

UNIVERZA NA PRIMORSKEM
FAKULTETA ZA MATEMATIKO, NARAVOSLOVJE IN INFORMACIJSKE TEHNOLOGIJE

Matematične znanosti, 2. stopnja

Sabina Prodanovič

Wienerjev indeks in sorodne invarante
grafov
Magistrsko delo

Mentor: prof. dr. Dušanka Janežič
Somentor: doc. dr. Klavdija Kutnar

Koper, 2012

Ključna dokumentacijska informacija

Ime in priimek: Sabina Prodanović
Naslov magistrske naloge: Wienerjev indeks in sorodne invarante grafov
Kraj: Koper
Leto: 2012
Število listov: 74 Število slik: 29 Število tabel: 4
Število prilog: 0 Št. strani prilog: 0
Število referenc: 75
Mentor: prof. dr. Dušanka Janežič
Somentor: doc. dr. Klavdija Kutnar
UDK: 519.17(043.2)
Ključne besede: graf, topološki indeksi, vozlišča, povezava
Math. Subj. Class. (2000): 05C12, 05C05, 05C50, 92E10

Izveček

Magistrsko delo obravnava topološke indekse kot način ocenjevanja grafov oziroma predstavljajo invarianto grafa. Tako so v nalogi predstavljeni indeksi, katerih avtorji so Wiener, Minoli, Trinajstić, Bertz, Bonchev, G. Rücker, C. Rücker in Randić. Prav tako smo ocenili samo uporabnost indeksa glede na tip grafa, in sicer na poteh, ciklih in drevesih s šestimi vozlišči. Magistrska naloga vsebuje posebno poglavje o grafih s podano maksimalno stopnjo vozlišča v grafu in njihovo zgornjo mejo Wienerjevega indeksa.

Key words documentation

| | | | | | |
|----------------------------|---|---------------------------|----|-------------------|---|
| Name and surname: | Sabina Prodanović | | | | |
| Title of Master's degree: | Wiener index and similar invariants of graphs | | | | |
| Place: | Koper | | | | |
| Year: | 2012 | | | | |
| Number of pages: | 74 | Number of figures: | 29 | Number of tables: | 4 |
| Number of additions: | 0 | Number of addition pages: | 0 | | |
| Number of references: | 75 | | | | |
| Advisor: | prof. dr. Dušanka Janežič | | | | |
| Co-advisor: | assist. prof. Klavdija Kutnar | | | | |
| UDC: | 519.17(043.2) | | | | |
| Key words: | graph, topological index, vertices, edges | | | | |
| Math. Subj. Class. (2000): | 05C12, 05C05, 05C50, 92E10 | | | | |

Abstract

Master's thesis is about topological indices as a way to evaluate graph and it represents graph invariant. Thus, we can read about indices which authors were Wiener, Minoli, Trinajstić, Bertz, Bonchev, G. Rucker, C. Rucker in Randić. Also, we evaluated the usefulness of the indices on the graphs like paths, cycles and trees with six vertices. Master's thesis also contains a special chapter on graphs with given maximum degree of vertices in the graph and upper limit of the Wiener index.

Kazalo vsebine

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Uvod | 1 |
| 2 | Osnovni matematični pojmi | 3 |
| 3 | Kriteriji za kompleksnostne indekse | 14 |
| 3.1 | Primeri topoloških kompleksnostnih indeksov | 15 |
| 3.1.1 | Wienerjev indeks | 15 |
| 3.1.2 | Minoli indeks | 16 |
| 3.1.3 | Minoli-Bonchev indeks | 17 |
| 3.1.4 | Bonchev-Trinajstić indeks | 18 |
| 3.1.5 | Bertzov indeks | 19 |
| 3.1.6 | Število vpetih dreves | 20 |
| 3.1.7 | Indeks povezanih podgrafov | 21 |
| 3.1.8 | Število skupnih sprehodov | 22 |
| 3.1.9 | Kompleksnostni Randićev indeks | 25 |
| 4 | Uporabnost in ocenitev topoloških kompleksnostnih indeksov | 27 |
| 4.1 | Kompleksnostni indeksi poti | 27 |
| 4.1.1 | MI in MBI indeks | 27 |
| 4.1.2 | BTI in BI indeks | 29 |
| 4.1.3 | $t(P_n)$ indeks | 30 |
| 4.1.4 | Indeks povezanih podgrafov | 31 |
| 4.1.5 | TC in TC1 indeks | 31 |
| 4.1.6 | RCI indeks | 33 |
| 4.1.7 | Število skupnih poti | 36 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.1.8 | Sprehod kompleksnosti | 36 |
| 4.2 | Kompleksnost ciklov | 37 |
| 4.2.1 | MI in MBI indeks | 37 |
| 4.2.2 | BTI in BI indeks | 38 |
| 4.2.3 | $t(C_m)$ indeks | 40 |
| 4.2.4 | Indeks povezanih podgrafov | 40 |
| 4.2.5 | TC in TC1 indeks | 41 |
| 4.2.6 | RCI indeks | 42 |
| 4.2.7 | Število skupnih poti in sprehod kompleksnosti | 43 |
| 4.3 | Razvejanost in kompleksnost na drevesih s šestimi vozlišči | 45 |
| 4.4 | Cikličnost in kompleksnost | 47 |
| 5 | Wienerjev indeks v odvisnosti od največje stopnje grafa | 48 |
| 5.1 | Wienerjev indeks posebne družine grafov | 57 |

Kazalo tabel

| | | |
|-----|---|----|
| 4.1 | Topološka kompleksnost indeksov za poti na sliki 4.1. | 37 |
| 4.2 | Topološka kompleksnost indeksov za cikle na sliki 4.3 | 45 |
| 4.3 | Drevesa | 46 |
| 4.4 | Planarni grafi na štiri vozliščih. | 47 |

