بسم الله الرحمن الرحیم

دانشکده علوم ریاضی

رساله دوره دکتری ریاضی محض (جبر)

عنوان

الگوریتمی برای محاسبه شاخص‌های معکوس وینر، شاخص همبندی و دتور گراف‌های همبند ساده و کاربرد آن در تعدادی از نانولوله‌ها و فولرن‌ها با استفاده از نرم افزار GAP

نام دانشجو

یاسر علیزاده

استاد راهنما

پروفسور علی ایرانمنش

مهر ماه ۱۳۹۱

تقدیم به

همسر عزیز و مهربانم

سپاس

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

بر خود لازم می‌دانم از تمامی کسانی که در انجام این رساله مرا یاری نمودند، تشکر و قدردانی کنم. لذا از استاد راهنمای محترم جناب آقای دکتر علی ایرانمنش که در تمامی مراحل اجرای تحقیق از راهنمایی‌ها و حمایت‌های خردمندانه ایشان بهره‌مند بودم کمال تشکر و سپاسگذاری را دارم. از همسر عزیزم که همواره مشوق و همراهم است بی‌نهایت سپاسگذارم. از جناب آقای دکتر میمنی و جناب آقای دکتر ایرانمنش که زحمت داوری این رساله را به عهده گرفتند بسیار متشکرم. از دانشگاه تربیت مدرس و وزارت علوم تحقیقات و فناوری که فرصت استفاده از دوره کوتاه مدت تحقیقاتی را برایم فراهم آوردند کمال تشکر را دارم و از تمامی دوستان و عزیزانی که یاری رسان من در پیمودن این راه بودند متشکرم.

چکیده

مطالعه شاخص‌های توپولوژیکی که بر پایه فاصله در گراف هستند در علوم زیستی، شیمی- فیزیک، و مطالعات QSAR و QSPR از سال ۱۹۴۷ شروع شد، زمانی که هارلد وینر، شاخص وینر را بمنظور اثبات روابط بین خواص شیمی فیزیک آلکن‌ها و ساختار گراف مولکولی آنها بکار برد. تا کنون تحقیقات گسترده‌ای بر روی خواص ریاضی شاخص‌های توپولوژیکی و روش‌ها و الگوریتم‌های محاسبه آنها در نظریه گراف‌ها و ریاضی-شیمی صورت گرفته است. پیشرفت‌های اخیر در زمینه نانو تکنولوژي باعث شده تا محاسبه شاخص‌هاي توپولوژیکی گراف‌هاي مولکولی مطرح مانند نانولوله‌ها و فولرن‌ها و نانو مخروط‌ها بسیار مورد توجه قرار گیرد. در این رساله، الگوریتمی برای محاسبه شاخص‌های توپولوژیکی که بر پایه فاصله در گراف تعریف می‌شوند ارائه می‌دهیم. الگوریتم را برای محاسبه شاخص وینر، شاخص معکوس وینر، شاخص وینر یالی، شاخص همبندی، شاخص سگد و شاخص پادماکار ایوان رأسی خانواده فولرن‌های $C_{۱۰n}$ بکار می‌بریم. همچنین برنامه‌ای به زبان GAP برای یافتن فاصله‌ها در گراف و برنامه‌ای برای محاسبه شاخص دتور نمایش داده شده است. روش‌های درونیابی تک پارامتری و دو پارامتری را در بدست آوردن فرمول‌های صریح شاخص‌های توپولوژیکی برای یک خانواده از گراف‌های همبند ساده تشریح می‌کنیم و برای خانواده فولرن‌های $C_{۱۲k+۴}$، فنلن‌های دوری R_h و نانو مخروط‌های $CNC_k[n]$ فرمول‌های صریح شش شاخص‌های توپولوژیکی مذکور را بدست می‌آوریم. در پایان شاخص وینر یالی تحت دو عمل جمع و کرونای گراف‌ها مورد بررسی قرار گرفته و دو شاخص توپولوژیکی جدید، شاخص جمعی-وزنی هراری و شاخص ضربی-وزنی هراری معرفی شده و تحت اعمال جمع، ترکیب، ترکیب فصلی و تفاضل متقارن گراف‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. مقالات [۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۳۸، ۳۹، ۴۰، ۴۱، ۴۲، ۴۳، ۴۴، ۴۵، ۴۶، ۴۷، ۸۲] مستخرج از این رساله هستند.

کلمات کلیدی: شاخص توپولوژیکی، الگوریتم، پیچیدگی زمانی، پیچیدگی فضایی، روش درونیابی.

