_1 \times G_2) = |V(G_2)|^2 W(G_1) + |V(G_1)|^2 W(G_2).$$

برهان. فرض کنید $u = (u_1, u_2)$ و $v = (v_1, v_2)$ به‌طوریکه $u_i, v_i \in V(G_i), i = 1, 2$ ، دو رأس از $G_1 \times G_2$ باشد. ما در ابتدا اثبات می‌کنیم که

$$d(u, v | G_1 \times G_2) = d(u_1, v_1 | G_1) + d(u_2, v_2 | G_2) \quad (1.3)$$

دو عملگر تصویری π_1 و π_2 را به ازای هر $(x, y) \in V(G_1 \times G_2)$ به طوری که $\pi_1(x, y) = x$ و $\pi_2(x, y) = y$ تعریف می‌کنیم. اکنون مسیر P با اتصال رئوس u و v در $G_1 \times G_2$ را در نظر بگیرید. فرض کنید رئوس P به صورت $p_0 = u, p_1, \dots, p_{k-1}, p_k = v$ باشد. دنباله رئوس $\pi_i(p_0), \pi_i(p_1), \dots, \pi_i(p_{k-1}), \pi_i(p_k)$ از گراف G_i مسیری بین u_i و v_i ، $i = 1, 2$ ارائه می‌دهد. طبق تعریف $G_1 \times G_2$ ، $\pi_1(p_{j-1}) = \pi_1(p_j)$ ، اگر و تنها اگر برای $j = 1, 2, \dots, k$ داشته باشیم $\pi_2(p_{j-1}) \neq \pi_2(p_j)$. تعداد جفت رئوس $\pi_i(p_j), \pi_i(p_{j-1})$ به طوری که برای $i = 1, 2$ و $j = 1, 2, \dots, k$ داشته باشیم $\pi_i(p_{j-1}) \neq \pi_i(p_j)$ را با $S_i(P)$ نشان می‌دهیم. پس $S_1(P) + S_2(P) = k$ از آنجاییکه از سویی $i = 1, 2$ نتیجه می‌گیریم که $d(u_1, v_1 | G_1) + d(u_2, v_2 | G_2) \leq k$. مسیر P را کوتاه‌ترین مسیر بین u و v در نظر بگیرید به طوری که $k = d(u, v)$ یعنی

$$d(u_1, v_1 | G_1) + d(u_2, v_2 | G_2) \leq d(u, v) \quad (2.3)$$

از دیگر سو دنباله رئوس

$$(\pi_1(p_0), \pi_2(p_0)), (\pi_1(p_1), \pi_2(p_0)), \dots, (\pi_1(p_k), \pi_2(p_0)), (\pi_1(p_k), \pi_2(p_1)), \dots, (\pi_1(p_k), \pi_2(p_k))$$

مسیری در $G_1 \times G_2$ بین $u = (\pi_1(p_0), \pi_2(p_0))$ و $v = (\pi_1(p_k), \pi_2(p_k))$ است که طول آن کوتاه‌تر از $d(u_1, v_1 | G_1) + d(u_2, v_2 | G_2)$ است از این‌رو

$$d(u_1, v_1 | G_1) + d(u_2, v_2 | G_2) \geq d(u, v) \quad (3.3)$$

تساوی (۱.۳) اکنون از (۲.۳) و (۳.۳) نتیجه می‌شود. برای تکمیل اثبات قضیه توجه کنید که

$$W(G_1 \times G_2) = \frac{1}{2} \sum_{u_1, v_1 \in V(G_1)} \sum_{u_2, v_2 \in V(G_2)} d(u, v) \quad (4.3)$$

که $u = (u_1, u_2)$ و $v = (v_1, v_2)$ بنابراین قضیه با جایگذاری (۱.۳) در رابطه (۴.۳) اثبات می‌شود. □

برای اثبات بقیه بندها به مرجع [۴۴] مراجعه کنید.

• G_1 و G_2 دو گراف دلخواه باشند، داریم:

$$W(G_1 + G_2) = |V(G_1)|^2 - |V(G_1)| + |V(G_2)|^2 - |V(G_2)| \\ + |V(G_1)||V(G_2)| - |E(G_1)| - |E(G_2)|$$

• G_1 گراف همبندی باشد، پس

$$W(G_1[G_2]) = |V(G_2)|^2 [W(G_1) + |V(G_1)|] - |V(G_1)| [|E(G_2)| + |V(G_2)|].$$

• G_1 گراف همبندی باشد، در این صورت

$$W(G_1 \odot G_2) = (|V(G_1)| + 1)^2 W(G_1) + |V(G_1)| \left[|V(G_2)|^2 - |E(G_2)| \right] \\ + (|V(G_1)|^2 - |V(G_1)|) |V(G_2)| (|V(G_2)| + 1).$$

۳.۳ درجه فاصله حاصل ضرب کرونا گراف‌ها

تمام قضایا و مفاهیم این بخش از مرجع [۴۰] است.

تعریف ۱.۳.۳. اولین شاخص زاگرب^۵ به صورت

$$M_1(G) = \sum_{u,v \in E(G)} [d_G(u) + d_G(v)] = \sum_{v \in V(G)} d_G^{\check{}}(v)$$

و دومین شاخص زاگرب^۶ را به صورت

$$\sum_{u,v \in E(G)} [d_G(u)d_G(v)]$$

تعریف می‌کنیم. این شاخص‌های توپولوژیکی براساس درجه هستند.

فرض کنید $V(G_1) = \{u_0, u_1, \dots, u_{n_1-1}\}$ و $V(G_2) = \{v_0, v_1, \dots, v_{n_2-1}\}$ برای $0 \leq i \leq n_1 - 1$ ، کپی i ام که به رأس u_i متصل شده است را با G_2^i نمایش می‌دهیم و فرض می‌کنیم $V(G_2^i) = \{v_{i0}, v_{i1}, \dots, v_{i(n_2-1)}\}$.

لم ۱.۳.۳. فرض کنید G_1 گراف همبند و G_2 گراف دلخواهی باشد، درجه $w \in V(G_1 \odot G_2)$ به صورت زیر است:

$$d_{G_1 \odot G_2}(w) = \begin{cases} d_{G_1}(w) + n_2 & \text{اگر } w \in V(G_1) \\ d_{G_1}(w) + 1 & \text{اگر } w \in V(G_2^i) \text{ برای } 0 \leq i \leq n_1 - 1 \end{cases}$$

لم ۲.۳.۳. فرض کنید G_1 و G_2 گراف‌های دلخواهی باشند و G_2^i کپی i ام از G_2 در $G_1 \odot G_2$ و $V(G_2^i) = \{v_{i0}, v_{i1}, \dots, v_{i(n_2-1)}\}$ ، بنابراین

$$\begin{aligned} d_{G_1 \odot G_2}(u_i, u_p) &= d_{G_1}(u_i, u_p), & 0 \leq i, p \leq n_1 - 1 & \text{اگر} \\ d_{G_1 \odot G_2}(u_i, v_{pq}) &= d_{G_1}(u_i, u_p) + 1, & 0 \leq q \leq n_2 - 1, 0 \leq i, p \leq n_1 - 1 & \text{اگر} \\ d_{G_1 \odot G_2}(v_{ij}, v_{pq}) &= \begin{cases} d_{G_1}(u_i, u_p) + 2 & \text{اگر } i \neq p \\ 1 & \text{اگر } v_j v_q \in E(G_2) \text{ و } i = p \\ 2 & \text{اگر } v_j v_q \notin E(G_2) \text{ و } i = p \end{cases} \end{aligned}$$

قضیه ۱.۳.۳. اگر G_1 و G_2 گراف‌های دلخواهی باشند آنگاه

$$DD(G_1 \odot G_2) = (n_2 + 1)DD(G_1)$$

$$+ 4(n_2 + 1)[n_2 + \epsilon(G_2)]W(G_1) + 2n_1 n_2 \epsilon(G_1) + 2n_1(2n_1 n_2 + n_1 - 3)\epsilon(G_2) - n_1 M_1(G_2) + n_1 n_2(3n_1 n_2 + n_1 - 2).$$

^۵The first Zagreb index

^۶The second Zagreb index

برهان. فرض کنید $G = G_1 \odot G_2$ پس

$$\begin{aligned}
 DD(G) &= \frac{1}{\gamma} \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v)[d_G(u) + d_G(v)] \\
 &= \frac{1}{\gamma} \left\{ \sum_{u_i, u_p \in V(G_1), i \neq p} d_G(u_i, u_p)[d_G(u_i) + d_G(u_p)] \right. \\
 &\quad + \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{v_{ij}, v_{iq} \in V(G_2^i), j \neq q} d_G(v_{ij}, v_{iq})[d_G(v_{ij}) + d_G(v_{iq})] \\
 &\quad + 2 \sum_{p=0}^{n_1-1} \sum_{u_i \in V(G_1), v_{pq} \in V(G_2^p)} d_G(u_i, v_{pq})[d_G(u_i) + d_G(v_{pq})] \\
 &\quad \left. + \sum_{v_{ij} \in V(G_2^i), v_{pq} \in V(G_2^p), i \neq p} d_G(v_{ij}, v_{pq})[d_G(v_{ij}), d_G(v_{pq})] \right\} \\
 &= \frac{1}{\gamma} \left\{ \sum_{i,p=0, i \neq p}^{n_1-1} d_G(u_i, u_p)[d_G(u_i) + d_G(u_p)] \right. \\
 &\quad + \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{j,q=0, j \neq q}^{n_2-1} d_G(v_{ij}, v_{iq})[d_G(v_{ij}) + d_G(v_{iq})] \\
 &\quad + 2 \sum_{p=0}^{n_1-1} \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{q=0}^{n_2-1} d_G(u_i, v_{pq})[d_G(u_i) + d_G(v_{pq})] \\
 &\quad \left. + \sum_{i,p=0, i \neq p}^{n_1-1} \sum_{q=0}^{n_2-1} d_G(v_{ij}, v_{pq})[d_G(v_{ij}) + d_G(v_{pq})] \right\} \\
 &= \frac{1}{\gamma} (A_1 + A_2 + A_3 + A_4). \tag{۵.۳}
 \end{aligned}$$

ما ابتدا A_1 تا A_4 از رابطه (۵.۳) را محاسبه می کنیم. ابتدا A_1 را محاسبه می کنیم.

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \sum_{i,p=0, i \neq p}^{n_1-1} d_G(u_i, u_p)[d_G(u_i) + d_G(u_p)] \\
 &= \sum_{i,p=0, i \neq p}^{n_1-1} d_G(u_i, u_p) \{ [d_{G_1}(u_i) + n_2][d_{G_1}(u_p) + n_2] \}, \tag{۱.۳.۳} \text{ و } \tag{۲.۳.۳} \\
 &= \sum_{i,p=0, i \neq p}^{n_1-1} d_G(u_i, u_p)[d_{G_1}(u_i) + d_{G_1}(u_p)] + 2n_2 \sum_{i,p=0, i \neq p}^{n_1-1} d_G(u_i, u_p) \\
 &= 2DD(G_1) + 4n_2W(G_1). \tag{۶.۳}
 \end{aligned}$$

اکنون $A_2 = \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{j,q=0, j \neq q}^{n_2-1} d_G(v_{ij}, v_{iq})[d_G(v_{ij}) + d_G(v_{iq})]$ را محاسبه می کنیم در ابتدا

$$\hat{A}_2 = \sum_{j,q=0, j \neq q}^{n_2-1} d_G(v_{ij}, v_{iq})[d_G(v_{ij}) + d_G(v_{iq})]$$

را محاسبه می‌کنیم.

$$\begin{aligned} \hat{A}_r &= \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \in E(G_r)}^{n_r-1} d_G(v_{ij}, v_{iq}) [d_G(v_{ij}) + d_G(v_{iq})] \\ &+ \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \notin E(G_r)}^{n_r-1} d_G(v_{ij}, v_{iq}) [d_G(v_{ij}) + d_G(v_{iq})] \\ &= \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \in E(G_r)}^{n_r-1} [(d_{G_r}(v_j) + 1) + (d_{G_r}(v_q) + 1)] \\ &+ \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \notin E(G_r)}^{n_r-1} 2 [(d_{G_r}(v_j) + 1) + (d_{G_r}(v_q) + 1)] \end{aligned}$$

به وسیله لم‌های (۱.۳.۳) و (۲.۳.۳)

$$\begin{aligned} &= \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \in E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \\ &+ 2 \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \notin E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \\ &= \left\{ \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \in E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \notin E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \right\} \\ &+ \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \notin E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \\ &= \sum_{j,q=\circ, j \neq q}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \\ &+ \left\{ \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \in E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \notin E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \right\} \\ &- \sum_{j,q=\circ, j \neq q, v_j v_q \in E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \\ &= 2 \sum_{j,q=\circ, j \neq q}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \\ &- 2 \sum_{v_j v_q \in E(G_r)}^{n_r-1} [d_{G_r}(v_j) + d_{G_r}(v_q) + 2] \\ &= \lambda(n_r - 1)\epsilon(G_r) + \lambda \binom{n_r}{2} - 2M_1(G_r) - 2\epsilon(G_r), \text{ که } |E(G)| = \epsilon(G) \end{aligned}$$

از آنجائیکه $\sum_{j,q=0, j \neq q}^{n_2-1} [d_{G_2}(v_j) + d_{G_2}(v_q)] = 4(n_2 - 1)\epsilon(G_2)$ و

$$\sum_{v_j v_q \in E(G_2)} [d_{G_2}(v_j) + d_{G_2}(v_q)] = M_1(G_2)$$

$$= \lambda n_2 \epsilon(G_2) + 4n_2(n_2 - 1) - 2M_1(G_2) - 12\epsilon(G_2). \quad (7.3)$$

