BİLGİSAYAR BİLİMLERİNDE GÜNCEL KONULAR II

Hafta 13

- **Graflarda Eccentricity Değerine Bağlı Topolojiksel İndeksler**

Tanım 1: Bir *G* grafında *u* ve *v* gibi iki tepe arasındaki yollar içinde minimum uzunluğu olanın uzunluğuna; *u* ve *v* nin **uzaklığı (distance)** denir ve *d(u,v)* (veya $d_G(u,v)$) biçiminde gösterilir.

Tanım 2: *n* tepeli bir *G* grafında, grafın tepeleri $\{v_1, v_2, \ldots\ldots, v_n\}$ olsun. *G* grafının **komşuluk matrisi** $A(G) = \left[a_{ij}\right]$ dir.

$$A(G) = \begin{cases} a_{ij} = 1, \quad v_i \quad ile \quad v_j \quad komşu \quad ise; \\ \\ a_{ij} = 0, \quad aksi \quad halde. \end{cases}$$

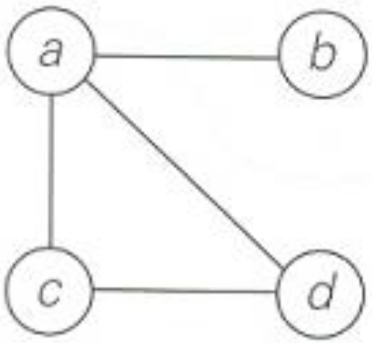
$A(G) = \left[a_{ij}\right]$ nin satır ve sütunları grafın tepelerine karşılık gelir.

Bir Grafta Yolların Sayısı

- Tanım:
  - Bir grafta iki köşe arasındaki farklı yolları sayma.

  - Bir grafiğin i. tepe noktasından j. tepe noktasına k> 0 uzunluğundaki farklı yolların sayısının, A^k ‘nın (i, j). Elemanına eşit olduğunu kanıtlamak kolaydır, burada A, grafiğin komşuluk matrisidir.

Bir Grafta Yolların Sayısı



$$A = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \qquad A^2 = \begin{array}{c} \\ a \\ b \\ c \\ d \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \end{array}$$

Bir graf Grafın komşuluk matrisi A A^2

A ve A^2 matrislerinin elemanları 1 ve 2 uzunluklu yolların sayısını temsil eder.

Bir Grafta Yolların Sayısı

– Böylece problem, komşuluk matrisinin uygun bir gücünü hesaplamak için bir algoritma ile çözülebilir.
– Problem matris üssüne indirgenmiştir.
– A^k nasıl hesaplanır?

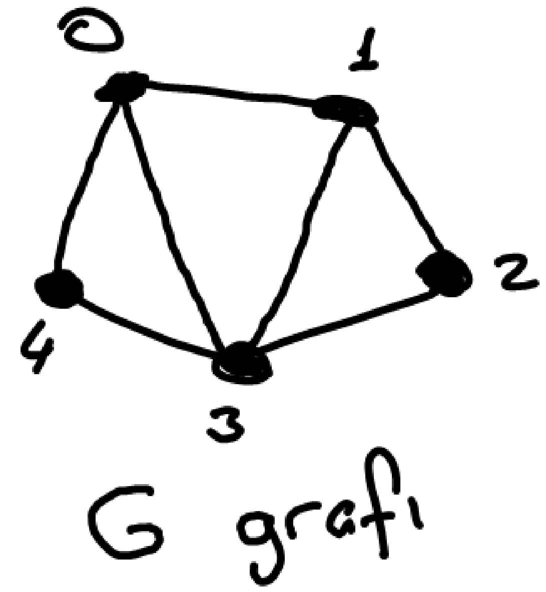
Optimizasyon Problemlerinin İndirgenmesi

Problem Tanımı:

- Bir fonksiyonun maksimumunu (minimum) bulun,
  - maksimizasyon (minimizasyon) problemi
- Bir işlevi maksimize etmek için bir algoritma bildiğinizi, ancak onu en aza indirmek istediğinizi varsayalım.
- İkincisinden nasıl yararlanabilirsiniz?

C kodu: Yanda verilen G grafı için...