فهرست مطالب

۱ تعاریف و مقدمات **۱**

۱.۱ آشنایی با برخی مفاهیم و تعاریف ۱

۲.۱ معرفی برخی شاخص‌های توپولوژیکی ۳

۲ الگوریتمی برای محاسبه شاخص‌های توپولوژیکی **۷**

۱.۲ مقدمه ۷

۲.۲ الگوریتم ۷

۱.۲.۲ الگوریتم‌های محاسبه شاخص وینر ۹

۲.۲.۲ الگوریتم فلوید- وارشال ۹

۳.۲.۲ الگوریتم خطی برای محاسبه شاخص وینر درختان ۱۰

۴.۲.۲ الگوریتمی برای محاسبه شاخص های توپولوژیکی ۱۴

۵.۲.۲ محاسبه شاخص‌های خانواده فولرن‌های $C_{۱۰n}$ ۱۷

۳ روش درونیابی و شاخص‌های توپولوژیکی **۲۴**

۱.۳ مقدمه ۲۴

۲.۳ درونیابی تک پارامتری ۲۴

۱.۲.۳ فولرن $C_{۱۲k+۴}$ ۲۵

۳.۳ روش برشی در محاسبه شاخص‌های توپولوژیکی ۲۸

۱.۳.۳ شاخص‌های توپولوژیکی فنل‌های چرخه‌ای ۲۹

۴.۳ درونیابی دو پارامتری ۳۲

۱.۴.۳ نانو مخروط $CNC_k[n]$ ۳۳
۲.۴.۳ شبکه‌های شش ضلعی متوازی الاضلاعی ۴۱
۳.۴.۳ نانولوله $HAC_5C_7[p,q]$ ۴۲

۴ گراف‌های ترکیبی **۵۴**

۱.۴ مقدمه ۵۴
۲.۴ شاخص وینر یالی گراف‌های ترکیبی ۵۵
۳.۴ شاخص جمعی-وزنی هراری ۶۲
۱.۳.۴ شاخص H_A گراف‌های ترکیبی ۶۹
۴.۴ شاخص ضربی-وزنی هراری ۷۵
۱.۴.۴ شاخص H_M گراف‌های ترکیبی ۷۷

مراجع **۱۰۱**

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی **۱۰۶**

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی **۱۰۷**

فهرست نمادها **۱۰۸**

فصل ۱
تعاریف و مقدمات

۱.۱ آشنایی با برخی مفاهیم و تعاریف

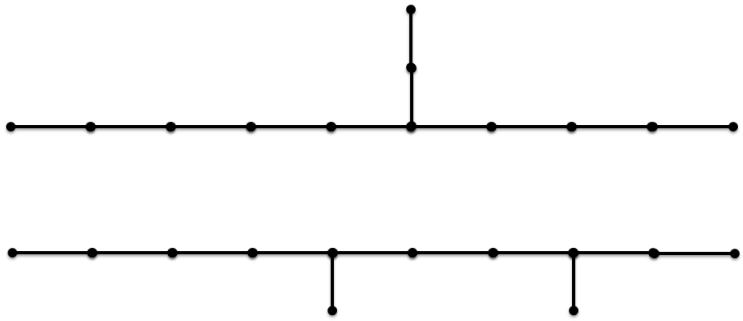
در این فصل تعاریف و مقدمات مربوط به نظریه گراف را که در مطالعه این رساله مورد نیاز است ارائه می‌دهیم. همچنین به معرفی برخی شاخص‌های توپولوژیکی می‌پردازیم.

تعریف ۱.۱.۱. یک **یکریختی** از گراف‌های G و H نگاشتی یک به یک و پوشاست از مجموعه رئوس G به مجموعه رئوس H، $f : V(G) \to V(H)$ طوریکه هرگاه دو رأس u و v مجاور باشند آنگاه $f(u)$ و $f(v)$ نیز مجاور باشند. دو گراف را **یکریخت** گویند هرگاه یک یکریختی بین آنها وجود داشته باشد. یکریختی بین مجموعه رئوس یک گراف را اتومورفیسم یا خودریختی گویند.

تعریف ۲.۱.۱. ثابت‌های گرافی به خاصیت‌های مربوط به گراف گویند که تحت یکریختی گراف‌ها پایا هستند. ثابت‌های گرافی وابسته به برچسب‌گذاری رئوس نیستند. ثابت گرافی می‌تواند یک مجموعه یا یک ماتریس و یا یک چندجمله‌ای باشد.