اکنون با استفاده از رابطه (۷.۳) به روابط زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} A_2 &= \sum_{i=0}^{n_1-1} \left\{ \lambda n_2 \epsilon(G_2) + 4n_2(n_2 - 1) - 2M_1(G_2) - 12\epsilon(G_2) \right\} \\ &= n_1 \left\{ \lambda n_2 \epsilon(G_2) + 4n_2(n_2 - 1) - 2M_1(G_2) - 12\epsilon(G_2) \right\}. \end{aligned} \quad (8.3)$$

برای محاسبه $A_3 = 2 \sum_{p=0}^{n_1-1} \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{q=0}^{n_2-1} d_G(u_i, v_{pq}) [d_G(u_i) + d_G(v_{pq})]$ ابتدا

$$\hat{A}_3 = \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{q=0}^{n_2-1} d_G(u_i, v_{pq}) [d_G(u_i) + d_G(v_{pq})]$$

را محاسبه می‌کنیم.

$$\begin{aligned} \hat{A}_3 &= \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{q=0}^{n_2-1} [d_{G_1}(u_i, u_p) + 1] [(d_{G_1}(u_i) + n_2) + (d_{G_2}(v_q) + 1)] \quad (1.3.3) \text{ و } (2.3.3) \\ &= \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{q=0}^{n_2-1} d_{G_1}(u_i, u_p) [d_{G_1}(u_i) + (n_2 + 1) + d_{G_2}(v_q)] \\ &+ \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{q=0}^{n_2-1} [d_{G_1}(u_i) + (n_2 + 1) + d_{G_2}(v_q)] \\ &= n_2 \sum_{i=0}^{n_1-1} d_{G_1}(u_i, u_p) d_{G_1}(u_i) + n_2(n_2 + 1) \sum_{i=0}^{n_1-1} d_{G_1}(u_i, u_p) \\ &+ 2\epsilon(G_2) \sum_{i=0}^{n_1-1} d_{G_1}(u_i, u_p) + 2n_2\epsilon(G_1) + n_1n_2(n_2 + 1) + 2n_1\epsilon(G_2) \end{aligned} \quad (9.3)$$

با استفاده از (۹.۳) می‌رسیم به

$$\begin{aligned} A_3 &= 2 \sum_{P=0}^{n_1-1} \left\{ n_2 \sum_{i=0}^{n_1-1} d_{G_1}(u_i, u_p) d_{G_1}(u_i) + n_2(n_2 + 1) \sum_{i=0}^{n_1-1} d_{G_1}(u_i, u_p) \right. \\ &+ \left. 2\epsilon(G_2) \sum_{i=0}^{n_1-1} d_{G_1}(u_i, u_p) + 2n_2\epsilon(G_1) + n_1n_2(n_2 + 1) + 2n_1\epsilon(G_2) \right\} \\ &= 2n_2 DD(G_1) + 4n_2(n_2 + 1)W(G_1) + \lambda\epsilon(G_2)W(G_1) + 4n_1n_2\epsilon(G_1) \\ &+ 2(n_1)^2 n_2(n_2 + 1) + 4(n_1)^2 \epsilon(G_2). \end{aligned} \quad (10.3)$$

در نهایت به محاسبه $A_{\mathfrak{F}} = \sum_{i,p=\circ, i \neq p}^{n_1-1} \sum_{q=\circ}^{n_2-1} d_G(v_{ij}, v_{pq}) [d_G(v_{ij}) + d_G(v_{pq})]$ خواهیم پرداخت در ابتدا به محاسبه $\acute{A}_{\mathfrak{F}} = \sum_{q=\circ}^{n_2-1} d_G(v_{ij}, v_{pq}) [d_G(v_{ij}) + d_G(v_{pq})]$ می‌پردازیم.

$$\begin{aligned} \acute{A}_{\mathfrak{F}} &= \sum_{q=\circ}^{n_2-1} [d_{G_1}(u_i, u_p) + 2] [(d_{G_1}(v_j) + 1) + (d_{G_1}(v_q) + 1)] \quad (۲.۳.۳) \text{ و } (۱.۳.۳) \\ &= [d_{G_1}(u_i, u_p) + 2] \sum_{q=\circ}^{n_2-1} [d_{G_1}(v_j) + d_{G_1}(v_q) + 2] \\ &= [d_{G_1}(u_i, u_p) + 2] 2 \sum_{q=\circ}^{n_2-1} (d_{G_1}(v_j) + 1) \\ &= [d_{G_1}(u_i, u_p) + 2] (\mathfrak{F}n_2\epsilon(G_1) + 2(n_2)^2) \end{aligned} \quad (۱۱.۳)$$

با استفاده از (۱۱.۳) می‌رسیم به

$$\begin{aligned} A_{\mathfrak{F}} &= \sum_{i,p=\circ, i \neq p}^{n_1-1} \left\{ [d_{G_1}(u_i, u_p) + 2] (\mathfrak{F}n_2\epsilon(G_1) + 2(n_2)^2) \right\} \\ &= (\mathfrak{F}n_2\epsilon(G_1) + 2(n_2)^2) [2W(G_1) + 2n_1(n_1 - 1)]. \end{aligned} \quad (۱۲.۳)$$

اکنون با قرار دادن روابط (۶.۳) و (۸.۳) و (۱۰.۳) و (۱۲.۳) در رابطه (۵.۳) داریم:

$$\begin{aligned} DD(G) &= \frac{1}{\mathfrak{F}} \left\{ 2DD(G_1) + \mathfrak{F}n_2W(G_1) + \lambda n_1n_2\epsilon(G_1) + \mathfrak{F}n_1n_2(n_2 - 1) - 2n_1M_1(G_1) \right. \\ &\quad - 12n_1\epsilon(G_1) + 2n_2DD(G_1) + \mathfrak{F}n_2(n_2 + 1)W(G_1) + \lambda\epsilon(G_1)W(G_1) \\ &\quad + \mathfrak{F}n_1n_2\epsilon(G_1) + 2(n_1)^2n_2(n_2 + 1) + \mathfrak{F}(n_1)^2\epsilon(G_1) + (\mathfrak{F}n_2\epsilon(G_1) \\ &\quad \left. + 2(n_2)^2) [2W(G_1) + 2n_1(n_1 - 1)] \right\} \\ &= (n_2 + 1)DD(G_1) + \mathfrak{F}(n_2 + 1)[n_2 + \epsilon(G_1)]W(G_1) + 2n_1n_2\epsilon(G_1) \\ &\quad + 2n_1(2n_1n_2 + n_1 - 2)\epsilon(G_1) - n_1M_1(G_1) + n_1n_2(3n_1n_2 + n_1 - 2). \end{aligned}$$

□

نتیجه ۱.۳.۳. اگر G گراف همبند با $|V(G)| = m$ باشد، آنگاه

$$DD(G \odot \bar{K}_n) = (n + 1)DD(G) + \mathfrak{F}n(n + 1)W(G) + 2mn\epsilon(G) + mn(3mn + m - 2).$$

فصل ۴

فاصله فازی در گراف‌ها

فاصله و مفاهیم مرتبط نظیر خروج از مرکز، شعاع، قطر، مرکز و... قبلاً تعریف شده‌اند و در بسیاری از برنامه‌های کاربردی نظریه گراف استفاده شده‌اند. در این پایان‌نامه فاصله جدیدی را بررسی می‌کنیم که فاصله فازی در گراف‌های فازی نامیده می‌شود. با استفاده از این فاصله خروج از مرکز فازی، مرکز فازی و... تعریف می‌شوند. در ادامه روابط بین شعاع فازی و قطر فازی بررسی و همچنین مفهوم گراف‌های خودمرکز به گراف‌های خودمرکز فازی تعمیم داده می‌شود و شرط لازم برای اینکه گراف خودمرکز، گراف خودمرکز فازی شود، حاصل می‌شود. ترکیب $max - max$ ماتریس فاصله فازی با خودش معرفی می‌شود و یک چک آسان برای اینکه گراف فازی گراف خودمرکز فازی است یا نه ارائه شده‌است. ویژگی‌های مرکزی از یک درخت نیز در مفهوم فازی بحث شده‌اند. تمام تعاریف و قضایای این فصل از مرجع [۲۸] است.

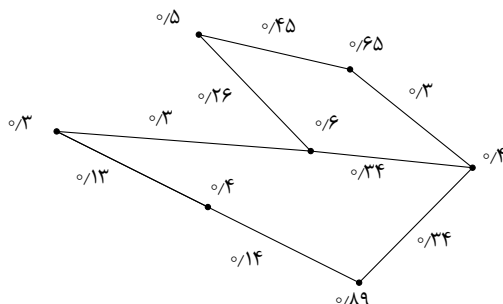
۱.۴ گراف فازی

تعریف ۱.۱.۴. گراف فازی^۱ (به اختصار f -گراف) یک جفت (σ, μ) است که در آن $\sigma : S \rightarrow [0, 1]$ یک زیرمجموعه فازی از مجموعه S است، S زیرمجموعه فازی از رأس‌های گراف است و $\mu : S \times S \rightarrow [0, 1]$ یک رابطه فازی روی σ برای هر u و v در S است به طوری که

$$\mu(u, v) \leq \sigma(u) \wedge \sigma(v).$$

^۱Fuzzy graph

مثال ۱.۱.۴. گراف شکل ۱.۴ یک گراف فازی است که مقادیر عضویت فازی یالها و رأسهای آن به روی خود گراف مشخص شدهاند.



شکل ۱.۴: یک گراف فازی دلخواه

تعریف ۲.۱.۴. گراف قطعی^۲ را با $G^* : (\sigma^*, \mu^*)$ که $\sigma^* = \{u \in S : \sigma(u) > 0\}$ و

$$\mu^* = \{(u, v) \in S \times S : \mu(u, v) > 0\}$$

نشان می دهیم.

تعریف ۳.۱.۴. گراف فازی $H : (\tau, \nu)$ یک زیرگراف فازی جزئی^۳ از $G : (\sigma, \mu)$ نامیده می شود اگر برای هر u رابطه $\tau(u) \leq \sigma(u)$ و برای هر جفت از گره های u و σ^* رابطه $\nu(u, v) \leq \mu(u, v)$ برقرار باشد. در حالت خاص $H : (\tau, \nu)$ را یک زیرگراف فازی^۴ از $G^* : (\sigma^*, \mu^*)$ نامیم هرگاه روابط $\tau(u) = \sigma(u)$ برای هر $u \in \tau^*$ و $\nu(u, v) = \mu(u, v)$ برای هر $(u, v) \in \nu^*$ برقرار باشند.

تعریف ۴.۱.۴. مسیر P به طول n دنباله ای از گره های متمایز u_0, u_1, \dots, u_n است به طوری که $\mu(u_{i-1}, u_i) > 0, i = 1, 2, \dots, n$ و درجه عضویت ضعیف ترین یال به عنوان قدرت مسیر^۵ آن تعریف می شود. قدرت همبندی^۶ بین دو رأس x و y به صورت ماکزیمم قدرت همه مسیرهای بین x و y معرفی می شود و با $CONN_G(x, y)$ نشان داده می شود. یک مسیر $x - y$ یک مسیر قوی نامیده می شود اگر قدرت آن برابر $CONN_G(x, y)$ باشد. گراف $G : (\sigma, \mu)$ همبند است اگر برای هر x و y در σ^* ، $CONN_G(x, y) > 0$. تماما فرض می کنیم که G همبند است.

^۲ crisp graph

^۳ partial fuzzy subgraph

^۴ fuzzy subgraph

^۵ strength path

^۶ strength of connectedness

تعریف ۵.۱.۴. فرض کنید $G : (\sigma, \mu)$ یک گراف فازی باشد، بنابراین **فاصله فازی^۷** بین دو گره u و v در G به صورت $d_f(u, v) = \wedge_P \{L(P) * S(P)\}$ معرفی می‌شود که در آن P یک $u - v$ مسیر، $L(P)$ طول و $S(P)$ قدرت P است. \wedge مینم و $*$ حاصلضرب معمولی را نشان می‌دهد.

ملاحظه ۱.۱.۴. فاصله بالا در همه چهار خاصیت متریک صدق می‌کند.

$$1. \quad u, v \in \sigma^* \text{ برای همه } d_f(u, v) \geq 0.$$

$$2. \quad u = v \text{ برای همه } d_f(u, v) = 0.$$

$$3. \quad u, v \in \sigma^* \text{ برای همه } d_f(u, v) = d_f(v, u) \geq 0.$$

$$4. \quad u, v, w \in \sigma^* \text{ برای همه } d_f(u, v) \leq d_f(u, w) + d_f(w, v).$$

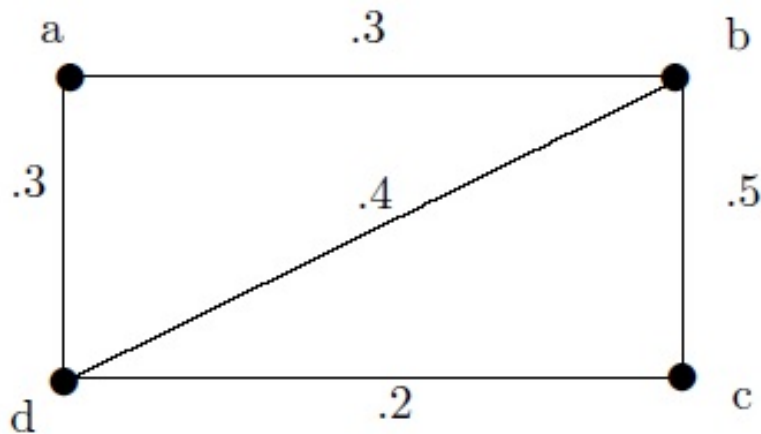
فاصله d_f متریک است و (σ^*, d_f) فضای متریک است.