Kazalo slik

| | | |
|------|---|----|
| 2.1 | Enostaven graf. | 4 |
| 2.2 | Primeri grafov, ki vsebujejo zanke oziroma "dvojne povezave". | 4 |
| 2.3 | Izomorfna grafa. | 5 |
| 2.4 | Primer grafov. | 5 |
| 2.5 | Sprehod v grafu. | 7 |
| 2.6 | Pot v grafu. | 7 |
| 2.7 | Cikli v grafih. | 7 |
| 2.8 | Podgraf G' grafa G | 8 |
| 2.9 | Primer vpetega drevesa za graf G | 9 |
| 2.10 | Graf z različnimi stopnjami vozlišč. | 10 |
| 2.11 | Graf G | 12 |
| 2.12 | Grafa G | 13 |
| 3.1 | Graf G s štirimi vozlišči in s tremi povezavami. | 16 |
| 3.2 | Vse poti grafa G na sliki 3.1. | 17 |
| 3.3 | Simetrija grafa G in enakovredni par sosednjih povezav. | 19 |
| 3.4 | Pretvorba grafa G v notranji dual G^* | 20 |
| 3.5 | Vsi podgrafi grafa G na sliki 3.1. | 22 |
| 3.6 | Podgrafi in stopnje vozlišč za izračun TC in TC1 indeksa. | 23 |
| 3.7 | Molekularni sprehodi grafa G | 25 |
| 4.1 | Poti. | 37 |
| 4.2 | Morganov algoritem na ciklih. | 44 |
| 4.3 | Cikli | 45 |
| 4.4 | Drevesa | 46 |

| | | |
|-----|--|----|
| 4.5 | Planarni na štirih vozliščih. | 47 |
| 5.1 | Drevesi $T_{10,4}$ in $T_{10,4}^*$ | 49 |
| 5.2 | Hrbtenica, atlas in oddaljeni list. | 49 |
| 5.3 | Največji možni premer grafa G | 50 |
| 5.4 | Drevesi $T_{10,4}^\dagger$ in $T_{10,4}^\diamond$ | 57 |
| 5.4 | Prvih 24 grafov z $n = 10$ vozlišči in najvišjo stopnjo $\Delta = 4$ | 60 |

Poglavje 1

Uvod

Poznamo grafe različnih oblik ter velikosti. S časom se je pojavila težnja po tem, da bi jih nekoliko uredili. Problem nastane, kako izbrati parametre, po katerem bomo graf ovrednotili. Strokovnjaki so najprej predlagali, da se upošteva število vozlišč in povezav ter stopnje vozlišč. Nato so dodatno predlagali, da se upošteva tudi razvejanost in cikličnost ter simetrije. Vsak nadaljni predlog je vodil k novi metodi za ocenjevanje grafa. V tem magistrskem delu so predstavljeni naslednji indeksi:

- Wienerjev indeks (1947),
- Minoli indeks (1975),
- Minoli–Bonchev indeks (1987),
- Bonchev–Trinajstić indeks (1989),
- Bertzov indeks (1983),
- število vpetih dreves (1987),
- indeksa TC in TC1 (1997),
- indeksa t_{wc} in w_{cx} (1993),
- Randićev indeks (2001);

H. Wiener je leta 1947 predstavil indeks, ki je imel tudi praktično uporabnost in je bil deležen večje pozornosti raziskovalcev. Ena od raziskovanih področij Wienerjevega indeksa je tudi zgornja in spodnja meja indeksa za poljuben graf z nekaterimi znanimi pogoji (npr. število vozlišč, število povezav, ...). Tako

je v magistrskem delu posebno poglavje, namenjeno zgornji meji za Wienerjevega indeksa grafov z znanim številom vozlišč in stopnjo vozlišča.

Poglavje 2

Osnovni matematični pojmi

V tem poglavju bomo najprej definirali nekaj osnovnih pojmov o grafh.

Definicija 2.1 (Graf). *Graf G je matematični objekt, ki vsebuje dve neprazni množici; ena množica, ponavadi označena z V , je neprazna množica vozlišč in druga množica, ponavadi označena z E , je množica parov vozlišč – katere elemente imenujemo povezave. Če je G graf, potem urejeno množico vozlišč označimo z $V(G)$ in množico povezav z $E(G)$.*

V nekaterih definicijah poimenujejo vozlišča tudi točke ali krajišča.

Primer 2.1 Graf G na sliki 2.1 je sestavljen iz množice vozlišč

$$V = \{A, B, C, D, E, F\}$$

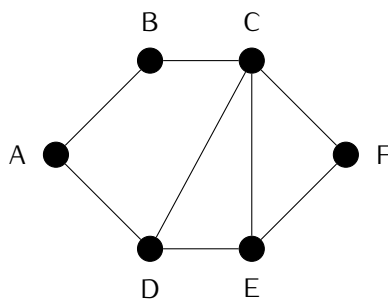
in množice povezav

$$E = \{(A, B), (A, D), (B, C), (C, D), (C, E), (C, F), (D, E), (E, F)\}.$$

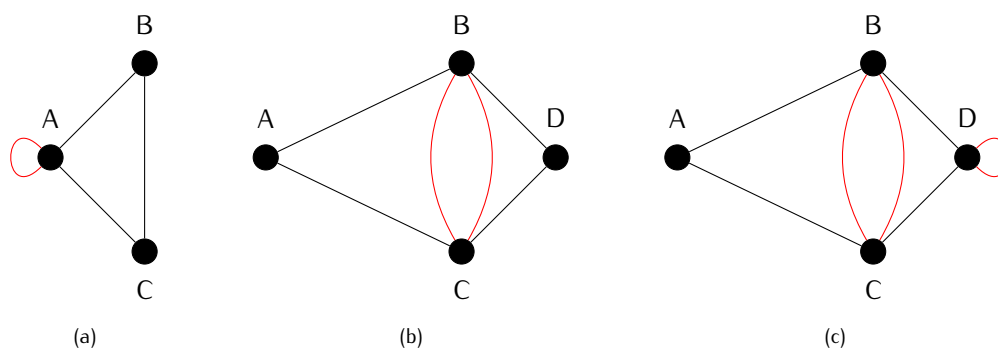
Definicija 2.2 (Enostaven graf). *Naj bo $G = (V(G), E(G))$ graf. Graf G je enostaven, če*

- *ima poljubna povezava $e \in E(G)$ dve različni krajišči (t.j. graf, ki nima zank) in*
- *med poljubnima dvema vozliščema $v, u \in V(G)$ obstaja največ ena povezava.*

Primer 2.2 Graf na sliki 2.1 je enostaven graf. Grafi na sliki 2.2 niso enostavni grafi.