تعریف ۳.۱.۱. به ثابت گرافی که یک عدد حقیقی باشد **شاخص توپولوژیکی** گفته می‌شود. ممکن است دو گراف دارای شاخص توپولوژیکی یکسان باشند ولی یکریخت نباشند. به عنوان مثال دو گراف غیر یکریخت در شکل ۱.۱ دارای شاخص وینر یکسان ۲۴۶ هستند.

تعریف ۴.۱.۱. گراف G را در نظر بگیرید. یک **گشت** در G عبارت است از مجموعه‌ای از یال‌ها به شکل $v_0v_1, \ldots, v_{m-1}v_m$. یک گشت را به صورت $v_0 \to v_1 \ldots \to v_m$ نیز نشان می‌دهند. یک گشت را که



شکل ۱.۱: گراف‌های غیر یکریخت با شاخص وینر برابر

تمام یالهای آن مجزا باشند یک گذر می نامند. حال اگر رئوس یک گشت مجزا باشند (احتمالاً به استثنای $v_0 = v_m$) آن را **مسیر** گویند. مسیری که رئوس ابتدا و انتهای آن یکی باشد را **دور** یا مدار گویند.

تعریف ۵.۱.۱. گراف G را **همبند** گویند هرگاه بین هر دو رأس آن مسیری وجود داشته باشد.

تعریف ۶.۱.۱. هر یال از یک رأس به خودش را یک **طوقه** می نامیم. اگردو رأس با بیش از یک یال به هم مرتبط شوند، آنگاه این یال‌ها را یال‌های چندگانه گویند.

تعریف ۷.۱.۱. به تعداد یال‌های موجود در یک مسیر، طول آن مسیر گفته می‌شود. طول کوتاهترین مسیر بین دو رأس i و j را **فاصله** بین آنها گویند و با نماد $d(i,j)$ نشان می‌دهند.

تعریف ۸.۱.۱. تعداد رئوس مجاور رأس v را **درجه** v گویند و با نماد $\delta(v)$ نمایش داده می‌شود. مجموعه رئوس مجاور v را با $N(v)$ نشان می‌دهند.

تعریف ۹.۱.۱. بیشترین فاصله بین زوج رئوس در یک گراف همبند، **قطر گراف** نامیده می‌شود. قطر گراف G را با نماد $\mathrm{diam}(G)$ نشان می‌دهند.

تعریف ۱۰.۱.۱. فاصله بین رأس v و دورترین رأس از v را **خروج از مرکز** v گویند و با نماد $\varepsilon(v)$ نشان داده می‌شود. به عبارتی دیگر

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

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

تعریف ۱۲.۱.۱. گرافی که یال‌های آن جهتگذاری شده باشد، **گراف جهتدار** گویند.

تعریف ۱.۱.۱۳. گراف بدون وزن، جهت، طوقه و یال‌های چندگانه را **گراف ساده** می‌نامند.

تعریف ۱.۱.۱۴. گراف همبند ساده و بدون دور را **درخت** گویند.

تعریف ۱.۱.۱۵. بسیاری از مولکلول‌ها و ترکیب‌های شیمیایی به شکل گراف می باشند که هر رأس نمایشگر یک اتم از مولکول است و همچنین پیوند کوالانسی بین اتم‌ها متناظر با یال‌های موجود بین رأس‌های گراف می باشد. این گراف بدست آمده از ترکیبات شیمیایی، **گراف مولکولی** نامیده می شود. یک گراف مولکولی می تواند یک مسیر، یک درخت و یا در حالت کلی یک گراف باشد. گراف‌های مولکولی که بیشتر با آنها سر و کار داریم هیدروکربن‌ها هستند لذا درجه رئوس آنها حداکثر ۴ می‌باشد.

تعریف ۱.۱.۱۶. فرض کنید G یک گراف باشد. **گراف خطی** $L(G)$، G گرافی است که مجموعه رئوس آن متناظر با مجموعه یال‌های G، $E(G)$ است و دو رأس با هم مجاورند هرگاه یال‌های متناظر آنها دارای یک رأس انتهایی مشترک باشند.