مثال ۲.۱.۴. گراف شکل ۲.۴ با چهار رأس را در نظر بگیرید. در این گراف

$$d_f(a, b) = \wedge \{1 * 3, 2 * 3, 3 * 3\} = 3, \quad d_f(a, c) = \wedge \{2 * 3, 3 * 3, 3 * 2, 2 * 2\} = 2$$

$$d_f(a, d) = \wedge \{1 * 3, 2 * 3, 3 * 2\} = 2, \quad d_f(b, c) = \wedge \{1 * 5, 2 * 2, 3 * 2\} = 2$$

$$d_f(b, d) = \wedge \{1 * 4, 2 * 2, 2 * 3\} = 2, \quad d_f(c, d) = \wedge \{1 * 2, 2 * 4, 2 * 3\} = 2$$



شکل ۲.۴: فاصله در گراف فازی

^۷ fuzzy distance

تعریف ۶.۱.۴. فرض کنید $G : (\sigma, \mu)$ یک گراف فازی باشد، بنابراین خروج از مرکز فازی^۸ از گره $u \in V(G)$ به صورت $e_f(u) = \vee_{v \in V} d_f(u, v)$ است که \vee ماکزیمم را نشان می‌دهد.

تعریف ۷.۱.۴. مینیمم خروج از مرکز فازی از همه گره‌ها شعاع فازی^۹ از گراف G نامیده می‌شود که آن را به صورت r_f نشان می‌دهیم. بنابراین $r_f(G) = \wedge_{u \in V} \{e_f(u)\}$

تعریف ۸.۱.۴. ماکزیمم خروج از مرکز فازی از همه گره‌ها قطر فازی^{۱۰} نامیده می‌شود و با $d_f(G) = \vee_{u \in V} \{e_f(u)\}$ در آن $d_f(G) = \vee_{u \in V} \{e_f(u)\}$ در مثال (۲.۱.۴) $e_f(a) = e_f(b) = ۲$ و $e_f(c) = e_f(d) = ۴$.

ملاحظه ۲.۱.۴. برای هر گراف فازی G از آنجا که وزن‌ها کمتر از ۱ هستند $d(u, v) > d_f(u, v)$ که $d(u, v)$ فاصله بین u و v در گراف زمینه است.

تعریف ۹.۱.۴. گره $v \in V(G)$ **گره خروج از مرکز فازی**^{۱۱} از دیگر گره u است، هرگاه $e_f(u) = d_f(u, v)$ مجموعه همه گره‌های خروج از مرکز فازی از یک گره u با u^* نشان داده می‌شود.

تعریف ۱۰.۱.۴. گره‌هایی با مینیمم خروج از مرکز فازی گره‌های مرکزی فازی یا گره‌های شعاعی فازی نامیده می‌شوند و گره‌هایی با ماکزیمم خروج از مرکز فازی گره‌های قطری فازی یا گره‌های خارجی نامیده می‌شوند. در مثال (۲.۱.۴) $r_f(G) = ۴, d_f(G) = ۴$ اکنون مثال زیر را در نظر بگیرید.

مثال ۳.۱.۴. در گراف شکل ۳.۴

$$\begin{aligned} d_f(a, b) &= ۱, d_f(a, c) = ۲, d_f(a, d) = ۲, d_f(a, e) = ۳, d_f(a, f) = ۲ \\ d_f(b, c) &= ۲, d_f(b, d) = ۳, d_f(b, e) = ۳, d_f(b, f) = ۲, d_f(c, d) = ۲ \\ d_f(c, e) &= ۴, d_f(c, f) = ۳, d_f(d, e) = ۴, d_f(d, f) = ۳, d_f(e, f) = ۲ \end{aligned}$$

در اینجا $r_f(G) = ۳, d_f(G) = ۴$ و $e_f(a) = e_f(b) = e_f(f) = ۳, e_f(c) = e_f(d) = e_f(e) = ۴$ باید توجه کنیم که a, b و f گره‌های خروج از مرکز از دیگر رئوس نیستند. همانند فاصله کلاسیک در گراف‌ها ما نتایج زیر را داریم:

قضیه ۱.۱.۴. در هر گراف فازی همبند G ، $r_f(G) \leq d_f(G) \leq ۲r_f(G)$

^۸fuzzy eccentricity

^۹fuzzy radius

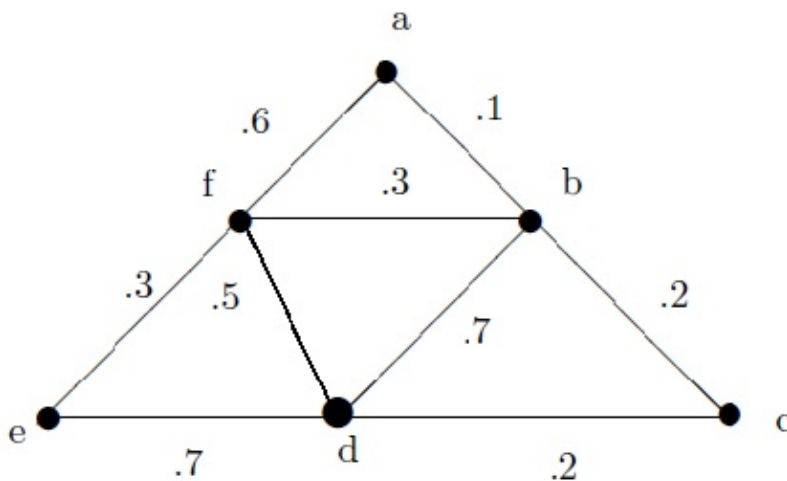
^{۱۰}fuzzy diameter

^{۱۱}fuzzy eccentric node

برهان. اولین نابرابری بنا به تعریف برقرار است. برای اثبات دیگری فرض کنید u و v گره‌هایی باشند به طوری که $d_f(u, v) = d_f(G)$ فرض کنید w گره مرکزی فازی از G باشد پس بنا به نابرابری مثلثی $d_f(u, w) \leq r_f(G)$ اما $d_f(u, v) \leq d_f(u, w) + d_f(w, v)$ پس

$$d_f(u, v) \leq r_f(G) + r_f(G) = 2r_f(G).$$

□



شکل ۳.۴: خروج از مرکز و مرکز

تعریف ۱۱.۱.۴. زیرگراف القایی به وسیله مجموعه‌ای از گره‌های مرکزی فازی، مرکز گراف فازی G نامیده می‌شود.

ملاحظه ۳.۱.۴. لازم نیست مرکز گراف فازی از یک گراف فازی مشابه مرکز گراف زمینه آن باشد.

۲.۴ گراف‌های خود مرکز فازی

در این بخش ویژگی‌های گراف‌های خود مرکز فازی را با توجه به فاصله جدید مطرح می‌کنیم.

تعریف ۱.۲.۴. گراف فازی G خود مرکز فازی نامیده می‌شود اگر هم‌ریخت با مرکز فازی آن باشد.^{۱۳}

^{۱۲} periphery of f-graph

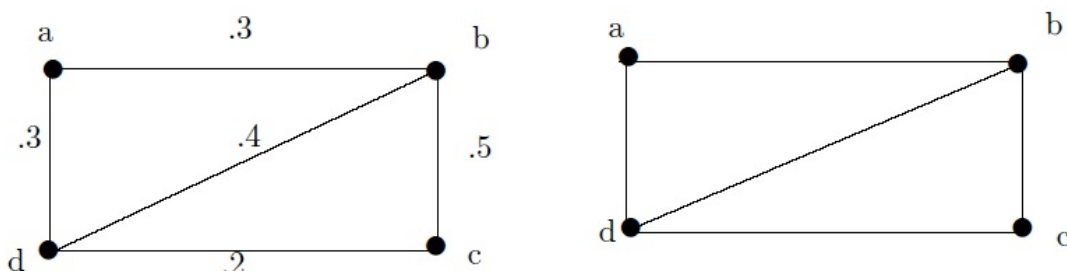
^{۱۳} fuzzy self centered

مثال ۱.۲.۴. یک گراف فازی و گراف زمينه آن در شکل زير نشان داده شده‌اند. در اين گراف فازی

$$d_f(a, b) = ۰.۳, d_f(a, c) = ۰.۴, d_f(a, d) = ۰.۳, d_f(b, c) = ۰.۴, d_f(b, d) = ۰.۴, d_f(c, d) = ۰.۲$$

$$d(a, b) = ۱, d(a, c) = ۲, d(a, d) = ۱, d(b, c) = ۱, d(b, d) = ۱, d(c, d) = ۱,$$

همچنين $e(a) = ۲, e(b) = ۱, e(c) = ۲, e(d) = ۱$ و $e_f(a) = e_f(b) = e_f(c) = e_f(d) = ۰.۴$ گراف خودمرکز فازی است اما گراف زمينه خودمرکز نيست. در قضيه زير ما يك شرط لازم برای اينکه گراف فازی G ، خودمرکز فازی شود ارائه می‌دهيم.



شکل ۴.۴: یک گراف فازی و گراف زمينه آن

قضيه ۱.۲.۴. اگر گراف فازی همبند G خودمرکز فازی باشد، هر گره G خروج از مرکز فازی است.

برهان. فرض کنید که گراف فازی G خودمرکز فازی است. باید نشان دهيم، هر گره G خروج از مرکز فازی است. فرض کنید u گره دلخواهی از G و $v \in u_f^*$ بنا به تعريف گره خروج از مرکز فازی $e_f(u) = d_f(u, v)$ اما از آنجائیکه G خودمرکز فازی است، $e_f(u) = e_f(v)$ و از اين رو $e_f(v) = d_f(u, v) = d_f(v, u)$. بنابراین u گره خروج از مرکز فازی از v است، از اين رو هر گره G خروج از مرکز فازی است. \square

نتيجه زير شرط لازم برای گرافهای خودمرکز فازی است.

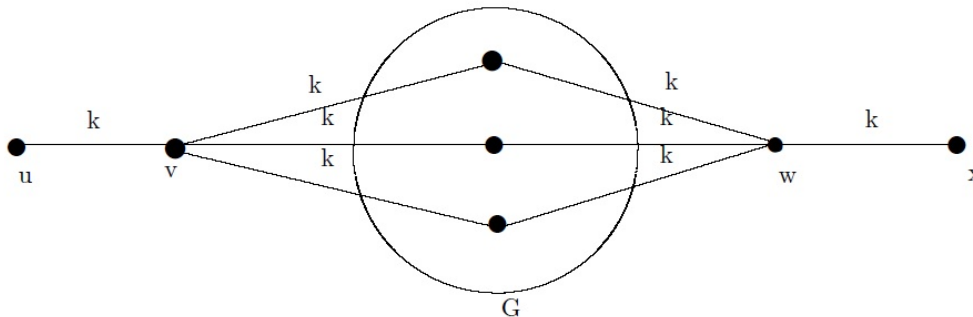
قضيه ۲.۲.۴. اگر گراف فازی همبند G خودمرکز فازی باشد، پس برای هر جفت از گره‌های u و v به‌طوريکه هرگاه u گره خروج از مرکز فازی از v باشد، پس v باید یکی از گره‌های خروج از مرکز فازی از u باشد.

برهان. فرض کنید G خودمرکز فازی است. همچنين فرض کنید u گره خروج از مرکز فازی از v است، يعنی $e_f(v) = d_f(v, u)$ از آنجائیکه G خودمرکز فازی است. همه گره‌ها، خروج از مرکز فازی یکسان دارند. بنابراین $e_f(u) = e_f(v)$ از دو معادله بالا $e_f(u) = d_f(v, u) = d_f(u, v)$ بنابراین $e_f(u) = d_f(u, v)$ که به اين معنا است که v یک گره خروج از مرکز فازی از u است. \square

در قضیه زیر، ما می‌توانیم از هر گراف فازی یک گراف فازی جدید بسازیم به طوری که قبلی مرکز فازی بعدی باشد.

قضیه ۳.۲.۴. هر گراف فازی G مرکز فازی از گراف همبند فازی H است.

برهان. H را از G به وسیله چهار گره که u, v, w, x می‌نامیم، همانند شکل ۵.۴ می‌سازیم. در واقع H به صورت پیوند متوالی $u + v + G + w + x$ ساخته می‌شود. حال کمترین وزن میان وزن‌های یال‌های G را به همه وزن‌های جدید از H اختصاص می‌دهیم. فرض کنید k حداقل وزن باشد. بنابراین $e_f(v) = e_f(w) = 3k$, $e_f(u) = e_f(x) = 4k$, $e_f(y) = 2k$ برای هر $y \in V(G)$ از این‌رو هر گره در G گره خروج از مرکز فازی از H است و بنابراین G مرکز فازی H است. \square



شکل ۵.۴: گراف H قضیه (۳.۲.۴)

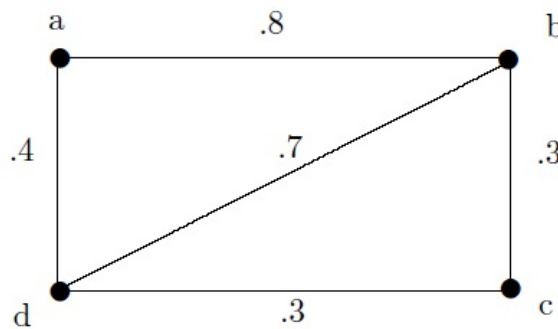
۳.۴ ماتریس فاصله فازی

تعریف ۱.۳.۴. فرض کنید $(\sigma, \mu) : G$ گراف فازی همبند با n گره باشد. **ماتریس فاصله فازی** $D_f = (d_{i,j})$ ماتریس مربعی از مرتبه n است و به وسیله $(d_{i,j}) = d_f(v_i, v_j)$ معرفی می‌شود. توجه کنید که ماتریس فاصله فازی یک ماتریس متقارن است.