Liste yötemi ile veri girişi yapalım...




```
#include<stdio.h>
#include<conio.h>
int main()
{ int a[100][100],t[7][7]={{0,0,0,1,1,2,3},{1,3,4,2,3,3,4}};
int d[100][100],v[100][100],s[100][100];
int i,j,k,m,top,b,h,f,enb,enk,n,s1,s2,s3,sum1,sum2,sum3;

m=1;
printf("G nin tepe sayisini giriniz: ");
scanf ("%d",&n);

for (i=0;i<n;i++)
{
for (j=0;j<n;j++)
 {
      a[i][j]=0;
 }}
```

```
for (i=0;i<7;i++)
 {
      a[t[0][i]][t[1][i]]=1;
      a[t[1][i]][t[0][i]]=1;
  }                          // komşuluk matrisi elde edildi...

for ( i = 0; i <n; i++ ) {


     for ( j = 0; j <n; j++ )
        printf( "%d", a[ i ][ j ] );

        printf( "\n" );}  // komşuluk matrisini yazdırdık...

for (i=0;i<n;i++)
{
for (j=0;j<n;j++)
 {
      v[i][j]=a[i][j];  // komşuluk matrisinin bir kopyası alındı...
}}
printf( "\n" );
```

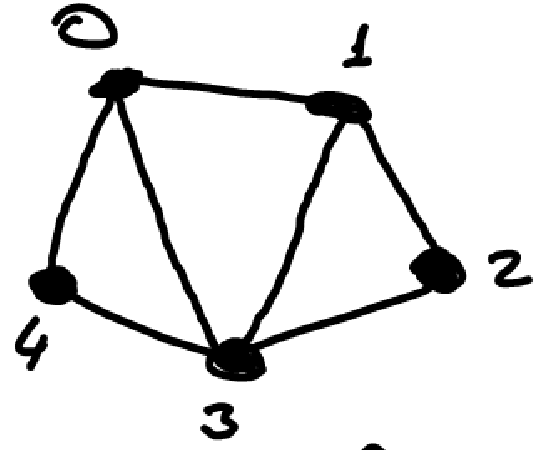
```
if (m==1)
       {

       for (i=0;i<n;i++)
         {
         for (j=0;j<n;j++)
          {
              if ((a[i][j]==1)||(i==j))  d[i][j]=a[i][j];
              else d[i][j]=500;



}}
                                   }   // komşuluk matrisi ilk adımda uzaklık matrisine atanıyor...
```

```
f=0;
for (i=0;i<n;i++)
         {
         for (j=0;j<n;j++)
          {
       if (d[i][j]==500)  f=f+1;

}}
if (f==0)  goto T;  // sonsuz olan uzaklık var mı kontrol ediliyor...

L:
if (m>1) {
        for (i=0;i<n;i++)
         {
         for (j=0;j<n;j++)
          {
            if ((d[i][j]==500) && (a[i][j]==1)) d[i][j]=m;
        }}}
```

```
for (i=0;i<n;i++)
        {
        for (j=0;j<n;j++)
         {top=0;
          for (b=0;b<n;b++)
          {
           top = (top + (a[i][b]*v[b][j]));
          }
          s[i][j]=top;
}}

for (i=0;i<n;i++)
        {
        for (j=0;j<n;j++)
         {
           if ((i==j) || (s[i][j]==0))  s[i][j]=0;
                 else s[i][j]=1;
}}
```

```
for (i=0;i<n;i++)
         {
         for (j=0;j<n;j++)
          {
            if (i==j)  a[i][j]=0;
                   else a[i][j]=s[i][j];}}
m=m+1;
goto L;
T:
printf ("\n");
printf ( "G nin uzaklik matrisi\n");
for (i=0;i<n;i++)
         {
         for (j=0;j<n;j++)
          {
           if (d[i][j]==500) printf ("%d",0);
                                 else
                                  printf ("%d",d[i][j]);
}printf( "\n" );}
getch();
return 0;
}
```

```
G nin tepe sayisini giriniz: 5
01011
10110
01010
11101
10010


G nin uzaklik matrisi
01211
10112
21012
11101
12210


--------------------------------
Process exited with return value 0
Press any key to continue . . .
```



G grafı

Tanım 3: Dışmerkezlilik **(eccentricity)**, her tepenin diğer tepelere olan uzaklıklarının en büyük değeridir ve $e(v)$ (veya $e_G(v)$) biçiminde gösterilir. En büyük dışmerkezlilik değerine **çap (diameter)** denir, $diam(G)$ biçiminde gösterilir. En küçük dışmerkezlilik değerine **yarıçap (radius)** denir ve $r(G)$ biçiminde gösterilir.