Slika 2.1: Enostaven graf.



Slika 2.2: Primeri grafov, ki vsebujejo zanke oziroma "dvojne povezave".

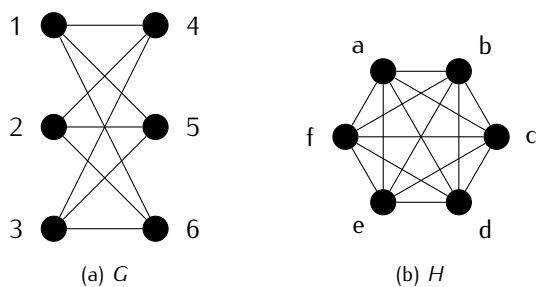
Definicija 2.3 (Izomorfizem grafa). Naj bosta $G = (V_G, E_G)$ in $H = (V_H, E_H)$ grafa. Bijektivno preslikavo $f : V_G \rightarrow V_H$ imenujemo izomorfizem grafov, če velja

$$\{(u, v)\} \in E_G \iff \{(f(u), f(v))\} \in E_H, \text{ za vsak } u, v \in V_G.$$

Primer 2.3 Naj bosta $V_G = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ in $V_H = \{a, b, c, d, e, f\}$ množici vozlišč grafov G in H na sliki 2.3. Potem je preslikava

$$1 \mapsto a, 2 \mapsto f, 3 \mapsto e, 4 \mapsto b, 5 \mapsto c, 6 \mapsto d,$$

bijektivna preslikava iz V_G na V_H , ki povezave grafa G slika v povezave grafa H . Zato sta grafa G in H izomorfna.



Slika 2.3: Izomorfna grafa.

Definicija 2.4 (Avtomorfizem grafa oz. simetrija). Naj bo $G = (V, E)$ graf. Bijektivno preslikavo $f : V \rightarrow V$ imenujemo avtomorfizem oziroma simetrija grafa, če velja

$$\{(u, v)\} \in E \iff \{(f(u), f(v))\} \in E, \text{ za vsak } u, v \in V.$$

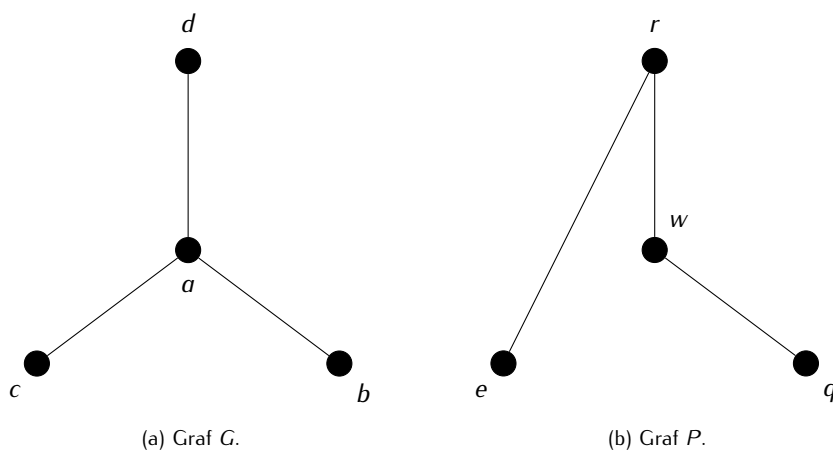
Primer 2.4 Preslikava

$$a \mapsto a, b \mapsto c, c \mapsto d, d \mapsto b$$

je avtomorfizem grafa na sliki 2.4a, saj povezave grafa slika v povezave grafa. Preslikava

$$q \mapsto e, r \mapsto w, w \mapsto r, e \mapsto q$$

pa je avtomorfizem grafa na sliki 2.4b.



Slika 2.4: Primer grafov.

Definicija 2.5. Naj bosta u in v vozlišči grafa $G = (V, E)$. Če obstaja tak avtomorfizem f grafa G , za katerega velja, da je $f(u) = v$, pravimo, da sta vozlišči simetrični, sicer sta nesimetrični.

Definicija 2.6. Naj bosta i in j povezavi iz grafa $G = (V, E)$. Če obstaja tak avtomorfizem g grafa G , za katerega velja, da je $g(i) = j$, pravimo, da sta povezavi simetrični, sicer sta nesimetrični.

Definicija 2.7 (Sprehod). Naj bo G graf z n vozlišči. Sprehod w je zaporedje vozlišč in povezav

$$v_0, e_1, v_1, e_2, \dots, v_{k-1}, e_k, v_k,$$

kjer so $v_i \in V$, $i = 0, \dots, k$, in $e_j \in E$, $j = 1, \dots, k$ ter velja $e_j = (v_{j-1}, v_j)$ za vsak $j = 1, \dots, k$. Dolžina sprehoda je enaka k , t.j. število povezav v sprehodu.

Definicija 2.8 (Sled in pot). Naj bo G graf in naj bo w sprehod v grafu G . Če so vse povezave v w različne, potem sprehodu w rečemo enostavni sprehod ali sled. Če je w enostavni sprehod in so vsa vozlišča v w različna, potem takemu sprehodu rečemo pot.

Definicija 2.9 (Cikel). Naj bo G graf in naj bo w sprehod v grafu G . Naj bo w oblike

$$v_0, e_1, v_1, e_2, \dots, v_{k-1}, e_k, v_k,$$

kjer so $v_i \in V$, $i = 0, \dots, k$, in $e_j \in E$, $j = 1, \dots, k$ ter velja $e_j = (v_{j-1}, v_j)$ za vsak $j = 1, \dots, k$. Če velja, da je $v_0 = v_k$, potem rečemo sprehodu w sklenjen sprehod. Če je sprehod w pot, potem poti w rečemo sklenjena pot ali cikel.