تعریف ۲.۳.۴. ترکیب $max - max$ از یک ماتریس مربعی با خودش، دوباره ماتریس مربعی از همان مرتبه است که ورودی (i, j) آن به صورت زیر داده شده است.

$$d_{i,j} = \max\{\max(d_{i1}, d_{1j}), \max(d_{i2}, d_{2j}), \dots, \max(d_{in}, d_{nj})\}$$

در مثال زیر ماتریس فاصله فازی و ترکیب $max - max$ آن ارائه شده است.



شکل ۶.۴: ماتریس فاصله فازی

مثال ۱.۳.۴. ماتریس فاصله فازی و ترکیب $max - max$ شکل ۶.۴ به صورت زیر است:

$$D_f = \begin{pmatrix} 0 & 0/8 & 0/6 & 0/4 \\ 0/8 & 0 & 0/3 & 0/6 \\ 0/6 & 0/3 & 0 & 0/3 \\ 0/4 & 0/6 & 0/3 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_f \circ D_f = \begin{pmatrix} 0/8 & 0/8 & 0/8 & 0/8 \\ 0/8 & 0/8 & 0/8 & 0/8 \\ 0/8 & 0/8 & 0/6 & 0/6 \\ 0/8 & 0/8 & 0/6 & 0/6 \end{pmatrix}$$

در ادامه قضیه‌ای در ارتباط با موضوع خروج از مرکز فازی از گره‌ها با استفاده از ترکیب $max - max$ ماتریس فاصله فازی ارائه می‌دهیم.

قضیه ۱.۳.۴. فرض کنید $G : (\sigma, \mu)$ گراف فازی همبند باشد. عناصر قطری ترکیب $max - max$ ماتریس فاصله فازی از G با خودش خروج از مرکزهای فازی از گره‌ها هستند.

برهان. فرض کنید $D_f = (d_{i,j})$ ماتریس فاصله فازی G باشد. پس $d_{i,j} = d_f(v_i, v_j)$ ، i آمین درایه قطری در ترکیب $max - max$ ، $D_f \circ D_f$ به صورت زیر است:

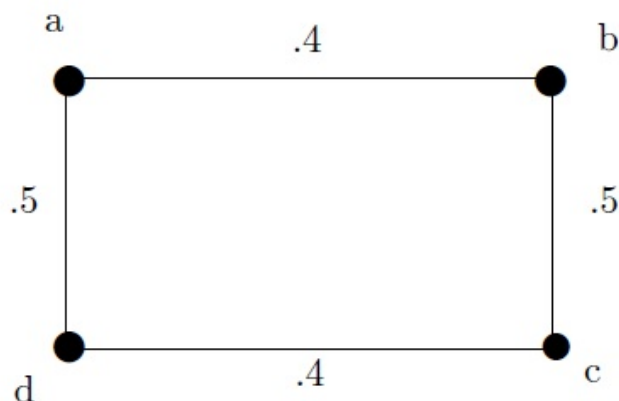
$$\begin{aligned} d_{i,i} &= \max\{\max(d_{i,1}, d_{1,i}), \max(d_{i,2}, d_{2,i}), \max(d_{i,3}, d_{3,i}), \dots, \max(d_{i,n}, d_{n,i})\} \\ &= \max\{d_{i,1}, d_{i,2}, d_{i,3}, \dots, d_{i,n}\} = \max\{d_f(v_i, v_1), d_f(v_i, v_2), d_f(v_i, v_3), \dots, d_f(v_i, v_n)\} = e_f(v_i) \end{aligned}$$

□

قضیه ۲.۳.۴. گراف فازی همبند $G : (\sigma, \mu)$ خودمرکز فازی است اگر و تنها اگر درایه‌های قطر اصلی ترکیب $max - max$ ماتریس فاصله فازی با خودش یکسان باشد.

برهان. همانطور که در قضیه (۱.۳.۴) اثبات شد، درایه‌های قطر اصلی در ترکیب $max - max$ ماتریس فاصله فازی با خودش خروج از مرکزهای فازی از گره‌ها است. اگر آن‌ها یکسان باشند، این بدین معنی است که $e_f(u)$ برای همه u ها در G یکسان است. پس G خودمرکز فازی است. □

قضیه بالا را در مثال زیر نشان می‌دهیم.

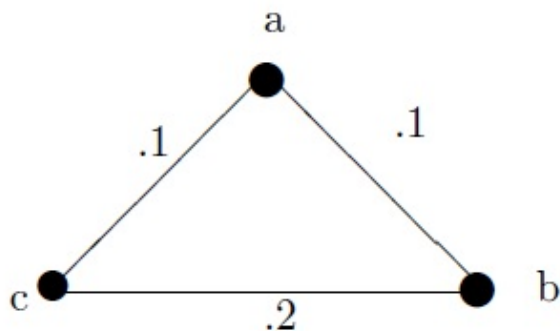


شکل ۷.۴: گراف خودمرکز فازی

مثال ۲.۳.۴. گراف فازی شکل ۷.۴ را در نظر بگیرید، ماتریس فاصله فازی و ترکیب $max-max$ آن به صورت زیر است:

$$D_f = \begin{pmatrix} 0 & 0.4 & 0.8 & 0.5 \\ 0.4 & 0 & 0.5 & 0.8 \\ 0.8 & 0.5 & 0 & 0.4 \\ 0.5 & 0.8 & 0.4 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_f \circ D_f = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.8 & 0.8 & 0.8 \\ 0.8 & 0.8 & 0.8 & 0.8 \\ 0.8 & 0.8 & 0.8 & 0.8 \\ 0.8 & 0.8 & 0.8 & 0.8 \end{pmatrix}$$

این گراف خود مرکز فازی است.



شکل ۸.۴: گرافی که خودمرکز فازی نیست

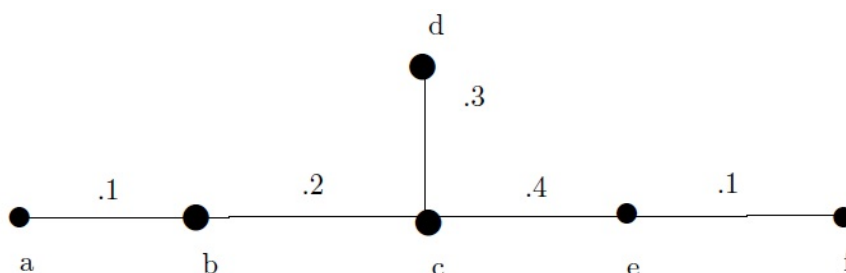
مثال ۳.۳.۴. گراف فازی شکل ۸.۴ را در نظر بگیرید، ماتریس فاصله فازی و ترکیب $max-max$ آن به صورت زیر است:

$$D_f = \begin{pmatrix} 0 & 0.1 & 0.1 \\ 0.1 & 0 & 0.2 \\ 0.1 & 0.2 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_f \circ D_f = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.2 & 0.2 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix}$$

به وضوح درایه‌های قطری در ترکیب یکسان نیستند و از این رو گراف فازی، خودمرکز فازی نیست.

۴.۴ مرکز فازی درختان

در این بخش ما ترکیبی بین مرکز فازی از یک درخت فازی و مرکز درخت زمینه آن می‌سازیم. ملاحظه ۱.۴.۴. در درخت‌های معمولی (درخت‌هایی که هر یال با وزن واحدی معین می‌شود) مرکز، هریک از k_1 یا k_2 است.



شکل ۹.۴: درخت فازی

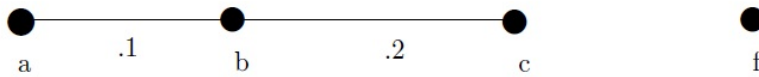
مثال ۱.۴.۴. درخت شکل ۹.۴ را در نظر بگیرید. در این درخت فازی

$$d_f(a, b) = 0.1 = d_f(e, f), d_f(a, c) = d_f(b, c) = d_f(c, f) = 0.2$$

$$d_f(a, d) = d_f(a, e) = d_f(b, f) = d_f(c, d) = d_f(d, f) = 0.3$$

$$d_f(a, f) = d_f(b, d) = d_f(b, e) = d_f(c, e) = 0.4, d_w(c, e) = 0.6$$

خروج از مرکزهای فازی، به صورت $e_f(a) = e_f(b) = e_f(c) = e_f(f) = 0.4, e_f(d) = e_f(e) = 0.6$ هستند. مرکز فازی در شکل ۱۰.۴ نشان داده شده است که هیچ کدام از k_1 یا k_2 نیست.



شکل ۱۰.۴: مرکز درخت فازی

ملاحظه ۲.۴.۴. مرکز فازی از درخت فازی می‌تواند ناهمبند باشد.

ملاحظه ۳.۴.۴. در یک درخت معمولی با تعداد رئوس بیشتر یا مساوی ۳، یک گره انتهایی نمی‌تواند یک گره مرکزی باشد اما در یک درخت فازی، یک گره انتهایی می‌تواند یک گره مرکزی باشد.

ملاحظه ۴.۴.۴. فرض کنیم مینیمم یال فازی در یک درخت فازی مربوط به گره آویزان v با مینیمم وزن k باشد. پس $e_f(v) = nk$ که n طول طولانی‌ترین مسیر از v در درخت فازی است.

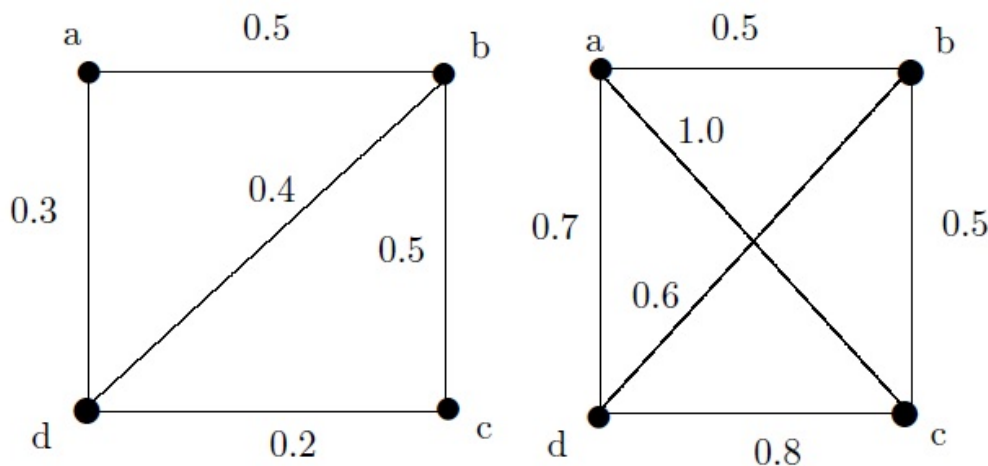
۵.۴ مرکز فازی مکمل گراف فازی

در این بخش ما مکمل گراف فازی و ویژگی‌های مرکز آن را بررسی می‌کنیم.

تعریف ۱.۵.۴. فرض کنید $G: (\sigma, \mu)$ یک گراف فازی باشد، بنابراین $G^c: (\sigma^c, \mu^c)$ مکمل گراف

$$\mu^c(x, y) = \wedge\{\sigma(x), \sigma(y)\} - \mu(x, y) \text{ و } \sigma^c = \sigma \text{ است که } G$$

در مثال زیر همه گره‌ها از وزن واحد هستند.



شکل ۱۱.۴: گراف فازی و مکمل آن

مثال ۱.۵.۴. برای گراف فازی و مکمل آن در شکل ۱۱.۴ ماتریس فاصله فازی و ترکیب آن به صورت زیر ارائه شده است:

$$D_f(G) = \begin{pmatrix} 0 & 0.3 & 0.4 & 0.3 \\ 0.3 & 0 & 0.4 & 0.4 \\ 0.4 & 0.4 & 0 & 0.2 \\ 0.3 & 0.4 & 0.2 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_f \circ D_f = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.4 & 0.4 & 0.4 \\ 0.4 & 0.4 & 0.4 & 0.4 \\ 0.4 & 0.4 & 0.4 & 0.4 \\ 0.4 & 0.4 & 0.4 & 0.4 \end{pmatrix}$$

$$D_f(G^c) = \begin{pmatrix} 0 & 0.5 & 0.1 & 0.7 \\ 0.5 & 0 & 0.5 & 0.6 \\ 0.1 & 0.5 & 0 & 0.8 \\ 0.7 & 0.6 & 0.8 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_f \circ D_f = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0.7 & 1 & 0.8 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0.8 & 1 & 0.8 \end{pmatrix}$$

ملاحظه ۱.۵.۴. مکمل گراف خودمرکز فازی ممکن است خودمرکز فازی نباشد. در مثال (۱.۵.۴) G خودمرکز فازی با 0.4 خروج از مرکز فازی از چهار گره دیگر است اما در G^c ,

$$e_f(a) = e_f(c) = e_f(d) = 0.3$$

و $e_f(b) = 0.2$ که ثابت می کند G^c خودمرکز فازی نیست.