۲.۱ معرفی برخی شاخص‌های توپولوژیکی

ریاضی-شیمی عبارت است از گستره‌ی تحقیقات مربوط به کاربردهای بدیع ریاضیات در شیمی که اصولاً با مدل‌های ریاضی پدیده‌های شیمیایی سروکار دارد. مدل‌های اصلی در ریاضی-شیمی گراف‌های مولکولی و شاخص‌های توپولوژیکی می‌باشند. زمینه‌های اصلی تحقیق در ریاضی-شیمی شامل ۱- نظریه گراف شیمیایی که به مطالعه ریاضی ایزومرها و شاخص‌های توپولوژیکی می‌پردازد و ۲- جنبه‌های شیمی نظریه‌ی گروه‌ها که کاربردهای نظریه گروه‌ها در شیمی را مورد مطالعه قرار می‌دهد. شاخص‌های توپولوژیکی علاوه بر اینکه در علومی مانند شیمی و بیولوژی کاربردهای فراوانی دارند در علوم ریاضی بویژه در نظریه گراف بسیار مورد توجه هستند و به صورت گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. در میان شاخص‌های توپولوژیکی، شاخص وینر از جایگاه ویژه‌ای برخوردار است و می‌توان گفت که پرکاربردترین و مهمترین شاخص توپولوژیکی است. این شاخص در سال ۱۹۴۷ توسط شیمیدانی به نام هارلد وینر [۸۴] معرفی شد. وینر این شاخص را بمنظور اثبات روابط بین خواص شیمی-فیزیک آلکن‌ها و ساختار گراف مولکولی آنها بکار برد. **شاخص وینر** گراف همبند و ساده G به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$W(G) = \sum_{\{u,v\}\in\binom{V(G)}{2}} d(u,v)\,,$$

تا کنون مطالعات زیادی بر روی خواص ریاضی این شاخص و روش‌های محاسبه شاخص وینر برای خانواده‌های مختلف گراف‌ها صورت گرفته و همچنان ادامه دارد که از آن جمله می‌توان به مراجع [۱۵، ۲۲، ۲۴، ۶۴، ۸۷، ۸۶] اشاره کرد. زمانی که یک شاخص توپولوژیکی بر حسب خواص رئوس تعریف می‌شود، شاخص توپولوژیکی دیگری بطور مشابه بر حسب یال‌های گراف معرفی می‌شود. شاخص وینر از جمله این شاخص‌هاست و نسخه یالی شاخص وینر در [۴۸] معرفی گردید. همچنین تعاریف دیگری برای فاصله بین یال‌ها ارائه شده است. فرض کنید $f = u_1v_1$ و $g = u_2v_2$ دو یال از گراف G باشند. فاصله بین این دو یال به صورت فاصله بین رئوس متناظرشان در گراف خطی G تعریف می‌شود و با نماد $d_e(f,g)$ نمایش داده می‌شود. معادل این تعریف داریم:

$$d_e(f,g) = \min\{d(u_1,u_2), d(u_1,v_2), d(v_1,u_2), d(v_1,v_2)\} + 1$$

شاخص وینر یالی گراف G ، $W_e(G)$ به صورت زیر تعریف می‌شود [۴۸] :

$$W_e(G) = \sum_{\{f,g\}\in\binom{E(G)}{2}} d_e(f,g)\,,$$

بنابراین شاخص وینر یالی گراف G معادل است با شاخص وینر گراف خطی G،

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

در سال ۱۹۸۱، باکلی[1] رابطه بین شاخص وینر یک درخت و گراف خطی آن را بدست آورد [۱۸].

گزاره ۱.۲.۱. *فرض کنید T درختی با n رأس باشد. در این صورت*

$$W(L(T)) = W(T) - \binom{n}{2}.$$

برای اطلاعات بیشتر راجع به شاخص وینر یالی و محاسبه این شاخص به [۸۶، ۹۱] رجوع کنید. شاخص معکوس وینر، شاخص توپولوژیکی دیگری است که مشابه شاخص وینر تعریف می‌شود با این تفاوت که مجموع اختلاف بین قطر گراف و فاصله زوج رئوس در نظر گرفته می‌شود. به عبارتی دیگر، اگر G یک گراف همبند ساده باشد، آنگاه **شاخص معکوس وینر** G، $RW(G)$ برابر است با

$$RW(G) = \sum_{\{u,v\}\in\binom{V(G)}{2}} \operatorname{diam}(G) - d(u,v) = \binom{|V(G)|}{2}\operatorname{diam}(G) - W(G)$$