Grafu, ki ne vsebuje cikla, rečemo aciklični graf.

Primer 2.5 Primer sprehoda v grafu je prikazan na sliki 2.5. Prikazani sprehod je zaporedje sledečih vozlišč in povezav:

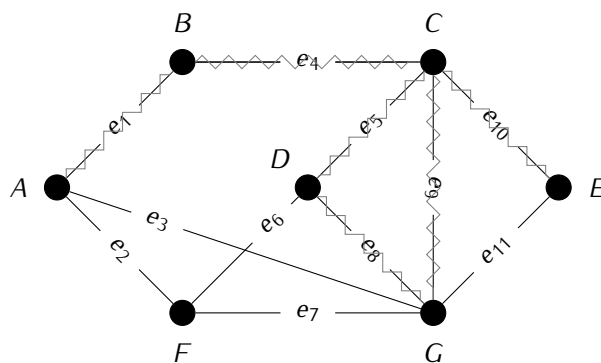
$$A, e_1, B, e_4, C, e_9, G, e_8, D, e_5, C, e_{10}, E.$$

Ker se nobena povezava v sprehodu ne ponovi, lahko rečemo temu sprehodu enostaven sprehod. Ta enostavni sprehod pa ni pot, ker se vozlišče C pojavi dvakrat. Dolžina sprehoda je 6.

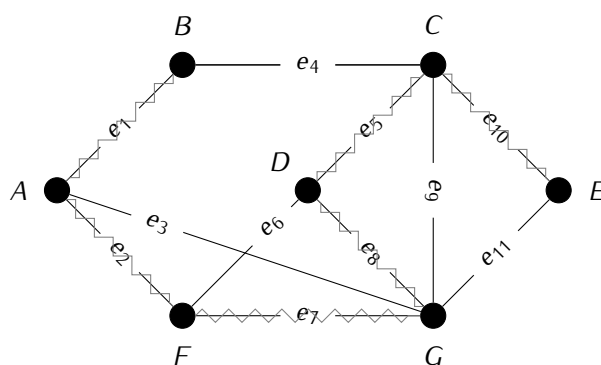
Primer 2.6 V grafu na sliki 2.6 je zaporedje

$$B, e_1, A, e_2, F, e_7, G, e_8, D, e_5, C, e_{10}, E$$

pot dolžine 6.

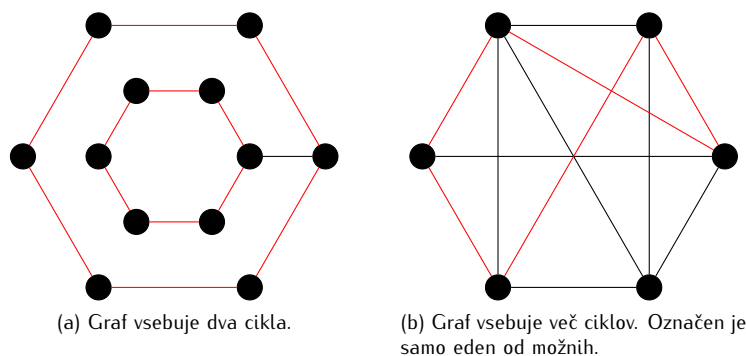


Slika 2.5: Sprehod v grafu.



Slika 2.6: Pot v grafu.

Primer 2.7 Na sliki 2.7 so cikli označeni z rdečo barvo. Ne smemo pozabiti, da graf lahko vsebuje več ciklov.



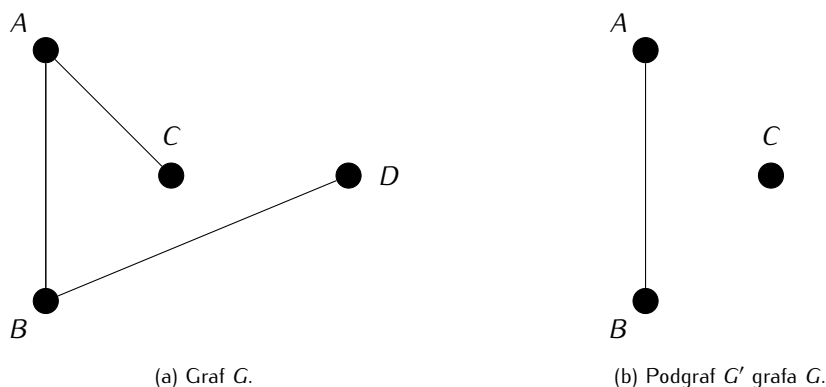
Slika 2.7: Cikli v grafih.

Definicija 2.10 (Podgraf). Naj bo G graf z množico vozlišč V_G in množico povezav E_G in naj bo G' graf z množico vozlišč $V_{G'}$ in množico povezav $E_{G'}$. Če je $V_{G'}$ podmnožica množice V_G in če je vsaka povezava iz $E_{G'}$ tudi v E_G , potem je G' podgraf grafa G .

Definicija 2.11 (Povezan graf). Naj bo G graf. Graf je povezan, če med vsakim parom vozlišč $u, v \in V$ obstaja pot.

Primer 2.8 Slika 2.8b prikazuje podgraf grafa na sliki 2.8a.

Primer 2.9 Graf na sliki 2.8a je povezan in graf na sliki na 2.8b je nepovezan, ker ne obstaja nobena povezava med vozliščem C in vozliščem A ali B .



Slika 2.8: Podgraf G' grafa G .

Definicija 2.12 (Drevo). Naj bo G graf. Če med vsemi pari vozlišč $i, j \in V(G)$ obstaja enolično določena pot, potem takemu grafu rečemo drevo.

Trditev 2.1. Vsako drevo T z n vozlišči vsebuje $n - 1$ povezav.