فصل ۵

گراف‌های مولکولی فازی

ترکیبات با ساختار مختلف و شاخص‌های توپولوژیک مختلف حتی با یک فرمول شیمیایی، خواص مختلفی می‌توانند داشته باشند به عنوان مثال، کاکائین و اسکوپولامین هر دو با فرمول شیمیایی یکسان $C_{17}H_{21}NO_4$ ، خواص مختلف و شاخص وینر متفاوتی دارند. هم‌چنین شاخص‌های توپولوژیک می‌توانند در ساختن یک ترکیب با خواص معین مورد استفاده قرار گیرند. بنابراین، مطالعه‌ی ساختار گراف مولکولی و هم‌چنین شاخص‌های توپولوژیک در کنار فرمول شیمیایی واقعا مهم است. در گراف مولکولی، تمام رئوس و یال‌ها، مستقل از نوع پیوند و نوع یال‌ها برچسب‌گذاری می‌شوند و از این گراف برچسب‌گذاری شده برای پیشگویی ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی یک ترکیب، توصیف ساختارهای شیمیایی به صورت کمی و کیفی، ویژگی‌های ساختاری و فعالیتی مرتبط با اندیس‌های توپولوژیکی، استفاده می‌شود. اما از طرفی می‌دانیم خواص شیمیایی و ویژگی‌های ترکیبات، ارتباط بسیار نزدیکی با نوع مولکول و ویژگی‌های آن و پیوند میان آن‌ها دارد. در صورتیکه در یک گراف مولکولی اطلاعاتی درباره خواص مولکول و یا نوع پیوند و ویژگی‌های آن وجود ندارد. لذا پیش‌بینی می‌شود اگر این اطلاعات در یک گراف مولکولی لحاظ شود، نتایج حاصل از تحقیقات و محاسبات گراف مولکولی با نتایج به‌دست آمده از روش تجربی سازگاری بیشتری داشته باشد. با توجه به این که می‌دانیم طول پیوند یکی از عوامل مهم در تعیین ویژگی‌های یک ترکیب است بنابراین اگر در یک گراف مولکولی طول پیوند هر پیوند لحاظ شود نتایج بهتری به‌دست می‌آید. هدف ما در این فصل معرفی یک گراف مولکولی فازی است که در آن طول پیوند که از ویژگی‌های بسیار

مهم پیوند است مدنظر قرار گرفته است.

۱.۵ گراف مولکولی فازی

تعریف ۱.۱.۵. بنا به تعریف گراف فازی در فصل قبل **گراف مولکولی فازی**^۱ (σ, μ) با G تعریفی مشابه دارای درجه عضویت یال e_i به صورت $\mu(x, y) = \frac{l(e_i)}{\max l(e_i)}$ است. در واقع $\mu(x, y)$ نسبت طول پیوند هر پیوند به ماکزیمم مقدار طول پیوند در همان ترکیب است. در اینجا $\mu : \{\text{پیوندها}\} \rightarrow [0, 1]$

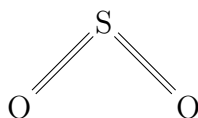
بنابراین هرچه طول پیوند یک ترکیب بیشتر باشد، شدت عضویت یال متناظر با آن در گراف مولکولی فازی بیشتر و به یک نزدیکتر است.

ملاحظه ۱.۱.۵. برای تعریف گراف مولکولی فازی با استفاده از طول پیوند، می‌توان از روش دیگری استفاده کرد. بدین ترتیب که در یک ترکیب مجموع تمام طول پیوندهای آن ترکیب را به دست آورده، سپس برای تعریف درجه عضویت هر یال به مجموع طول پیوند ترکیب تقسیم می‌شود. عدد به دست آمده به عنوان درجه عضویت آن یال در نظر گرفته می‌شود. به عبارت دیگر داریم:

$$\mu : S \times S \rightarrow [0, 1]$$

$$\mu(x, y) = \frac{l(e_i)}{A}, \quad A = \sum_{i=1}^n l(e_i)$$

مثال ۱.۱.۵. دی اکسید گوگرد (SO_2) در شکل ۱.۵ و آب H_2O هر چند دارای گراف مولکولی یکسان هستند، اما از نظر مرتبه پیوند، انرژی پیوند... متفاوت هستند. بنابراین با توجه به ویژگی‌های این پیوندها در ساختار مولکول، در گراف مولکولی این یال‌ها باید از یکدیگر متمایز شوند. در جداول پیوست ویژگی‌های پیوندهای مختلف ارائه شده است.

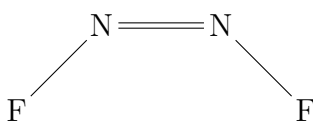


شکل ۱.۵: ساختار مولکولی (SO_2)

هر پیوند در مولکول دارای طول پیوند متفاوتی است که به طور معمول متوسط طول پیوند نامیده می‌شود. واحد طول پیوند آنگستروم A است. در حقیقت متوسط طول پیوند، میانگین طول‌های آن پیوند در مولکول‌های مختلف است. طول پیوندهای مختلف در جدول ۵.۱ ارائه شده است.

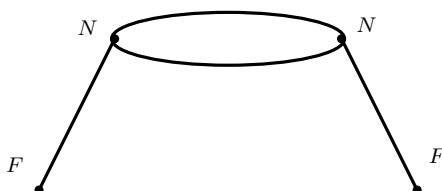
^۱fuzzy molecular graph

مثال ۲.۱.۵. ساختار مولکولی دی فلوراید دی نیتروژن (N_2F_2) در شکل ۲.۵ را نظر می‌گیریم



شکل ۲.۵: ساختار مولکولی (N_2F_2)

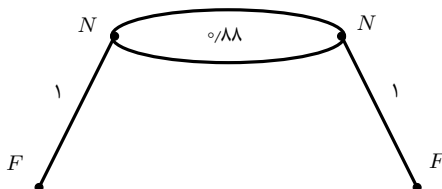
گراف شکل ۳.۵ گراف مولکولی این ترکیب است.



شکل ۳.۵: گراف مولکولی (N_2F_2)

در ترکیب (N_2F_2) دو نوع پیوند $N=N$ و $N-F$ وجود دارد. طول پیوند نسبت داده شده به این پیوندها برابر است با: $L(N=N) = 1/23A$ و $L(N-F) = 1/39$ بیشترین طول پیوند مربوط به پیوند $N-F$ است. لذا نسبت طول پیوند $N=N$ را به پیوند $N-F$ به دست می‌آوریم و برابر درجه عضویت یال متناظر آن در گراف قرار می‌دهیم: $\frac{1/23}{1/39} = 0/88$, $\frac{1/39}{1/39} = 1$ لذا گراف مولکولی فازی را به صورت زیر معرفی می‌کنیم:

$$V = \{N, F\}, \quad E = \{(N-F, 1), (N=N, 0/88)\}$$



شکل ۴.۵: گراف مولکولی فازی (N_2F_2)

۲.۵ شاخص‌های توپولوژیکی فازی

۱.۲.۵ فاصله فازی

تعریف ۱.۲.۵. ماتریس فاصله فازی^۲ از گراف مولکولی فازی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$d_f(u, v) = \begin{cases} \wedge_P \{L(P) * S(P)\} & \text{اگر } u \neq v \\ \circ & \text{اگر } u = v \end{cases}$$

که در آن P یک $u - v$ مسیر، $L(P)$ طول و $S(P)$ قدرت P (درجه عضویت ضعیف‌ترین یال) است. به عبارت دیگر

$$D_f = [d_f(u, v)] = \wedge_P \{L(P) * S(P)\} \quad uv \in P$$

$$D_f = \begin{bmatrix} \circ & \dots & d_f(1, n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_f(n, 1) & \dots & \circ \end{bmatrix}$$

۲.۲.۵ شاخص وینر فازی

تعریف ۲.۲.۵. فرض کنید G یک گراف مولکولی فازی باشد. شاخص وینر فازی^۳ از گراف به صورت زیر تعریف می‌شود:

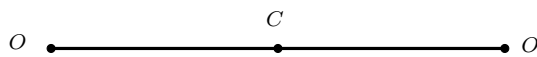
$$W_f(G) = \sum_{u, v \subseteq V(G)} d_f(u, v)$$

در حالت فازی فاصله بین دو رأس در گراف را مینیمم حاصلضرب طول مسیر در درجه عضویت ضعیف‌ترین یال که همان قدرت مسیر است در نظر می‌گیریم. برای به دست آوردن شاخص وینر فازی اعضای قطر بالامثلثی ماتریس فاصله فازی را باهم جمع کرده و شاخص وینر فازی محاسبه می‌شود.

مثال ۱.۲.۵. شاخص وینر فازی CO_2 را با استفاده از گراف مولکولی فازی آن محاسبه می‌کنیم. گراف مولکولی این ترکیب در شکل ۵.۵ ارائه شده است.

^۲ fuzzy distance matrix

^۳ fuzzy wiener index



شکل ۵.۵: گراف مولکولی دی‌اکسیدکربن

ماتریس فاصله این ترکیب به صورت زیر است:

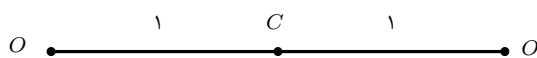
$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

شاخص وینر مجموع قطر بالامثلثی ماتریس فاصله است. بنابراین: $W(G) = 1 + 2 + 1$

$$W(G) = 4$$

از دو روش زیر برای ساخت گراف فازی استفاده می‌کنیم.

الف **برحسب طول پیوند** که در این صورت داریم: $L(C-O) = 1/43$ بنابراین طبق این روش $\mu(C-O) = \frac{1/43}{1/43} = 1$ گراف فازی در این حالت به صورت زیر می‌باشد:



شکل ۶.۵: گراف مولکولی فازی CO_2 روش الف مثال (۱.۲.۵)

ماتریس فاصله و شاخص وینر به صورت زیر است:

$$D_f = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$W(G) = 1 + 2 + 1 \implies W(G) = 4$$

ب **برحسب متوسط طول پیوند** مجموع طول پیوند ترکیب CO_2 برابر است با:

$$1/43 + 1/43 = 2/86$$

درجه‌عضویت یال‌ها در این صورت به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\mu(C-O) = \frac{1/43}{2/86} = 0.5$$

گراف فازی در این حالت به صورت شکل ۷.۵ است. و همچنین ماتریس فاصله فازی و شاخص وینر این روش نیز به صورت زیر است:

$$D_f = \begin{bmatrix} 0 & 0.5 & 1 \\ 0.5 & 0 & 0.5 \\ 1 & 0.5 & 0 \end{bmatrix}$$

$$W(G) = 0.5 + 1 + 0.5 \implies W(G) = 2$$



شکل ۷.۵: گراف مولکولی فازی CO_2 روش ب مثال (۱.۲.۵)

۳.۲.۵ شاخص PI_v فازی

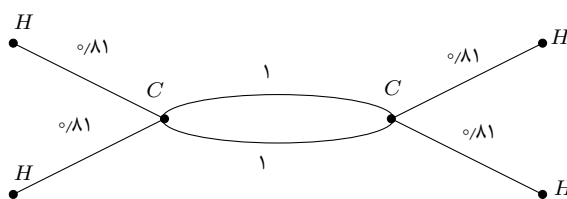
تعریف ۳.۲.۵. شاخص (PI_v) فازی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$PI_{v_f}(G) := \sum_{e \in E(G)} n_{f_e}(G)$$

که در آن $n_{e_f}(G) = n_{u_f}(e|G) + n_{v_f}(e|G)$ به طوریکه

$$n_{u_f}(e|G) := |\{a \in V(G) | d_f(u, a) < d_f(v, a)\}|, \quad n_{v_f}(e|G) := |\{a \in V(G) | d_f(v, a) < d_f(u, a)\}|$$

مثال ۲.۲.۵. گراف فازی اتیلن را در نظر می‌گیریم:



شکل ۸.۵: گراف مولکولی فازی C_2H_4

شاخص پادماکار-ایوان رآسی فازی برای گراف برابر است با:

$$PI_{v_f}(G) := \sum_{e \in E(G)} n_{f_e}(G) = 4(1 + 5) + 2(3 + 3) = 36$$

که به طور مثال فاصله فازی برای مسیر $P = (H, C, C, H)$ برابر است با:

$$d_f(H, H) = \wedge_P \{L(P) * S(P)\} = 3 \times 0.5$$

فصل ۶

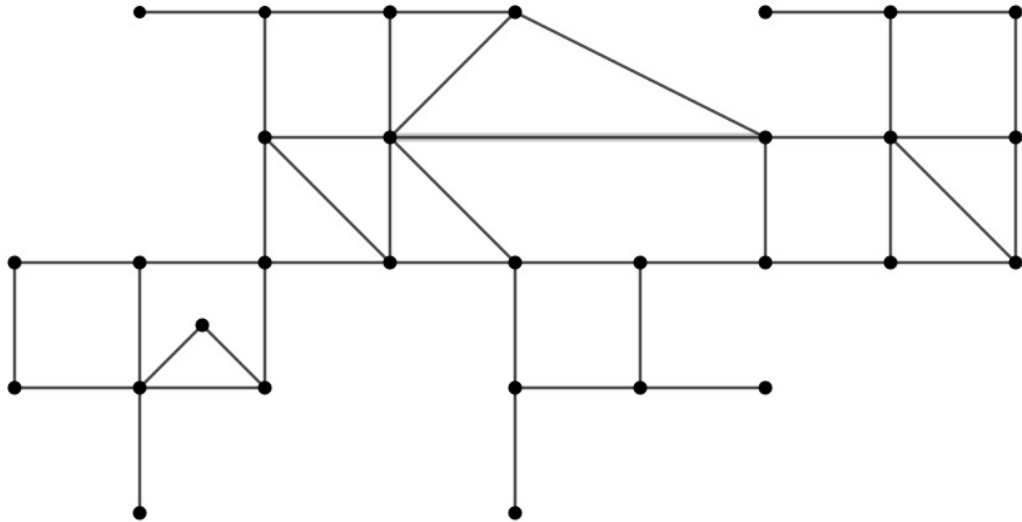
بعضی دیگر از کاربردهای ماتریس فاصله در گراف‌ها

تمام مفاهیم این فصل مبتنی بر مرجع [۳] است.

۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در برخی از شاخص‌های گراف

در این بخش درباره برخی کاربردهای فاصله در گراف بحث می‌کنیم. بر این اساس مباحث مکان‌یابی براساس کاربرد مسئله فاصله را در برخی از شاخص‌های گراف توضیح خواهیم داد. حال برای مثال گسترش شهر نیوهامبرگ^۱ را که به طور مشخص در سال‌های گذشته توسعه یافته است در نظر بگیرید. انجمن گسترش شهر به این نتیجه رسیده است که این قسمت‌ها مرکز پلیس، مرکز آتش‌نشانی، مرکز توزیع روزنامه و اداره پست مستقل نیاز دارند. کمیته طراحی شهر باید مطمئن‌ترین مکان‌ها را برای این موارد مشخص کند. سیستم خیابان‌ها را می‌توان با گرافی مدل‌سازی کرد. در این گراف، رأس‌ها به‌وسیله یک یال بهم وصل می‌شوند اگر خیابانی تقاطع‌های نظیر را به هم وصل کند اما با تقاطع سومی مواجه نشود. ما چنین تقاطع‌هایی را تقاطع مجاور می‌نامیم. برای مثال، گراف G شکل ۱.۶ مدلی برای تقسیم‌بندی سیستم خیابانی در حومه شهر است.

^۱New Hamburg



شکل ۱.۶: گراف G

۱.۱.۶ کاربرد مربوط به شعاع گراف

این کاربرد مبتنی بر تعریف شعاع گراف است و به صورت زیر نمایش داده می شود.

$$rd(G) = \min e(v) = \min(\max(d(u, v)))$$

مسئله - مدل ۱.۱.۱.۶. بر اساس تعریف شعاع گراف، کاربرد مسئله فاصله در شعاع گراف می تواند مکان هایی را تعیین نماید که فاصله دسترسی به مراکز خدماتی برای دورترین افراد حوزه خدماتی، کمترین باشد.

۲.۱.۶ کاربرد مربوط به قطر گراف

این کاربرد مبتنی بر تعریف قطر گراف به صورت رابطه زیر نمایش داده می شود.

$$diam(G) = \max e(v) = \max(\max(d(u, v)))$$

مسئله - مدل ۱.۲.۱.۶. بر اساس تعریف قطر گراف، کاربرد مسئله فاصله در قطر گراف می تواند مکان هایی را تعیین نماید که حداکثر زمان برای ارائه خدمات به دورترین افراد حوزه خدماتی را اندازه گیری نماید. و یا بالعکس فرض شود بخواهند کارخانه ای احداث کنند که آلودگی زیادی ایجاد می کند یا مرغداری که بوی زیادی تولید می کند، بنابراین مکان این کارخانه باید جایی باشد که از سایر نقاط بیشترین فاصله را داشته باشد و در هر حال در حوزه خدماتی مورد نظر هم واقع باشد.

۳.۱.۶ کاربرد مربوط به مجموع فواصل گراف

این کاربرد مبتنی بر تعریف مجموع فواصل گراف به صورت رابطه زیر نمایش داده می‌شود.

$$D(v) = \sum_{u \in V(G)} d(v, u)$$

مسئله - مدل ۱.۳.۱.۶. بر اساس تعریف مجموع فواصل گراف، کاربرد مسئله فاصله در مجموع فواصل گراف می‌تواند مجموع فواصل مکان‌ها را در یک حوزه مشخص نماید.

طرح مسئله ۱.۳.۱.۶. یک پستچی بر حسب نوع شغلش مجبور است به تمام مکان‌های مورد نظر سر زده و محموله پستی را در سطح شهر پخش کند. این کاربرد، مجموع فواصلی که پستچی در یک روز طی می‌کند را محاسبه می‌کند.

۴.۱.۶ کاربرد مربوط به حداقل مجموع فواصل گراف

این کاربرد مبتنی بر تعریف حداقل مجموع فواصل گراف به صورت رابطه زیر نمایش داده می‌شود.

$$D^* = \min_{v \in V(G)} D(v)$$

مسئله - مدل ۱.۴.۱.۶. بر اساس تعریف حداقل مجموع فواصل گراف، کاربرد مسئله فاصله در مجموع فواصل گراف می‌تواند حداقل مجموع فواصل مکان‌ها را در یک حوزه مشخص نماید.

طرح مسئله ۱.۴.۱.۶. به عنوان یک مسئله، مثلاً موضوع پیدا کردن مکانی برای احداث دبیرخانه است که مجموع فاصله‌ی این مکان تا بقیه‌ی مکان‌های موجود مینیمم باشد. یا در واقع مکان پستی از جایی شروع شود که تمام مکان‌های دیگر را ملاقات کرده و در مجموع مسافت طی شده‌اش کمترین شود.

۵.۱.۶ کاربرد مربوط به جمع مجموع فواصل گراف

این کاربرد مبتنی بر تعریف جمع مجموع فواصل گراف به صورت رابطه زیر نمایش داده می‌شود.

$$S(D(v)) = \frac{1}{p} \sum_{v \in V(G)} D(v)$$

مسئله - مدل ۱.۵.۱.۶. بر اساس تعریف مجموع فواصل گراف، کاربرد مسئله فاصله در جمع مجموع فواصل گراف می‌تواند جمع مجموع فواصل مکان‌ها را در یک حوزه مشخص نماید.

طرح مسئله ۱.۵.۱.۶. وقتی که یک پستچی بخواهد محموله پستی را به مکان‌های مورد نظر رسانده و سفارش‌هایی نیز تحویل گرفته و به سایر مراکز ببرد برای محاسبه مجموع مسافت طی شده از این کاربرد می‌تواند استفاده کند.

۶.۱.۶ کاربرد مربوط به میانگین مجموع فواصل گراف

این کاربرد مبتنی بر تعریف میانگین مجموع فواصل گراف به صورت رابطه زیر نمایش داده می‌شود.

$$D_a(v) = \frac{1}{n} \sum_{v \in V(G)} D(v)$$

مسئله - مدل ۱.۶.۱.۶. بر اساس تعریف مجموع فواصل گراف، کاربرد مسئله فاصله در میانگین مجموع فواصل گراف می‌تواند میانگین مجموع فواصل مکان‌ها را در یک حوزه مشخص نماید.

طرح مسئله ۱.۶.۱.۶. وقتی که بخواهیم میانگین مجموع مسافت طی شده (مثلا در موضوع پست‌چی) را محاسبه کنیم از این کاربرد می‌توان استفاده کرد.

۷.۱.۶ کاربرد مربوط به تعیین پراکندگی فاصله‌ها

فرض شود که گراف $G = (V, E)$ با n رأس و $D(v)$ مجموع فاصله‌ها و $D_a(v)$ میانگین مجموع فاصله‌های گراف G باشد. کاربرد مسئله فاصله در شاخص تعیین پراکندگی فاصله‌های گراف به صورت رابطه زیر نمایش داده می‌شود.

$$\Delta(D) = \frac{1}{n} \sum_{v \in V(G)} |D(v) - D_a(v)|$$

مسئله - مدل ۱.۷.۱.۶. این کاربرد مشابه واریانس پراکندگی داده‌ها، پراکندگی فاصله‌ها را نشان می‌دهد. با این معیار می‌سنجیم که برای هر مکان نسبت به مکان‌های دیگر این پراکندگی به چه میزان است.

۸.۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در میانه گراف

این کاربرد مبتنی بر تعریف میانه گراف به صورت زیر نمایش داده می‌شود.

$$M(G) = \left\{ \min_{v \in V(G)} D(v) \right\}$$

مسئله - مدل ۱.۸.۱.۶. در این مسئله میانگین فاصله‌های لازم برای دسترسی هر شخص به محل خدمات اضطراری مینیمم می‌شود.

طرح مسئله ۱.۸.۱.۶. انتخاب محل احداث خدمات اضطراری بطوریکه میانگین فاصله‌های لازم برای دسترسی هر شخص به محل خدمات اضطراری در حوزه‌اش مینیمم باشد.

روش حل ۱.۸.۱.۶. حل این مسئله، متناظر با پیدا کردن میانه در گراف می‌باشد. زیرا حل مسئله باید بتواند میانگین فاصله‌های لازم برای دسترسی هر شخص به محل خدمات اضطراری در حوزه‌اش را مینیمم کند.

۹.۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در میانگین خروج از مرکز

فرض شود که گراف $G = (V, E)$ با n رأس داده شده باشد و $e(v)$ خروج از مرکز رأس v باشد. خروج از مرکز گراف G عبارت است از مجموع خروج از مرکز همه رئوس که به صورت رابطه زیر است.

$$e(G) = \sum_{v \in V(G)} e(v)$$

میانگین خروج از مرکز مبتنی بر تعریف خروج از مرکز گراف به صورت رابطه زیر نمایش داده می‌شود.

$$e_a(G) = \frac{e(G)}{n} = \frac{\sum_{v \in V(G)} \min(\max(d(u, v)))}{n}$$

مسئله - مدل ۱.۹.۱.۶. این مسئله می‌تواند مسئله‌ی پیدا کردن مکانی باشد که فاصله‌اش از بقیه‌ی مکان‌های موجود نه خیلی دور و نه نزدیک باشد.

طرح مسئله ۱.۹.۱.۶. تعیین محل احداث فروشگاه‌های بزرگ. چون احداث فروشگاه‌های بزرگ در مرکز شهر، باعث ترافیک و شلوغی بیشتر می‌شود و از طرف دیگر ممکن است که مردم علاقه‌مند به خرید از این فروشگاه‌ها باشند، چون باعث صرفه‌جویی در وقت و هزینه‌ها می‌شود. مکان احداث این فروشگاه‌ها را می‌توان از طریق میانگین خروج از مرکز گراف به دست آورد. یعنی مکان‌های که نه خیلی دور و نه در مرکز شهر باشد.

۱۰.۱.۶ کاربرد مسئله فاصله در شاخص‌های پراکندگی

فرض شود که گراف $G = (V, E)$ با n رأس داده شده باشد و $e(v)$ خروج از مرکز رأس v و $e_a(G)$ میانگین خروج از مرکز گراف G باشد، میزان پراکندگی رأس‌های گراف به صورت زیر نمایش داده می‌شود.

$$\Delta(G) = \frac{1}{n} \sum_{v \in V(G)} |e(v) - e_a(G)|$$

مسئله - مدل ۱.۱۰.۱.۶. این مدل معادل واریانس در آمار است همان طور که واریانس پراکندگی داده‌ها را می‌دهد، این مدل هم پراکندگی فاصله‌ی رأس‌ها را از هم نشان می‌دهد.

طرح مسئله ۱.۱۰.۱.۶. فرض شود بخواهیم میزان پراکندگی مدارس سطح شهر را از هم بسنجیم، این مدارس را به عنوان رأس در نظر می‌گیریم و میزان پراکندگی آن‌ها را می‌یابیم. یا می‌توان رئوس را مراکز خدمات‌رسانی یا آتش‌نشانی سطح شهر در نظر گرفت. مقدار $\Delta(G)$ ، میزان پراکندگی این مراکز را نشان می‌دهد.

۲.۶ مسائل مکان‌یابی و تابع فاصله

مسائل مکان‌یابی یک گراف در قالب یک شبکه دیده می‌شود. یعنی مطالعه بر روی مسائل مکان‌یابی روی شبکه است. در مکان‌یابی معمولاً به دنبال بررسی محل مناسب قرار گرفتن یک یا چند تسهیلات برای رسیدن به هدفی مشخص می‌باشند. در واقع این مسائل عمدتاً با استقرار بهینه تسهیلات جهت حداقل کردن هزینه‌های ناشی از حمل و نقل و غیره سر و کار دارند. تسهیلات می‌توانند هر مجموعه شامل کارخانه، دانشگاه، بیمارستان و غیره باشند. از جمله کاربردهای این مسائل می‌توان به مکان‌یابی محل احداث کارخانه، مراکز خرید، رستوران، پایگاه‌های اورژانس و سازمان‌های دولتی در شهرها با اهدافی مانند حداقل کردن هزینه جابجایی مشتریان یا حمل و نقل مواد اولیه و غیره اشاره کرد. برای تعیین محل استقرار معیارهای مهمی موثرند، از جمله نزدیکی به جاده‌های اصلی، بازار مصرف، شرایط محیطی، امکان توسعه، مقررات و قوانین دولتی و غیره. ارتباط بحث مکان‌یابی با فاصله در دو مسئله مهم از مکان‌یابی شامل: مسائل p -مرکز^۲، مسائل p -میانه^۳ است. تاریخچه مختصری از موضوع مکان‌یابی در زیرنویس آورده شده است. ^۴ در مسائل مکان‌یابی روی شبکه از آن‌جا که بیش از یک مسیر بین هر دو نقطه وجود دارد از کوتاه‌ترین مسیر برای تعیین فاصله بین دو نقطه استفاده می‌کنند. در شکل شماره ۲.۶ مسئله ۳- مرکز نمایش داده شده است.