[1] Buckley

شاخص معکوس وینر توسط بالابان[۲] و همکارانش معرفی شد[۱۴]. برای اطلاع از برخی نتایج بدست آمده در مورد شاخص معکوس وینر رجوع کنید به [۱۹، ۲۶، ۶۸]. شاخص‌های توپولوژیکی دیگری که در واقع تغییر شکل یافته شاخص وینر هستند معرفی شده‌اند و مطالعات زیادی روی آنها صورت گرفته است. علاوه بر دو شاخص وینر یالی و معکوس وینر، شاخص ابر وینر نیز از جمله این شاخص‌هاست. میلان راندیک[۳] شاخص وینر را به شاخص **ابر وینر** تعمیم داد [۷۴]. شاخص ابر وینر به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$WW(G) = \frac{۱}{۲} \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \Big(d(u,v)^۲ + d(u,v) \Big) = \frac{۱}{۲} \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u,v)^۲ + \frac{۱}{۲} W(G)$$

بر روی شاخص ابر وینر نیز مطالعات گسترده‌ای صورت گرفته است. روش‌ها و الگوریتم‌هایی بمنظور محاسبه این شاخص برای گراف‌های مولکولی و گراف‌های ترکیبی ارائه شده است [۲۰، ۶۵، ۵۷]. همچنین نسخه یالی این شاخص در [۵۲] معرفی شده است. برای گراف ساده و همبند G، **شاخص شولتز** [۷۷] ،$S(G)$ و **شولتز بهبود یافته** [۶۱]، $MS(G)$ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$S(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \left(\delta(u) + \delta(v) \right) d(u,v)$$

،

$$MS(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \delta(u) \delta(v) d(u,v)$$

شاخص سگد نیز از جمله شاخص‌های توپولوژیکی بر پایه فاصله می‌باشد که بدلیل خواص ریاضیش (مانند یکسان بودنش با شاخص وینر برای درختان) از اهمیت خاصی برخوردار است. شاخص سگد اولین بار توسط گوتمن[۴] در سال ۱۹۹۴ معرفی شد [۳۰]. فرض کنید G یک گراف همبند ساده و $e = uv$ یک یال آن باشد. $N_u(e)$ را مجموعه رئوسی از G در نظر بگیرید که به رأس u نزدیکتر از v هستند. اندازه این مجموعه با نماد $n_u(e)$ نمایش داده می‌شود. **شاخص سگد** G، $Sz(G)$، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Sz(G) = \sum_{uv \in E(G)} n_u(e) n_v(e)$$

مهمترین ویژگی شاخص سگد یکسان بودنش با شاخص وینر برای درختان است [۲۵]. در حالت کلی، برای یک گراف همبند G داریم $Sz(G) \geq W(G)$.

شاخص توپولوژیکی دیگری که مشابه شاخص سگد تعریف می‌شود شاخص پادماکار-ایوان است. **شاخص**

[۲] A.T. Balaban
[۳] M. Randic
[۴] I. Gutman

پادماکار-ایوان گراف G، $PI(G)$، به صورت زیر تعریف می‌شود :[۵۴]

$$PI(G) = \sum_{uv \in E(G)} m_u(e) + m_v(e)$$

که $m_u(e)$ برابر تعداد یال‌های G است که به u نزدیکتر از v هستند. کاربردهای این شاخص در مطالعات QSPR/QSAR [۵] را می‌توان در مرجع [۵۵] مشاهده کرد. نسخه رأسی این شاخص نیز مورد توجه قرار گرفت و در مرجع [۹۵] معرفی شد. **شاخص پادماکار-ایوان رأسی**، PI_v به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$PI_v(G) = \sum_{uv \in E(G)} n_u(e) + n_v(e).$$

در برخی مراجع محاسبه شاخص PI برای گراف‌های مولکولی مورد توجه قرار گرفته است. به عنوان مثال می‌توان به [۹۶، ۹۴] اشاره کرد. شاخص همبندی، دیگر شاخص توپولوژیکی است که هم در نظریه گراف و هم در علوم طبیعی بسیار مورد مطالعه قرار گرفته است و کاربردهای فراوانی دارد. **شاخص همبندی** گراف همبند ساده G به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\xi(G) = \sum_{v \in V(G)} \delta(v)\varepsilon(v).$$

برخی کاربردهای این شاخص در [۷۶، ۷۸] و برخی خواص ریاضی آن در [۷۱، ۳۶، ۹۷] مورد بررسی قرار گرفته است. شاخص همبندی برای برخی گراف‌های مولکولی محاسبه شده که به عنوان مثال در [۸]، این شاخص برای نانولوله $TUC_4C_8(R)$ محاسبه شده است. نسخه یالی شاخص همبندی در [۸۸] معرفی شده و برخی خواص ریاضی آن بررسی شده است.