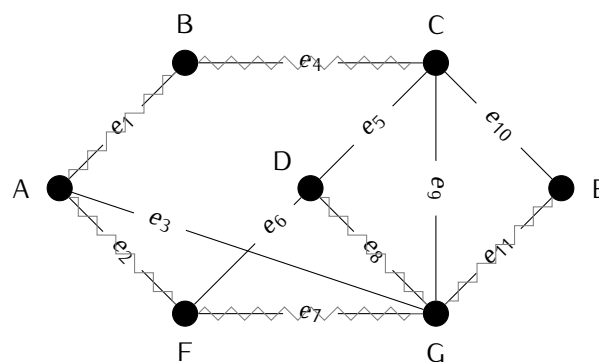
Dokaz. To trditev dokažemo z indukcijo. Najprej pogledajmo za $n = 1$. Taki grafi imajo $n - 1 = 0$ povezav. Za $n = 2$ dobimo dva grafa, in sicer enega s povezavo in enega brez povezave. Graf brez povezave je nepovezan graf, ne vsebuje enolične povezave med dvema vozliščema, zato je tudi ni drevo. Drugi graf s povezavo je povezan graf, ki ne vsebuje ciklov, zato je drevo. Za $n = 3$ obstajajo 4 grafi, eden z 0 povezavo, eden z 1 povezavo, eden z 2 povezavama in eden z 3 povezavami. Grafa brez povezav oziroma z eno povezavo sta nepovezana grafa in graf s 3 povezavami vsebuje cikel. Graf z 2 povezavama je povezan in ne vsebuje cikla. Tako smo pokazali, da trditev velja za $n \leq 3$. Predpostavimo, da smo dokazali trditev za vsa drevesa, ki imajo manj kot n vozlišč. Sedaj to dokažemo za drevo z n vozlišči.

Odstranimo povezavo e iz drevesa T , s katerim dobimo nov graf $T' = T - e$. Ker je T drevo, potem je T' nepovezan graf. Vsak povezan podgraf T' vsebuje eno od krajišč povezave e , zato mora T' vsebovati

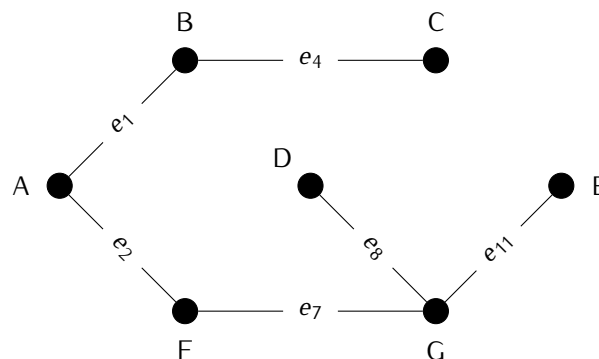
natanko dva povezana podgrafa T'_1 in T'_2 . Ker sta podgrafa T'_1 in T'_2 povezana in aciklična, morata biti drevesi. Naj bo n_1 število vozlišč, ki jih vsebuje T'_1 , in n_2 število vozlišč, ki jih vsebuje T'_2 . Ker smo iz drevesa T odstranili samo povezavo in ne tudi vozlišči, potem mora veljati $n_1 + n_2 = n$. Še več, v T'_1 je $n_1 - 1$ povezav in v T'_2 je $n_2 - 1$ povezav, kar pomeni, da je v T' $n - 2$ povezav. Če vrnemo povezavo e nazaj v T' , potem ima T $n - 1$ povezav.

□

Primer 2.10 Primer dveh dreves lahko vidimo na sliki 2.9b in sliki 2.8a.



(a) Graf G .



(b) Vpeto drevo grafa G .

Slika 2.9: Primer vpetega drevesa za graf G .

Definicija 2.13 (Vpeta drevesa). Naj bo G graf in naj bo drevo G' podgraf grafa G . Če velja $V(G) = V(G')$, potem drevesu G' rečemo vpeto drevo.

Primer 2.11 Primer vpetega drevesa za graf na sliki 2.9a lahko vidimo na sliki 2.9b.

Seveda ima v splošnem graf več različnih vpetih dreves.

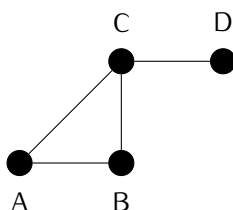
Definicija 2.14 (Stopnja vozlišč). Naj bo G graf in naj bo $v \in V$. Stopnja $st(v)$ vozlišča v je število povezav, ki imajo vozlišče v za svoje krajišče. Največjo stopnjo med vsemi stopnjami vozlišč grafa G

označimo z $\Delta(G)$, najmanjšo pa z $\sigma(G)$. Za vsako vozlišče $v \in V(G)$ torej velja

$$\sigma(G) \leq \text{st}(v) \leq \Delta(G).$$

Primer 2.12 Vzemimo kot primer graf na sliki 2.10 z množico vozlišč $V = \{A, B, C, D\}$. Stopnje vozlišč A, B, C, D so:

$$\text{st}(A) = 2, \text{st}(B) = 3, \text{st}(C) = 4, \text{st}(D) = 1.$$



Slika 2.10: Graf z različnimi stopnjami vozlišč.

Omeniti moramo graf poti in cikla.

Definicija 2.15 (Graf poti). Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n vozlišči. Potem je graf G pot P_n , če je najdaljša pot v G dolga $n - 1$.

Definicija 2.16 (Graf cikla). Naj bo $G = (V, E)$ graf z n vozlišči. Če je stopnja $\text{st}(v) = 2$ za vsak $v \in V$, potem takemu grafu pravimo cikel C_n .

Definicija 2.17 (Simetrične matrike). Naj bo A poljubna matrika velikosti $n \times n$ in naj bo A_{ij} člen matrike A , ki se nahaja v i vrstici in j stolpcu. Matrika A je simetrična, če velja

$$A_{ij} = A_{ji}$$

za vsak $i = 1, \dots, n$ in $j = 1, \dots, n$.

Primer 2.13 Sledeče matrice so simetrične matrice:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Definicija 2.18 (Matrika sosednosti). Naj bo G graf, ki vsebuje n vozlišč. Naj bodo vozlišča označena in urejena od $1, \dots, n$. Elementi matrice sosednosti $A(G)$ so definirani kot

$$A(G)_{ij} = \begin{cases} k, & \text{če sta } i \text{ in } j \text{ sta sosednja} \\ 0, & \text{sicer,} \end{cases}$$

kjer je k število različnih povezav med vozlišči i in j v grafu G .