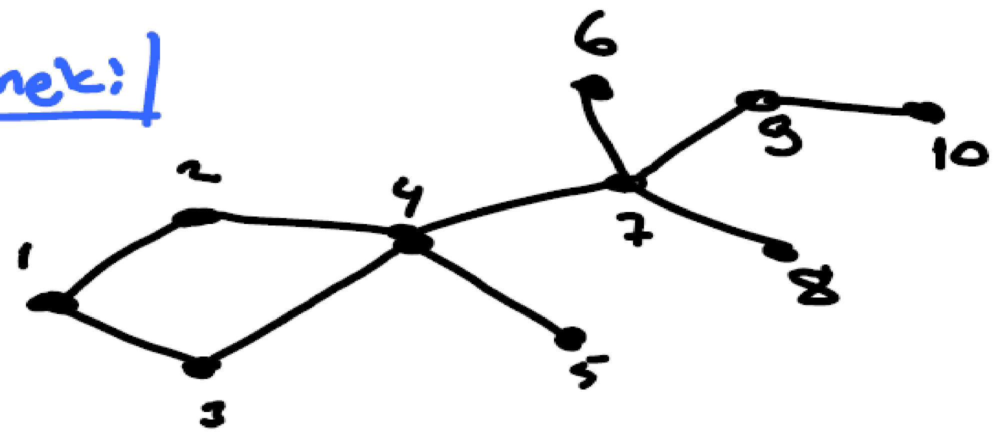
Tanım 4: Dışmerkezlilik değeri yarıçapa eşit olan tepelere **merkez tepeler (central vertices)** denir.

Tanım 5: Dışmerkezlilik değeri çapa eşit olan tepe veya tepelere **kıyı tepeler (peribheral vertices)** denir.

Eccentricity (Dışmerkezlik)

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

Örnek:



G

$e(1) = 5$

$e(2) = 4$

$e(3) = 4$

$e(4) = 3$

$e(5) = 4$

$e(6) = 4$

$e(7) = 3$

$e(8) = 4$

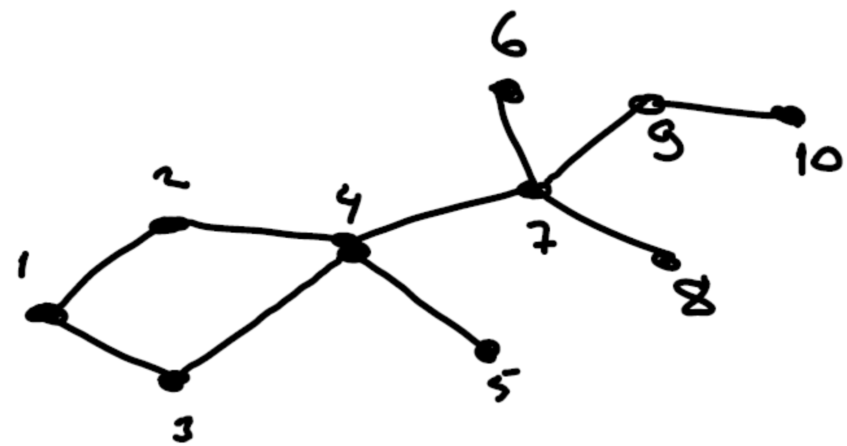
$e(9) = 4$

$e(10) = 5$

Böylece;

$\operatorname{diam}(G) = 5$ (Çap)

$r(G) = 3$ (Yarı çap)



G

Merkez tepeler;

$C(G) = \{ v \mid e(v) = r(G) \}$

$C(G) = \{4, 7\}$

Kıyı tepeler;