[۵] Quantitative structure-properties (activity) relationship

فصل ۲

الگوریتمی برای محاسبه شاخص‌های توپولوژیکی

۱.۲ مقدمه

در این فصل به معرفی چند الگوریتم ارائه شده برای محاسبه شاخص وینر می‌پردازیم. همچنین الگوریتمی را برای محاسبه شاخص‌های توپولوژیکی که بر پایه فاصله هستند ارائه می‌دهیم. بر اساس الگوریتم داده شده، برنامه‌ای به زبان GAP برای محاسبه فاصله بین رئوس گراف و شاخص‌های توپولوژیکی بر پایه فاصله ارائه می‌دهیم و با استفاده از این برنامه، شاخص‌های توپولوژیکی خانواده فولرن‌های $C_{۱۰n}$ را محاسبه می‌کنیم. در پایان، برنامه‌ای به زبان GAP برای یافتن کلیه مسیرهای بین زوج رئوس گراف و محاسبه شاخص دتور ارائه می‌دهیم.

۲.۲ الگوریتم

هسته‌ی علم کامپیوتر، الگوریتم می‌باشد. یک *الگوریتم* مجموعه ای متناهی از دستورات دقیق و معین برای محاسبه یا حل یک مسأله می‌باشد. نظریه‌ی پیچیدگی محاسبات شاخه‌ای از علوم کامپیوتر و ریاضی است که به بررسی دشواری حل مسائل به وسیله‌ی رایانه (به عبارت دقیق‌تر به صورت الگوریتمی) می‌پردازد. این نظریه بخشی از نظریه‌ی محاسبات است که با منابع مورد نیاز برای حل یک مسأله سروکار دارد. عمومی‌ترین منابع، زمان (چقدر زمان برای حل کردن مساله لازم است) و فضا (چقدر حافظه مورد نیاز است) می‌باشند. پیچیدگی زمانی یک مسأله تعداد گام‌های مورد نیاز برای حل یک نمونه از یک مساله به عنوان تابعی از اندازه‌ی ورودی (معمولا بوسیله تعداد بیت‌ها بیان می‌شود) بوسیله کارآمدترین الگوریتم می‌باشد. زمان اجرای

برنامه‌ها بصورت رابطه بین بزرگی اندازه ورودی و زمان مورد نیاز برای پردازش ورودی است. زمان اجرا یکی از ملاک‌های مقایسه چند الگوریتم برای حل یک مسئله می‌باشد. تعداد مراحل انجام یک الگوریتم که بر حسب اندازه ی مسأله است *پیچیدگی زمانی* الگوریتم نامیده می‌شود. برای نشان دادن پیچیدگی زمانی یک الگوریتم از نماد O بزرگ استفاده می‌شود که در آن تنها بزرگترین عبارت در نظر گرفته می‌شود و از عبارات با مرتبه‌ی کوچکتر و ضرایب، چشم پوشی می‌شود. برای مثال اگر $T(n) = ۳n^۲ - ۴n + ۵$ پیچیدگی زمانی یک الگوریتم باشد، با نماد $O(n^۲)$ نشان داده می‌شود. پیچیدگی زمانی یک برنامه به طور مشابه تعریف می‌شود و عبارت است از تعداد دستورات مقدماتی که در یک برنامه انجام می‌شود که این تعداد بر حسب اندازه ورودی برنامه است. به غیر از پیچیدگی زمانی، *پیچیدگی فضایی* یک برنامه نیز از اهمیت خاصی برخوردار است. پیچیدگی فضایی یک برنامه به صورت تعداد سلول های حافظه مورد نیاز برای انجام محاسبات تعریف می‌شود. پیچیدگی فضایی نیز با O بزرگ نشان داده می‌شود. مطالب فوق برگرفته از مرجع [۸۰] است.

مثال: فرض کنید مسأله یافتن کوچکترین عضو از لیست X با اندازه n باشد. برنامه زیر را برای این منظور در نظر بگیرید.

```
k:=1; n:=Size(X);
for i in [2..n] do
     if X[i]<X[k] then   k:=i;
     fi;
od;
X[k];
```

واضح است که تعداد سلول‌های حافظه مورد نیاز برای انجام برنامه فوق $n+۲$ می‌باشد. بنابراین پیچیدگی فضایی برنامه $O(n)$ است. پیچیدگی زمانی این برنامه نیز $O(n)$ می‌باشد.

یک برنامه یا الگوریتم، از نوع چند جمله ای گفته می‌شود هرگاه پیچیدگی زمانی آن $T(n)$ بوسیله یک چندجمله ای کراندار شده باشد. به عبارتی دیگر عدد طبیعی k موجود باشد بطوری که $T(n) = O(n^k)$. مثال‌هایی از الگوریتم‌های چند جمله ای در ذیل آورده شده است.