V enostavnih grafih je $k = 1$.

Primer 2.14 Matrika sosednosti grafa G na sliki 2.11 je

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Definicija 2.19 (Razdalja). Naj bo G graf in naj bosta $i, j \in V(G)$. Razdalja $d(i, j)$ med vozliščema i in j je dolžina najkrajše poti med njima. Če med i in j ne obstaja pot, potem razdaljo označimo z $d(i, j) = \infty$.

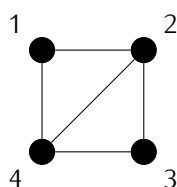
Definicija 2.20 (Matrika razdalj). Naj bo G graf, ki vsebuje n vozlišč in so označena in urejena od $1, \dots, n$. Naj bosta $i, j \in V(G)$. Potem so elementi matrice razdalj $D(G)$, ki je velika $n \times n$, definirani kot

$$D(G)_{i,j} = d(i, j).$$

Primer 2.15 Vzemimo kot primer graf G na sliki 2.11. Ker ima graf 4 vozlišča, je njena matrika razdalj $D(G)$ velikosti 4×4 . Če oštevilčimo vozlišča od 1 do 4 tako kot na sliki 2.11, potem je matrika razdalj

$D(G)$ enaka

$$D(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$



Slika 2.11: Graf G

Členi matrike razdalj so seveda odvisni od oštevilčenja vozlišč v grafu.

Definicija 2.21 (Laplaceova matrika). *Naj bo G enostaven graf z n vozlišči in naj bo $A(G)$ sosednostna matrika grafa G . Laplaceova matrika $L(G)$ grafa G je definirana kot*

$$L(G) = \Delta - A(G),$$

kjer so elementi matrike Δ enaki

$$\Delta_{ij} = \begin{cases} \text{st}(i), & \text{če je } i = j, \\ 0, & \text{sicer} \end{cases}$$

za $i = 1, \dots, n$ in $j = 1, \dots, n$. Tako so elementi Laplaceove matrike $L(G)$ enaki

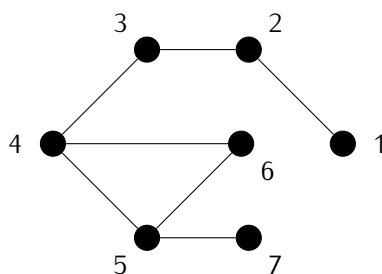
$$L(G)_{ij} = \begin{cases} \text{st}(i), & \text{če } i = j, \\ -1, & \text{če sta si vozlišči } i \text{ in } j \text{ sosednji,} \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Bralec se lahko hitro prepriča, da je zaradi simetričnosti matrike sosednosti grafa Laplaceova matrika grafa tudi simetrična.

Primer 2.16 Vzemimo kot primer graf G na sliki 2.12. Laplaceova matrika L za graf G je velika 8×8 in

je enaka

$$L(G) = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 3 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$



Slika 2.12: Grafa G .

Definicija 2.22 (Invariantsa grafa). *Lastnosti grafa, ki imajo poleg grafa samega tudi vsi z njim izomorfni grafi, pravimo invariantsa grafa.*

Grafovskie invariantsa so na primer: število vozlišč v grafu, število povezav v grafu, število podgrafov, število trikotnikov, ...

Definicija 2.23 (Topološki indeks). *Topološki indeks je funkcija, ki grafu priredi število in predstavlja grafovsko invariantsa.*

Topološki indeksi se raziskujejo predvsem v molekularni kemiji, kjer se vsaki molekuli priredi graf. V kemiji je znanih 200 topoloških indeksov, njihovo število pa še vedno narašča. V nekaterih primerih je koristno uporabiti primerno kombinacijo različnih indeksov.

Poglavje 3

Kriteriji za kompleksnostne indekse

Topološke kompleksnostne indekse (TCI) se uporablja za primerjanje grafov. Predvsem se jih uporablja pri aplikacijah teorije grafov pri raziskovanju struktur molekul. TCI morajo izpolnjevati nekatere kriterije, ki si jih bomo ogledali v nadaljevanju. Prve kriterije za te indekse je predlagal Minoli [44] leta 1975:

- TCI se monotonno povečuje, če povečujemo število vozlišč v grafu;
- TCI se monotonno povečuje, če povečujemo število povezav v grafu;
- TCI se monotonno povečuje, če povečujemo stopnjo vozlišč v grafu.

Dvanajst let kasneje sta Bonch in Polansky [16] predlagala naslednje kriterije:

- TCI mora upoštevati različne stopnje kompleksnosti;
- TCI mora kazati večjo odvisnost med elementi sistema;
- TCI se mora monotonno povečati s številom različnih kompleksnih funkcij;
- TCI se mora razlikovati za neizomorfne sisteme.

Enajst let kasneje (1998) sta Bertz in Wright [7] preučila Minol-ove in Bonch-Polanskyeve kriterije in na njihovi podlagi predlagala sledeče kriterije:

- TCI se monotonno povečuje z dejavniki, ki povečujejo kompleksnost, zajetih v homologne vrste;
- TCI naj bi se povečal, če povečujemo razvejanost in cikličnost;
- TCI se povečuje s številom mnogokratnih povezav;
- TCI mora upoštevati simetrije kot poenostavitev funkcije.

Dve leti po Bertz-u in Wright-u sta Rucker in Rucker [66] razpravljala o naslednjih primernih lastnostih za TCI:

- TCI naj bi se povečal z velikostjo grafa;
- TCI naj bi se povečal z večanjem razvejanosti grafa;
- TCI naj bi se povečal z večanjem cikličnosti grafa;
- TCI naj bi se povečal z večanjem števila večkratnih povezav v grafu;
- TCI naj bi se povečal z večanjem stopenj vozlišč v grafu;
- TCI naj bi se povečal in pri tem naj ne bi upoštevali simetrije v grafu.