تعریف ۱.۲.۶. یک شبکه^۵ یک گراف جهت‌دار D با دو رأس ویژه s و t است که به ترتیب مبدأ و مقصد آن نامیده می‌شوند، یک تابع صحیح غیر منفی c روی $E(D)$ که **تابع ظرفیت** N ^۶ نامیده می‌شود. تابع c مقادیر صحیح غیرمنفی و ∞ می‌گیرد. گراف جهت‌دار D **گراف**

^۲P-median problem

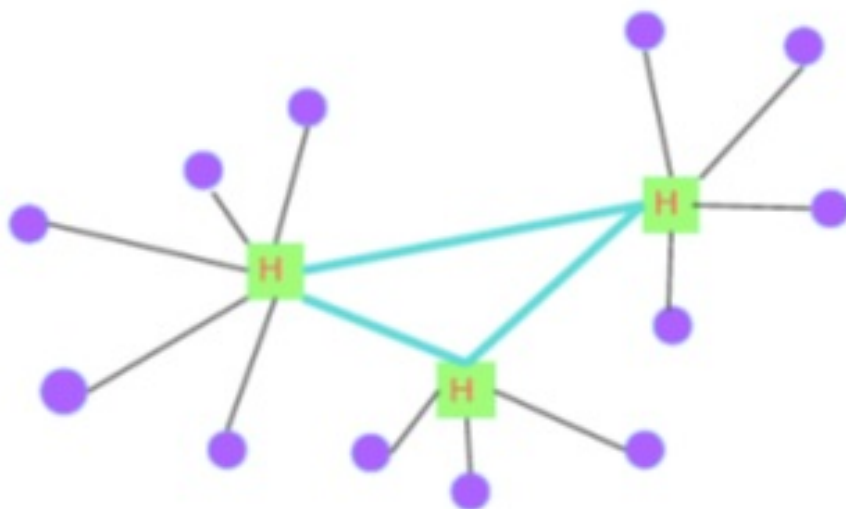
^۳P-median problem

^۴ در قرن هفدهم فرما، مساله مکان‌یابی را به این صورت مطرح نمود: فرض کنید سه نقطه در صفحه داده شده است، نقطه چهارم را به گونه‌ای بیابید که مجموع فاصله‌های آن تا سه نقطه داده شده مینیمم شود. توریچلی در سال ۱۶۴۰ این مساله را حل کرده است. اگر سه نقطه داده شده را سه رأس یک مثلث در صفحه بگیریم، محل برخورد دایره‌های محیطی مثلث‌های متساوی‌الاضلاعی که بر روی اضلاع مثلث اصلی و رو به بیرون آن ساخته می‌شوند، جواب مساله است. به همین دلیل مساله را مساله فرما و نقطه جواب را نقطه توریچلی نامیده‌اند. در سال ۱۹۰۹ اولین تعریف مساله مکان‌یابی به صورت کاربردی و مدرن توسط آلفرد وبر ارائه شد. وبر در این کتاب نتایج تحقیقات خود در مورد صنایع کارخانه‌ای را ارائه کرده است. بیست سال قبل از ارائه تئوری مکان‌یابی صنعتی توسط وبر، لانهارد به طور جزئی‌تر به این امر همت گماشته بود. مطالعات جدی بر روی مکان‌یابی از زمانی شروع شد که در سال ۱۹۶۴ حکیمی، تابع هدف را به دو صورت کم‌ترین مجموع و مینیماکس مطرح کرد. او همچنین مطالعاتی بر روی مسائل مکان‌یابی روی شبکه انجام داد که نقطه شروع مکان‌یابی گسسته مدرن است.

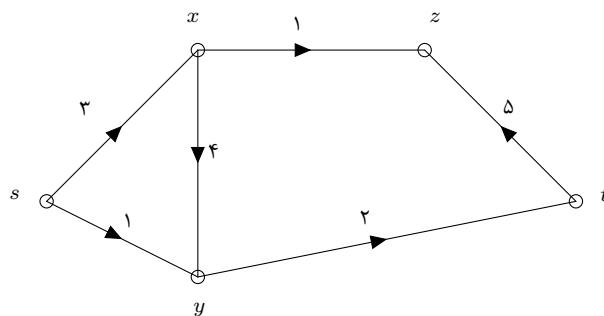
^۵Network

^۶capacity function

جهت‌دار زمینه N^y نامیده می‌شود. اگر $a = (u, v)$ یک کمان از D باشد، آنگاه $c(a) = c(u, v)$ ظرفیت a^{\wedge} نامیده می‌شود. در شکل ۳.۶ یک شبکه با $c(x, y) = ۴$ و $c(z, t) = ۵$ نشان داده شده است.



شکل ۲.۶: نمایش مسئله ۳-مرکز



شکل ۳.۶: یک شبکه

^y Basic directional graph

[^] capacity

۱.۲.۶ مسائل p -مرکز

مسائل p -مرکز به عنوان دسته‌ای از مسائل مکان‌یابی، عبارت‌است از یافتن p -مرکز عرضه (کالا یا خدمات) روی یک گراف به گونه‌ای که حداکثر فاصله حمل کالا یا خدمات از مراکز عرضه به مراکز تقاضا مینیمم گردد. در بسیاری از مسائل دنیای واقعی هدف حداقل کردن حداکثر هزینه‌های ناشی از یک طرح است. چنین مسائلی را مسائل مکان‌یابی "حداقل حداکثر"^۹ می‌گویند. به عنوان مثال یک نمونه از مسائلی که به صورت مینیماکس فرمول‌بندی می‌شود، مساله مکان‌یابی درمانگاه در نواحی روستایی است. در این مورد درمانگاه باید به گونه‌ای مستقر شود که حداکثر مسافتی که یک بیمار باید تا درمانگاه طی کند حداقل شود. در واقع با این هدف می‌خواهیم ریسک بدترین شرایط را حداقل کنیم. در مساله p -مرکز، مرکزها می‌توانند هر نقطه روی گراف باشند در این حالت مساله را مساله p -مرکز محض^{۱۰} می‌گویند. در صورتی که محل مراکز را تنها به روی رأس‌ها محدود کنیم مساله را مساله p -مرکز رأسی^{۱۱} می‌نامیم. این مساله در حالت عمومی برای p دلخواه، NP-hard می‌باشد. بنابراین بسیاری از محققان روی گراف‌های ساده‌تر از جمله درخت، کاکتوس و غیره متمرکز شدند. در حال حاضر بهترین الگوریتم‌ها برای این مساله روی درخت و کاکتوس دارای پیچیدگی زمانی $O(n)$ هستند.

۲.۲.۶ کاربرد مسئله فاصله مربوط به مسائل p -مرکز

فرض کنید گراف $G = (V, E, W)$ با n رأس داده شده باشد، تابع فاصله $d : E \rightarrow N$ ، عدد طبیعی $p \in N$ به طوری که $p \leq |V|$ را در نظر بگیرید، از آنجا که مساله p -مرکز عبارت است از یافتن p -مرکز عرضه (کالا یا خدمات) روی یک گراف به گونه‌ای که حداکثر فاصله حمل کالا یا خدمات از مراکز عرضه به مراکز تقاضا مینیمم گردد، کاربرد مسئله فاصله مربوط به مسائل p -مرکز به صورت زیر می‌باشد:

$$\min(\delta(S) = \max_{v \in V-S} d(v, S)) \quad \forall v \in V$$

$$S \subseteq V, |S| = p \text{ که}$$

۳.۲.۶ کاربرد مسئله فاصله مربوط به مسائل p -میانه

مسائل p -میانه نیز به عنوان یکی دیگر از دسته مسائل مکان‌یابی است. در این نوع مسائل، هدف انتخاب یک مجموعه از p -مرکز (خدمات‌دهنده) است به طوری که مجموع فاصله

^۹ minimax

^{۱۰} Absolute p-center problem

^{۱۱} Vertex p-center problem

(وزن) مشتری‌ها (خدمات‌گیرندگان) به نزدیکترین مرکز، کمترین شود. یعنی انتخاب p -مرکز و تخصیص هر یک از مشتریان به نزدیکترین مرکز برای حداقل کردن کل هزینه. بنابراین کاربرد مسئله فاصله مربوط به مسائل p -میانه نیز به صورت زیر می‌باشد:

$$\left(\sum_{v_i \in N} w_i \min_{x_i \in X} (d(x_i, v_i)) \right), \quad \forall v_i \in N = \sum_{v_i \in N} w_i d(X, v_i), \quad d(X, v_i) = \min_{x_i \in X} d(x_i, v_i)$$

در مسئله p -میانه روی شبکه، هدف پیدا کردن مجموعه $X = \{x_1, x_2, \dots, x_p\}$ شامل مکان p سرویس دهنده روی شبکه $N = (V, E)$ است به گونه‌ای که مجموع فاصله‌ها از این مجموعه تا تمام رئوس روی N کمترین باشد. فاصله هر رأس $v \in V$ از مجموعه X به صورت فاصله v تا نزدیکترین نقطه در X تعریف می‌شود و هر رأس v_i دارای یک وزن w_i می‌باشد.

پیوست آ

نام	نماد
گراف	G
درخت	T
مجموعه رأس‌ها	V
مجموعه یال‌ها	E
گراف خطی	$L(G)$
گراف کامل	K_n
دور به طول n	C_n
گراف دوبخشی کامل	$K_{m,n}$
فاصله u از v در گراف G	$d_G(u, v)$
قطر گراف G	$diam(G)$
درجه ورودی مینیمم	δ
درجه ورودی ماکسیمم	Δ
درجه رأس v از G	$d_G(v)$
خروج از مرکز	$e(v)$
شاخص وینر	W
شاخص شولتز	$MTI(G)$
شاخص پادماکار-ایوان	PI
شاخص پادماکار-ایوان رأسی	PI_v
شاخص پادماکار-ایوان وزنی	$PI_w(G)$
شاخص سگد	$Sz(G)$
گراف فازی	G_f
ماتریس فاصله فازی	D_f
فاصله فازی	d_f

جدول آ.۱: نمایه

پیوند	انرژی	پیوند	انرژی	پیوند	انرژی	پیوند	انرژی
$AL - H$	۲۸۰	$C - C$	۳۴۷	$Cr - O$	۴۲۳	$N - CL$	۲۵۹
$AL - I$	۳۶۴	$C = C$	۶۱۱	$F - F$	۱۵۴	$N \equiv C$	۸۹۱
$AL - O$	۴۸۱	$C \equiv C$	۸۳۹	$F - H$	۵۶۵	$N - F$	۲۹۷
$Au - H$	۲۵۸	$C - CL$	۳۲۹	$F - O$	۱۵۵	$N - H$	۳۸۶
$B - Br$	۴۳۳	$C - F$	۴۸۰	$H - H$	۴۳۲	$N - N$	۱۶۳
$B - CL$	۵۳۱	$C - H$	۴۱۴	$I - CL$	۲۰۷	$N = N$	۴۱۸
$B - F$	۵۲۳	$C - I$	۲۲۶	$I - Br$	۱۷۵	$N \equiv N$	۹۴۱
$B - H$	۳۲۶	$N - C$	۷۳۰	$I - I$	۱۴۸	$Na - CL$	۴۱۰
$B - O$	۳۸۵	$C - O$	۳۷۲	$I - O$	۱۸۰	$O - H$	۴۶۴
$B - S$	۴۹۴	$C = O$	۷۴۵	$K - CL$	۴۳۲	$O - O$	۱۴۲
$Ba - H$	۱۷۲	$C \equiv O$	۱۰۷۲	$Li - F$	۵۷۳	$O = O$	۴۹۸
$Ba - CL$	۴۵۶	$Ca - O$	۴۶۰	$Mg - F$	۵۴۵	$S - H$	۳۷۷
$Ba - O$	۴۴۴	$CL - CL$	۲۳۹	$Mg - O$	۳۷۷	$S - OL$	۵۱۷
$Ba - CL$	۲۱۶	$CL - F$	۲۸۴	$N - Br$	۲۸۵	$S - S$	۴۲۴
$C - Br$	۲۸۰	$CL - O$	۲۶۷	$N - F$	۲۹۷	$S = S$	۶۰۳

جدول آ.۲: انرژی پیوند (واحد انرژی پیوند $kJmol^{-1}$ است)

عنصر	الکترون گاتیوی	عنصر	الکترون گاتیوی
<i>H</i>	۲/۲۰	<i>Mg</i>	۱/۳۱
<i>F</i>	۳/۹۸	<i>N</i>	۳/۴
<i>Li</i>	/۹۸	<i>Ca</i>	۱/۰۰
<i>CL</i>	۳/۱۸۶	<i>P</i>	۳/۱۹
<i>Na</i>	/۶۳	<i>Sr</i>	/۹۵
<i>Br</i>	۲/۹۶	<i>As</i>	۲/۱۸
<i>K</i>	/۸۲	<i>Ba</i>	/۸۹
<i>I</i>	۲/۶۶	<i>C</i>	۲/۵۵
<i>Rb</i>	/۸۲	<i>Y</i>	۱/۳۶
<i>At</i>	۲/۲۰	<i>Si</i>	۱/۹
<i>Cs</i>	/۷۹	<i>Ti</i>	۱/۲۲
<i>O</i>	۳/۴۴	<i>Ge</i>	۲/۰۱
<i>Fr</i>	/۷۰	<i>Zr</i>	۱/۳۳
<i>S</i>	۲/۵۸	<i>B</i>	۲/۰۴
<i>Be</i>	۱/۵۷	<i>V</i>	۱/۶۳
<i>Se</i>	۲/۵۵	<i>AL</i>	۱/۶۱