جدول ۱.۲: الگوریتم چند جمله ای

مثال	پیچیدگی الگوریتم	نام الگوریتم
چاپ کردن اولین عضو یک لیست	$O(۱)$	الگوریتم ثابت
جستجوی یک عدد در یک لیست مرتب نشده	$O(n)$	الگوریتم خطی
ضرب دو ماتریس $n * n$	$O(n^۲)$	الگوریتم مربعی

۱.۲.۲ الگوریتم‌های محاسبه شاخص وینر

شاخص وینر مهم ترین و کاربردی ترین شاخص توپولوژیکی است. روش‌ها و الگوریتم‌های زیادی به منظور محاسبه شاخص وینر گراف‌های کلی و یا خانواده خاصی از گراف‌ها مانند درختان یا گراف‌های مولکولی ارائه شده اند. در ادامه به معرفی چند الگوریتم محاسبه شاخص وینر می‌پردازیم.

در کتب و مقالات ریاضی و علوم کامپیوتر الگوریتم‌های خوبی برای محاسبه ماتریس فاصله یافت می‌شوند که به الگوریتم‌های کوتاهترین مسیر معروفند. با داشتن ماتریس فاصله یک گراف، براحتی می‌توان شاخص وینر آن را محاسبه کرد.

۲.۲.۲ الگوریتم فلوید- وارشال

در علوم کامپیوتر الگوریتم فلوید-وارشال، یک الگوریتم تحلیل گراف برای پیدا کردن کوتاهترین مسیر در یک گراف جهتدار و وزن دار است. این الگوریتم به نام استفان وارشال[۱] و روبرت فلوید [۲] نامگذاری شده است. ورودی این الگوریتم ماتریس مجاورت گراف $A(G)$ و خروجی آن ماتریس فاصله گراف $D(G)$ می‌باشد. مراحل این الگوریتم به صورت زیر هستند:

۱- به ازای هر رأس i و هر رأس j، اگر i و j مجاور باشند یا $i = j$، آنگاه قرار بده $d_{i,j} := a_{i,j}$ و در غیر این صورت $d_{i,j} := n$.

۲- به ازای هر رأس m انجام بده:

۳- به ازای رأس i به غیر از m که $d_{i,m} < n$ انجام بده:

۴- به ازای رأس j به غیر از m انجام بده:

۵- اگر $d_{i,m} + d_{m,j} < d_{i,j}$، آنگاه قرار بده $d_{i,j} := d_{i,m} + d_{m,j}$

در این الگوریتم سه حلقه for تودرتو وجود دارد که اندازه هر یک برابر تعداد رئوس گراف است بنابراین

[۱] S. Warshall
[۲] R. Floyd

پیچیدگی زمانی این الگوریتم $O(n^3)$ است و بمنظور محاسبه شاخص وینر مقدار n^2 نیز به آن اضافه می‌شود که تأثیری بر پیچیدگی زمانی آن ندارد. از این الگوریتم علاوه بر محاسبه فاصله‌ها، در تعیین همبندی و دوبخشی بودن گراف نیز استفاده می‌شود.

۳.۲.۲ الگوریتم خطی برای محاسبه شاخص وینر درختان

در الگوریتم قبلی، به منظور محاسبه شاخص وینر نیاز به محاسبه ماتریس فاصله است. حال این سؤال مطرح می‌شود که آیا همواره برای بدست آوردن شاخص وینر نیاز به محاسبه ماتریس فاصله است؟. متأسفانه در حالت کلی جواب این سؤال مشخص نیست. اما برای برخی از خانواده‌های گراف‌ها پاسخ مثبت است. موهار[۳] و پیسانسکی[۴] [۷۰] الگوریتمی خطی برای محاسبه شاخص وینر درختان ارائه دادند که نیاز به محاسبه ماتریس فاصله ندارد. در این الگوریتم از گزاره‌های زیر استفاده شده است.

گزاره ۱.۲.۲. *در یک درخت کوتاهترین مسیر بین دو رأس یکتاست.*

برهان. اگر بین دو رأس دو مسیر وجود داشته باشد، آنگاه این دو مسیر تشکیل یک دور می‌دهند. از طرفی در یک درخت هیچ دوری وجود ندارد. بنابراین بین هر دو رأس تنها یک مسیر وجود دارد.