$P(G) = \{ v \mid e(v) = \operatorname{diam}(G) \}$

$P(G) = \{1, 10\}$

TOPOLOJİKSEL İNDEKSLER

Graf teori, bir moleküler grafik / ağ mimarisinin analizi ve çalışmasında en güçlü matematiksel araçlardan biri haline gelmiştir. Ağlar önemli yapılardır ve birçok farklı uygulama ve ortamda görünür. Ağların incelenmesi, kimya, bilgisayar bilimi, matematik, sosyal bilimler, bilişim ve diğer teorik ve uygulamalı bilimleri içeren çok disiplinli araştırmanın önemli bir alanı haline gelmiştir.

Kimyasal graf teorisi, moleküllerin matematiksel modellemesi ile ilgili olan grafik teorisinin önemli bir dalıdır. Aynı zamanda topolojik indekslerin gelişimini de ele alır.

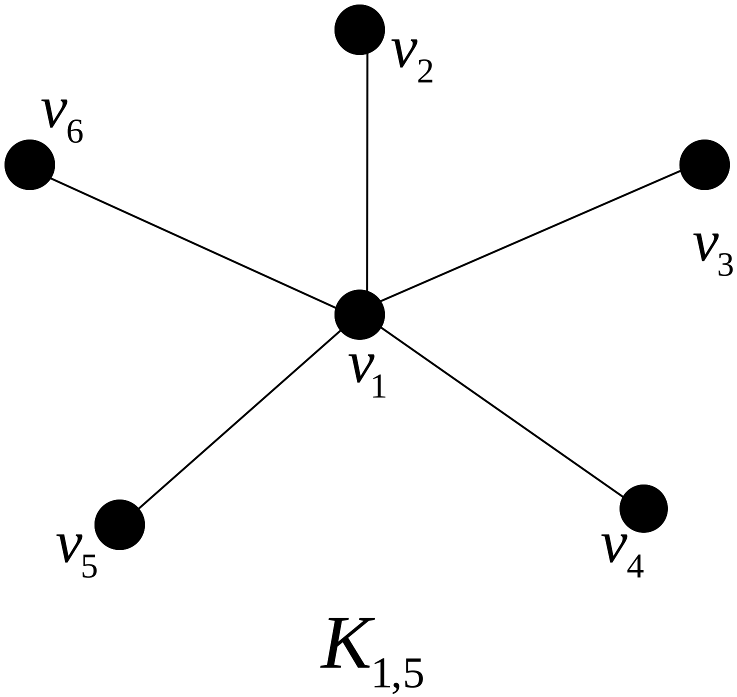
Topolojik indeksler, kimyasal bileşiklerin yapılarını tanımlayan moleküler tanımlayıcılardır ve kaynama noktası, buharlaşma entalpisi ve stabilite gibi belirli fiziko-kimyasal özellikleri tahmin etmemize yardımcı olur.

Ağın sağlamlığını ölçmek için çeşitli önlemler tanımlanmış ve ağ zafiyetini hesaplamak için formüller türetmek için çeşitli grafik teorik parametreler kullanılmıştır.

Wiener indeksi, kimyadaki ilk topolojik indekstir ve kimyager Harold Wiener tarafından da tanımlanmıştır. Wiener indeksi, G grafiğinin her bir köşe çifti arasındaki mesafelerin yarısını toplamayı amaçlamaktadır ve şu şekilde tanımlanır:

$$W(G) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_G(v_i, v_j)$$

Örnek 1. $K_{1,5}$ yıldız grafının Wiener indeksini hesaplayınız.



Tüm tepe çiftleri arasındaki uzaklıklar:

$d_{K_{1,5}}(v_1,v_2)=1$ $\quad d_{K_{1,5}}(v_2,v_3)=2$ $\quad d_{K_{1,5}}(v_3,v_4)=2$

$d_{K_{1,5}}(v_1,v_3)=1$ $\quad d_{K_{1,5}}(v_2,v_4)=2$ $\quad d_{K_{1,5}}(v_3,v_5)=2$

$d_{K_{1,5}}(v_1,v_4)=1$ $\quad d_{K_{1,5}}(v_2,v_5)=2$ $\quad d_{K_{1,5}}(v_3,v_6)=2$

$d_{K_{1,5}}(v_1,v_5)=1$ $\quad d_{K_{1,5}}(v_2,v_6)=2$

$d_{K_{1,5}}(v_1,v_6)=1$

$$W(K_{1,5}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{6}\sum_{j=1}^{6} d_{K_{1,5}}(v_i, v_j)$$

$$W(K_{1,5}) = 25$$

Örnek 2. n tepeli yol, çevre, tam, tekerlek ve yıldız grafların Wiener İndeks değerlerini hesaplyınız.