Vsi zgoraj navedeni kriteriji so koristni za TCI. TCI se povečuje, če povečujemo velikost grafa, razvejanost, cikličnost, stopnjo vozlišč in z večanjem večkratnih povezav. TCI pa se zmanjšuje z večanjem simetrije.

Te kriterije bomo uporabili v nadaljevanju za določitev in uporabnost TCI.

3.1 Primeri topoloških kompleksnostnih indeksov

Večina indeksov temelji na povezanosti in na razdaljah v grafu. Eden prvih indeksov, in verjetno najbolj znan, ki temelji na razdaljah v grafu, je Wienerjev indeks ali Wienerjevo število.

3.1.1 Wienerjev indeks

Leta 1947 je Henry Wiener [25] opazil zelo dobro korelacijo med vreliščem alkanov¹ in vsoto vseh razdalj med atomi. Na osnovi te opazke je definiral indeks, ki danes nosi njegovo ime.

Definicija 3.1. Naj bo G enostavno povezano drevo. Wienerjevo število $WI(G)$ je vsota vseh razdalj med vozlišči v grafu G , torej

$$WI(G) = \sum_{u,v \in V} d_G(u,v).$$

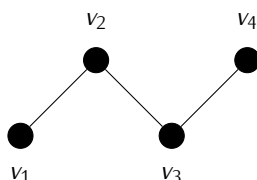
Primer 3.1 Kot primer vzemimo graf G na sliki 3.1. Graf vsebuje 4 vozlišča in razdalje med njimi so sledeče:

| par vozlišč | $\{v_1, v_2\}$ | $\{v_1, v_3\}$ | $\{v_1, v_4\}$ | $\{v_2, v_3\}$ | $\{v_2, v_4\}$ | $\{v_3, v_4\}$ |
|-------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| razdalja | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 1 |

¹Wiener jih je danes nekoliko zastarelo terminologijo imenoval parafini.

Po definiciji je Wienerjevo število $W(G)$ za graf G enako

$$W(G) = 1 + 2 + 3 + 1 + 2 + 1 = 10.$$



Slika 3.1: Graf G s štirimi vozlišči in s tremi povezavami.

Wienerjevo število zelo preprosto izračunamo iz matrike razdalj grafa, in sicer kot polovica vsote vseh členov v matriki razdalj.

Primer 3.2 Vzemimo graf G iz prejšnjega primera. Matrika najkrajših razdalj D za graf G je

$$D(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Wienerjevo število je tako enako

$$\begin{aligned} W(G) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^4 D_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \cdot (0 + 1 + 2 + 3 + 1 + 0 + 1 + 2 + 2 + 1 + 0 + 1 + 3 + 2 + 1 + 0) \\ &= \frac{1}{2} \cdot 20 = 10. \end{aligned}$$

3.1.2 Minoli indeks

Minoli indeks je vpeljal Minoli [44] leta 1975.

Definicija 3.2. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf. Minoli indeks $MI(G)$ za graf G je definiran, kot

$$MI(G) = \left(\frac{|V| \cdot |E|}{|V| + |E|} \right) \sum_l P_l, \quad (3.1)$$

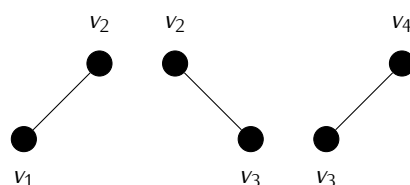
kjer je $|V|$ število vozlišč, $|E|$ število povezav grafa G in P_l število poti dolžine l v grafu G .

Primer 3.3 Vzemimo kot primer graf G na sliki 3.1 in narišimo vse poti tako, kot nam kaže slika 3.2. Najkrajša pot je dolga $l = 1$ in najdaljša pot je $l = 3$. Seštejemo dolžine vseh poti

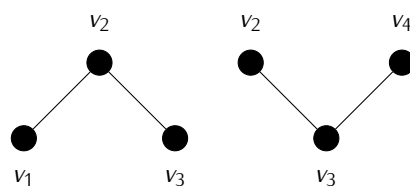
$$\sum_{l=1}^3 P_l = P_1 + P_2 + P_3 = 3 + 2 + 1 = 6,$$

vstavimo v enačbo (3.1) in izračunamo indeks

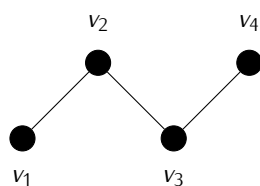
$$MI(G) = \frac{4 \cdot 3}{4 + 3} \cdot 6 \approx 10.3$$



(a) Poti dolžine $l = 1$ v grafu G .



(b) Poti dolžine $l = 2$ v grafu G .



(c) Poti dolžine $l = 3$ v grafu G .

Slika 3.2: Vse poti grafa G na sliki 3.1.

3.1.3 Minoli-Bonchev indeks

Leta 1987 so v članku [19] objavili Minoli-Bonchev indeks, ki se od Minoli indeksa razlikuje v tem, da nadomesti število poti P_l , dolžine l s produktom lP_l .

Definicija 3.3. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf. Minoli-Bonchev indeks $MBI(G)$ za graf G je

definiran kot

$$\text{MBI}(G) = \left(\frac{|V| \cdot |E|}{|V| + |E|} \right) L_p, \quad (3.2)$$

kjer je $|V|$ število vozlišč, $|E|$ število povezav grafa G in

$$L_p = \sum_l l P_l,$$

kjer je l dolžina poti in P_l število poti dolžine l v grafu G .

Primer 3.4 Vzemimo kot primer graf G na sliki 3.1. Na sliki 3.2 so prikazane vse poti grafa G , kjer je najkrajša pot dolga $l = 1$ in najdaljša pot $l = 3$. Najprej izračunajmo vsoto L_p

$$\begin{aligned} L_p &= \sum_{l=1}^3 (l \cdot P_l) \\ &= 3 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 1 \cdot 3 = 10, \end{aligned}$$

nato vstavimo v enačbo (3.2) in izračunamo indeks

$$\text{MBI}(G) = \frac{4 \cdot 3}{4 + 3} \cdot 10 \approx 17.1.$$

3.1.4 Bonchev-Trinajstić indeks

Dve leti po Minoli-Bonchevem indeksu sta Bonchev in Trinajstić v članku [14] predlagala teoretični indeks, ki temelji na razdaljah v grafu.