گزاره ۲.۲.۲. *فرض کنید $w(e)$ نمایانگر تعداد کوتاهترین مسیرها از درخت T هستند که از یال e می‌گذرند. آنگاه*

$$W(T) = \sum_{e \in E(G)} w(e) \qquad (۱.۲)$$

برهان. می‌دانیم که طول یک مسیر برابر تعداد یال‌های مشمول در آن است. بنابراین اگر شاخص وینر T را بصورت مجموع طول کوتاهترین مسیرهای موجود در T در نظر بگیریم هر یال به تعداد مسیرهای کوتاه گذرا از آن شمرده می‌شود. □

گزاره ۳.۲.۲. *فرض کنید T یک درخت و $e \in E(T)$. $n_1(e)$ و $n_2(e)$ را تعداد رئوس هر یک از دو مؤلفه $T - e$ در نظر بگیرید. در اینصورت $w(e) = n_1(e)n_2(e)$.*

[۳] B. Mohar
[۴] T. Pisanski

برهان. فرض کنید $e-u_1u_2$ و $T-e=T_1\cup T_2$ هم چنین $u_i\in T_i, i=1,2$. از آنجا که T یک درخت است واضح است که $n_i(e)=|V(T_i)|, i=1,2$. هر مسیر شامل e یک رأس انتهایی در T_1 دارد و رأس انتهایی دیگر آن در T_2 است. برعکس، به ازای هر رأس v_1 در T_1 و هر رأس v_2 در T_2 مسیری یکتا شامل یال e با رئوس انتهایی v_1 و v_2 وجود دارد. پس نتیجه می‌شود که $w(e)=n_1(e)n_2(e)$. □

ورودی این الگوریتم، درخت ریشه‌دار می‌باشد. بدین معنا که رأس دلخواه $v_0\in V(T)$ را به عنوان ریشه گراف از بقیه رئوس متمایز می‌کنیم و دیگر رئوس را می‌توان به صورت $v_1, v_2, \dots v_n-1$ برچسب گذاری کرد بطوریکه هر رأس v_i، $i\geq 1$ دارای دقیقاً یک همسایه از میان رئوس $v_0, v_1, \dots v_{i-1}$ است. این همسایه ی یکتا را با T_i نمایش می‌دهیم. بنابراین می‌توانیم درخت را به صورت آرایه $T_i, i=1,2,\dots n-1$ در نظر بگیریم. مراحل الگوریتم به صورت زیر است:

۱. برای هر رأس محاسبه کن $ind(v_i)=|\{j|v_i=T_j\}|$

۲. کلیه برگ‌های درخت T را در یک لیست قرار بده.

۳. $W(T)$ را با استفاده از (۱.۲) حساب کن.

زمان انجام هر یک از مراحل فوق خطی است. بنابراین این الگوریتم نیز خطی است. در ذیل برنامه‌ای به زبان GAP برای این الگوریتم ارائه می‌دهیم.

```
T:=[];
T[1]:=1;
O:=[];
q:=[];
O[1]:=1;
l:=1;  f:=1;
while l >=f  do
         v:=O[f];
          f:=f+1;
```

```
          for u in [1..n] do
               if A[u,v]<> 0  and u <> T[v] then
               l:=l+1;
               O[l]:= u;
               T[u]:=v;
           od;
od;
ind:=[];
ne:=[];
for i in [1..n] do
      ind[i]:=0;
od;
for i in [1..n] do
     ind[T[i]]:=  ind[T[i]] +1;
od;
g:=0;
for i in [1..n] do
          if ind[i]:=0 then   ne[i]:=g;  g:=i; fi;
od;
for i in [0..n] do
         q[i]:=0;
  od;
for i in [1..n] do
                   j:=g;  k:=T[f];
```

```
                    q[j]:=q[j] +1;
                    q[k]:=q[k]+q[j];
                    g:=ne[g];   ind[k]:=ind[k]-1;
                    if ind[k]=0 then ne[k]:=g;   g:=k; fi
od;
w:=0;
for i in [1..n] do
                w:=w+q[i]*(n-q[i]);
od;
w;
```

در [۱۶] و [۷۲] الگوریتم‌هایی برای محاسبه شاخص وینر یک گراف دلخواه ارائه شده که پیچیدگی زمانی آنها$O(n^{۳}log(n))$ است که n تعداد رئوس گراف است. برنامه GAP زیر، برای الگوریتمی است که در [۷۲] ارائه شده است.

```
for i in [1..n] do
    for j in [1..n] do
       if (D[i,j] = 0) and i <> j) then D[i,j] := n;
    od;
od;
s:= 1;
while s<n do
      for j in [1..n] do
         for i in [1..n] do
             if D[i,j] = 1 then
```