جدول آ.۳: الکترون گاتیوی برخی عناصر

عنصر	شعاع	عنصر	شعاع	عنصر	شعاع	عنصر	شعاع
<i>H</i>	۳۷	<i>Mg</i>	۱۶۰	<i>C</i>	۷۷	<i>F</i>	۷۲
<i>Li</i>	۱۵۲	<i>Ca</i>	۱۹۷	<i>Si</i>	۱۱۸	<i>CL</i>	۱۰۰
<i>Na</i>	۱۸۶	<i>Ba</i>	۲۲۲	<i>N</i>	۷۴	<i>Br</i>	۱۱۴
<i>K</i>	۲۲۷	<i>AL</i>	۱۴۳	<i>P</i>	۱۱۰	<i>I</i>	۱۳۳
<i>Cs</i>	۲۶۵	<i>Ga</i>	۱۳۵	<i>O</i>	۷۳	<i>He</i>	۵۰
<i>Be</i>	۱۱۲	<i>Ti</i>	۱۷۰	<i>S</i>	۱۰۳	<i>Ar</i>	۹۸

جدول آ.۴: شعاع اتمی برخی از عناصر (واحد شعاع اتمی *pm* است)

پیوند	طول	پیوند	طول	پیوند	طول	پیوند	طول
$AL - H$	۱/۸	$C - C$	۱/۵۴	$Cr - O$	۲/۴	$N - CL$	۱/۷۹
$AL - I$	۲/۷۶	$C = C$	۱/۳۴	$F - F$	۱/۴۲	$N \equiv C$	۱/۱۶
$AL - O$	۲/۱۶	$C \equiv C$	۱/۲۰	$F - H$	۰/۹۲	$N - F$	۱/۳۹
$Au - H$	۲/۸۱	$C - CL$	۱/۷۷	$F - O$	۱/۴۲	$N - H$	۱/۰۱
$B - Br$	۲/۰۱	$C - F$	۱/۳۲	$H - H$	۰/۷۴	$N - N$	۱/۴۵
$B - CL$	۱/۸۷	$C - H$	۱/۰۹	$I - CL$	۲/۳۲	$N = N$	۱/۲۳
$B - F$	۱/۶	$C - I$	۲/۱۴	$I - Br$	۲/۴۷	$N \equiv N$	۱/۰۹
$B - H$	۱/۲۴	$N - C$	۱/۴۷	$I - I$	۲/۶۷	$Si - CL$	۲/۰۴
$B - O$	۱/۶۱	$C - O$	۱/۴۳	$I - O$	۱/۹۴	$O - H$	۰/۹۶
$B - S$	۱/۹	$C = O$	۱/۲۳	$K - CL$	۳/۲۷	$O - O$	۱/۴۸
$Ba - H$	۲/۶	$C \equiv O$	۱/۱۳	$Li - F$	۲/۲۲	$O = O$	۱/۲۱
$Ba - CL$	۳/۲۲	$Ca - O$	۲/۷	$Mg - F$	۲/۳۲	$S - H$	۱/۳۵
$Ba - O$	۲/۹۶	$CL - CL$	۱/۹۹	$Mg - O$	۲/۳۳	$S - CL$	۱/۹۹
$H - CL$	۱/۲۷	$CL - F$	۱/۶۳	$N - Br$	۱/۸۸	$S - S$	۲/۰۷
$C - Br$	۱/۹۴	$CL - O$	۱/۴۹	$N - F$	۱/۳۹	$S = S$	۱/۸۸

جدول آ.۵: طول پیوند (واحد طول پیوند A) است

عبارت‌های علم شیمی	عبارت‌های نظریه گراف
ساختار مولکولی	گراف مولکولی
اتم	رأس
پیوند شیمیایی	یال
بعضی از ویژگی‌های اتم	رأس وزن دار
بعضی از ویژگی‌های پیوند	یال وزن دار
مولکول بدون حلقه	درخت
سیکلوئید	دور

جدول آ.۶: معادل سازی بین نظریه گراف و علم شیمی

مراجع

- [۱] آدینه‌پور باغبان س (۱۳۹۱)، پایان‌نامه ارشد: “انرژی گراف‌های فازی”، دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [۲] پرتوئی ط، (۱۳۸۱)، “شیمی آلی ۲ و ۱”، انتشارات دانشگاه پیام نور تهران
- [۳] رحیمی شعرباف مقدس ص، (۱۳۹۶)، “نظریه مدل‌سازی گراف‌ها و بهینه‌سازی ترکیبیاتی”، در دست چاپ
- [۴] کازئوت، (۱۳۸۰)، “مقدمه‌ای بر منطق فازی برای کاربردهای عملی”، ترجمه علی وحیدیان کامیاد و حامد رضا طارقیان، انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد
- [۵] مورتیمر چ، (۱۹۸۶)، “شیمی عمومی”، ترجمه عیسی یآوری، جلد اول، ویراست ششم، نشر علوم دانشگاهی
- [6] M. Alaeiyan, J. Asadpour and R. Mojarad, Computing of Some Topological Indices of Corona Product Graphs, *Aust. J. Basic Appl. Sci.*, 5 (2011), 145-152.
- [7] R. Balakrishnan and K. Ranganathan, *A Text Book of Graph Theory, Second edition*, Springer, New York, 2012.
- [8] F. Buckley, *Mean distance in line Graphs*, Congr, Numer, 32(1981) 153-162.
- [9] G. Chartrand, L. Lesniak, *Graphs and Digraphs*, Fourth edition, CRC Press, Boca Raton, (2005).
- [10] Z. Cui, B. Liu, On Harary matrix, Harary index and Harary energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 68 (2012), 815–823.
- [11] P. Dankelmann, I. Gutman, S. Mukwembi, H. C. Swart, The edge-Wiener index of a graph, *Discrete Math.* 309 (2009), 3452–3457.
- [12] A. A. Dobrynin, A. A. Kochetova, Degree distance of a graph: a degree analogue of the Wiener index, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 34 (1994), 1082–1086.

-
- [13] A. A. Dobrynin, L. S. Mel'nikov, Wiener index for graphs and their line graphs with arbitrary large cyclomatic numbers, *Appl. Math. Lett.* 18 (2005), 307–312.
- [14] A. A. Dobrynin, L. S. Mel'nikov, Wiener index of line graphs, in I. Gutman, B. Furtula (Eds.) *Distance in Molecular Graphs Theory*, Univ. Kragujevac, Kragujevac (2012), 85–121.
- [15] M. Essalih, M. E. Marraki and G. E. Hagri, Calculation of some topological indices of graphs, *J. Theoret. Appl. Inform. Technol.* 30 (2011) 122–127.
- [16] W. Gao, M.R Farahani, M. Imran, R. Kanna, Distance-based topological polynomials and indices of friendship graphs, *SpringerPlus*, 2016, 5, 1563.
- [17] X. Guo, D. J. Klein, W. Yan, Y. N. Yeh, Hyper-Wiener vector, Wiener matrix sequence, and Wiener polynomial sequence of a graph, *Int. J. Quantum Chem.* 106 (2006) 1756–1761.
- [18] I. Gutman, Selected Properties of the Schultz Molecular Topological Index, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 34 (1994), 1087-1089.
- [19] J. Hao, Some graphs with extremal PI index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 63 (2010), 211-216.
- [20] F. Harary, *Graph Theory*, Addison-Wesley, Reading MA, 1969.
- [21] Q. Hu, Y. Liang and K. Fang, The matrix expression, topological index and atomic attribute of molecular topological structure, *Journal of Data Science*, I: (361-386), 2003.
- [22] A. Ilic, Note on PI and Szeged indices, *Mathematical and Computer Modelling* 52 (2010), 1570-576.
- [23] O. Ivanciuc, T. S. Balaban, A. T. Balaban, Design of topological indices, part 4, reciprocal distance matrix, related local vertex invariants and topological indices, *J. Math. Chem.* 12 (1993), 309-318.
- [24] M. H. Khalifeh, H. Yousefi-Azari, A. R. Ashrafi, A matrix method for computing Szeged and vertex PI indices of join and composition of graphs, *Linear Algebra Appl.* 429 (2008) 2702-2709.
- [25] S. Klavzar, A. Rajapakse, I. Gutman, The Szeged and the Wiener index of graphs, *Applied Mathematics Letters* 9 (1996), 45-49.
- [26] M. Knor, R. Krekovski, A. Tepeh, Mathematical aspects of Wiener index, *Ars Math. Contemp.* 11 (2016) 327-352.

- [27] M. Knor, R. Skrekovski, Wiener index of line graphs, in M. Dehmer and F. Emmert-Streib (Eds.), *Quantitative Graph Theory: Mathematical Foundations and Applications*, CRC Press 279–301 (2014).
- [28] J. Mathew, S. Mathew, A characterization of fuzzy self centered graphs, *Annals of Fuzzy Mathematics and Informatics*, vol. 2015.
- [29] R. Merris. *An edge version of the matrix-tree theorem and the Wiener index*. Linear and Multilinear Algebra, 25:291-296, 1989.
- [30] B. K. Mishra, Molecular graph characteristic of some hydrocarbons through graph theory, sambalpur university, Ind,2002.
- [31] B. K. Mishra, *Molecular graph characteristic of some hydrocarbons through graph theory*, First international Lecture Series on Discrete Mathematical chemistry, Biology and physics, Joti Vihar, 768 019, 2007.
- [32] M. J. Nadjafi-Arani, G. H. Fath-Tabar, A. R. Ashrafi, Extremal graphs with respect to the vertex PI index, *Appl. Math. Lett.* 22 (2009), 1838-1840.
- [33] A. Nagoorgani and P. Vadivel, Relations between the parameters of independent domination and irredundance in fuzzy graph, *International Journal of Algorithms, Computing and Mathematics*, 2(1), 15-19, 2009.
- [34] X. L. Qiu, X. F. Guo, On Graphs with Same Distance Distribution. *Applied Mathematics* , 8 (2017), 799-807.
- [35] M. Randic, Novel Molecular Descriptor for Structure-Property Studies. *Chemical Physics Letters* , 211 (1993), 478-483.
- [36] M. Randic, X. Guo, T. Oxley and H. Krishnapriyan, Wiener matrix: source of novel graph invariants, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 33 (1993) 709-716.
- [37] N. Sabine, (2010), Diploma thesis, The Wiener index of a graph, Diplomstudium Technische Mathematik. Graz University of Technology
- [38] B. E. Sagan, Y. N. Yeh and P. Zhang, The Wiener Polynomial of a Graph, *Int. J. Quant. Chem.*, 60 (1996), 959-969.
- [39] A. J. Schwenk, Computing the characteristic polynomial of a graph, in: A. Dold and B. Eckmann, eds., *Graphs and Combinatorics, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 406 (Springer, Berlin, 1974) 1533172*.

-
- [40] V. Sheeba Agnes, Degree distance and Gutman index of corona product of graphs, *Trans. Comb.* 4(3) (2015), 11-23
- [41] M. Tom, M. S. Sunitha, Sum Distance in fuzzy graph, *Annals of Pure and Applied Mathematics*, 7(2) (2014), 73-89.
- [42] M. Toufik , S. Matthias, The vertex PI index and Szeged index of bridge graphs, *In Discrete Applied Mathematics*, 157,7 ,2009 ,1600-1606.
- [43] D. B. West, (2001), *Introduction to Graph theory*, Prentice Hall, 2001.
- [44] Y. N. Yeh, I. Gutman, *On the sum of all distances in composite graphs*, *Discrete Math.* 135 (1994), 359–365.
- [45] S. Yousefi, A. R. Ashrafi, An exact expression for the wiener index of a polyhex nanotorus, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 56 (2006), 169–178.
- [46] H. Yousefi-Azari, B, Manoochehrian, A. R. Ashrafi, Szeged index of some benzenoid graphs applicable in nanostructures, *Ars Combin.* 84 (2007)

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

Size.....	اندازه
Labeled	برچسب
Graph constants.....	ثابت‌های گرافی
eccentric	خروج از مرکز
Degree	درجه
Star	ستاره
Topological index	شاخص توپولوژیکی
distance	فاصله
Fuzzy distance.....	فاصله فازی
Diameter	قطر
Bound	کران
Graph.....	گراف
Fuzzy graph.....	گراف فازی
Complete graph.....	گراف کامل
molecular graph	گراف مولکولی
Fuzzy molecular graph.....	گراف مولکولی فازی
Order	مرتبه
Fuzzy set.....	مجموعه فازی
Connected.....	همبند
Pendant Edge.....	یال آویزان

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

Bound	کران
Complete graph	گراف کامل
Connected	همبند
Degree	درجه
Diameter	قطر
distance	فاصله
eccentric	خروج از مرکز
Fuzzy distance	فاصله فازی
Fuzzy graph	گراف فازی
Fuzzy molecular graph	گراف مولکولی فازی
Fuzzy set	مجموعه فازی
Graph	گراف
Graph constants	ثابت گرافی
Labeled	برچسب
molecular graph	گراف مولکولی
Order	مرتبه
Pendant Edge	یال آویزان
Size	اندازه
Star	ستاره
Topological index	شاخص توپولوژیکی

Abstract

In this thesis, some of applications of distance matrix in molecular graphs, are investigated. In this regard, the properties of Wiener index as one of the most important topological indices of molecular graphs based on distance, are studied. Then, topological indices in the discussion of graphs combinations are investigated. In the following, the subject of the fuzzy Wiener index based on fuzzy distance and some of the properties of it are generalized innovative. also some other applications of distance matrix are investigated in graphs.

Keywords: topological indices, fuzzy distance, molecular graphs, fuzzy molecular graph, distance matrix, fuzzy distance matrix.



Shahrood University of Technology

Faculty Of Mathematical Sciences

MSc Thesis in: Graph and Combinatorics

Distance matrix applications in Molecular graphs

By: Mahboubeh Talebi

Supervisor

Sadegh Rahimi Sherbaf Moghaddas

January 2018