Eccentricity(Dış Merkezlik) Temelli Topolojiksel İndeksler

The connective eccentricity index: $\xi^{ce}(G)=\sum_{u\in V(G)}\left(\deg_G(u)/\varepsilon_G(u)\right).$

The eccentric connectivity index: $\xi^{c}(G)=\sum_{u\in V(G)}\left(\deg_G(u).\varepsilon_G(u)\right).$

The total eccentricity index: $\xi(G)=\sum_{u\in V(G)}\varepsilon_G(u).$

The first Zagreb eccentricity index : $M_1^*(G)=\sum_{uv\in E(G)}\left(\varepsilon_G(u)+\varepsilon_G(v)\right).$

The second Zagreb eccentricity index: $M_1^{**}(G)=\sum_{u\in V(G)}\left(\varepsilon_G(u)\right)^2.$

The third Zagreb eccentricity index: $M_2^*(G)=\sum_{uv\in E(G)}\left(\varepsilon_G(u).\varepsilon_G(v)\right).$

The eccentricity based geometric-arithmetic index: $GA_4(G)=\sum_{uv\in E(G)}\left(\frac{2\sqrt{\varepsilon_G(u).\varepsilon_G(v)}}{\varepsilon_G(u)+\varepsilon_G(v)}\right).$

New version of the ABC index namely $ABC_5(G)$: $ABC_5(G)=\sum_{uv\in E(G)}\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_G(u)+\varepsilon_G(v)-2}{\varepsilon_G(u).\varepsilon_G(v)}}\right).$

Derece Temelli Topolojiksel İndeksler

The Randic connectivity index: $R(G)=\sum\limits_{uv\in E(G)}\left(\frac{1}{\sqrt{\deg_G(u)\deg_G(v)}}\right).$

The general Randic connectivity index: $R_\alpha(G)=\sum\limits_{uv\in E(G)}\left(\deg_G(u)\deg_G(v)\right)^\alpha.$

The general sum-connectivity index : $X_\alpha(G)=\sum\limits_{uv\in E(G)}\left(\deg_G(u)+\deg_G(v)\right)^\alpha.$

The *first Zagreb index*: $M_1(G)=\sum\limits_{u\in V(G)}\left(\deg_G(u)\right)^2.$

The *second Zagreb index*: $M_2(G)=\sum\limits_{uv\in E(G)}\left(\deg_G(u)\deg_G(u)\right).$

The *harmonic index*: $H(G)=\sum\limits_{uv\in E(G)}\left(\frac{2}{\deg_G(u)+\deg_G(v)}\right).$

The *geometric-arithmetic (GA) index*: $GA(G)=\sum\limits_{uv\in E(G)}\left(\frac{2\sqrt{\deg_G(u)\deg_G(v)}}{\deg_G(u)+\deg_G(v)}\right).$

KAYNAKLAR

[1] Chartrand, G.-Lesniak, L., (1986) : *Graphs and Digraphs*, Wadsworth & Brooks, California

[2] West D.B. (2001) : *Introduction to Graph Theory*, *Prentice Hall*, USA.

[3] Graf Teoriye Giriş, Şerife Büyükköse ve Gülistan Kaya Gök, Nobel Yayıncılık

[4] Discrete Mathematical Structures for Computer Science, Ronald E. Prather, Houghton Mifflin Company, (1976).

[5] Christofides, N., 1986. Graph Theory an Algorithmic Approach, Academic Press, London

[6] ALGORİTMALAR (Teoriden Uygulamalara), Vasif V. NABİYEV, Seçkin Yayıncılık