Definicija 3.4. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf. Bonchev-Trinajstićev indeks $\text{BTI}(G)$ za graf G je definiran kot

$$\text{BTI}(G) = n \log_2 n - \sum_l n_l \log_2 n_l, \quad (3.3)$$

kjer je n_l število poti dolžine l v grafu G in n število vseh poti v grafu G oziroma

$$n = \sum_l n_l.$$

Primer 3.5 Enako kot v prejšnjih zgledih vzemimo primer grafa iz slike 3.1. Na sliki 3.2 so prikazane vse poti grafa G , kjer je najkrajša pot dolga $l = 1$ in najdaljša pot $l = 3$. Dobljene razdalje vstavimo v enačbo

(3.3) in dobimo

$$\text{BTI}(G) = n \log_2 n - \sum_{l=1}^3 n_l \log_2 n_l = 6 \log_2 6 - (3 \log_2 3 + 2 \log_2 2 + 1 \log_2 1) \approx 8,8.$$

3.1.5 Bertzov indeks

Bertz v članku [8] "razširi" Bonchev-Trinajstić indeks.

Definicija 3.5. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf. Bertzov indeks $\text{BI}(G)$ je definiran kot

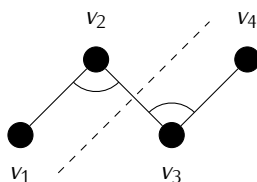
$$\text{BI}(G) = 2n \log_2 n - \sum_i n_i \log_2 n_i, \quad (3.4)$$

kjer je n število parov sosednjih povezav v grafu G in n_i je število parov sosednjih povezav v grafu G glede na simetrijo.

Enačba (3.4) predstavlja pragmatično spremembo enačbe (3.3). Bertz doda enačbi (3.3) dodatni izraz $n \log_2 n$ in s tem prepreči, da bi bil $\text{BI} = 0$ za vse pare sosednjih povezav v grafu G , ki so enakovredni. Prvi del enačbe (3.4), torej $2n \log_2 n$, upošteva zgradbo grafa G , kot so velikost, razvejanost in cikličnost. V drugem delu enačbe (3.4), torej $\sum_i n_i \log_2 n_i$, obravnava simetrijo grafa G za enakovredne pare sosednjih povezav.

Primer 3.6 Grafu G na sliki 3.1 označimo simetrijo s črtkano črto in označimo enakovredne pare sosednjih povezav tako, kot je na sliki 3.3. Bertzov indeks $\text{BI}(G)$ za graf G je

$$\text{BI}(G) = 2 \cdot 2 \log_2 2 - (\log_2 1 + \log_2 1) = 2.$$



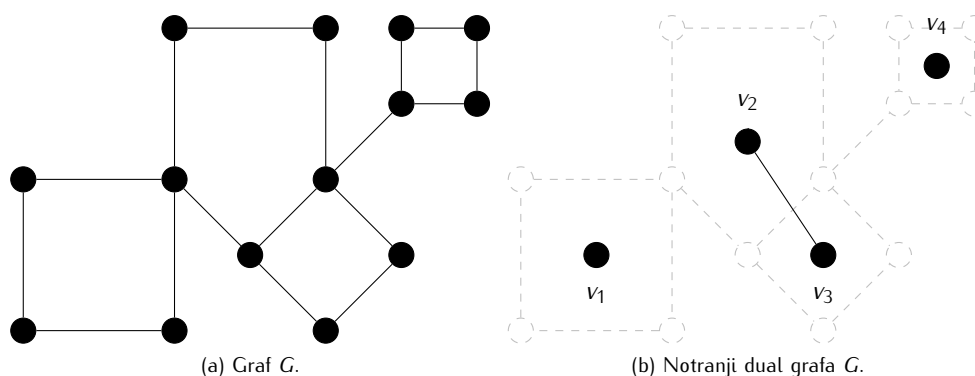
Slika 3.3: Simetrija grafa G in enakovredni par sosednjih povezav.

3.1.6 Število vpetih dreves

Prvi avtorji, ki so uporabljali drevesa za kompleksnostne indekse so Bonchev, Kamenski in Temkin [12]. Ti avtorji so tudi predlagali metodo za računanje števila vpetih dreves. Gutman je leta 1983 v članku [30] s sodelavci predstavil enostavno metodo za izračun števila vpetih dreves za ravninske grafe, ki vsebuje cikle. Za opis te metode potrebujemo sledečo definicijo.

Definicija 3.6 (Notranji dual). Naj bo $G = (V, E)$ enostaven ravninski graf, ki vsebuje cikle. Notranji dual $G^* = (V^*, E^*)$ grafa G dobimo tako, da dodamo vozlišče v vsako lice grafa G in iz teh vozlišč dobimo nov graf G^* tako, da je par vozlišč v G^* povezanih, če imata lici v G vsaj eno skupno povezavo.

Primer 3.7 Primer pretvorbe grafa G v njegov notranji dual je prikazano na sliki 3.4.



Slika 3.4: Pretvorba grafa G v notranji dual G^* .

Definicija 3.7. Naj bo $G = (V, E)$ graf, ki vsebuje k ciklov, in naj bo G^* notranji dual grafa G . Število vpetih dreves $t(G)$ v grafu G je definirano kot

$$t(G) = \det(\Delta^* - A^*), \quad (3.5)$$

kjer je A^* matrika sosednosti notranjega duala G^* in Δ^* je diagonalna matrika velikosti $k \times k$ z elementi

$$\Delta_{i,j}^* = \begin{cases} \text{dolžina } i\text{-tega cikla,} & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

za $i = 1, \dots, k$ in $j = 1, \dots, k$.

Število vpetih dreves se lahko izračuna tudi z lastnimi vrednostmi Laplaceove matrike L grafa G

[45, 69], in sicer kot

$$t(G) = \frac{1}{|V|} \prod_{i=2}^V \lambda_i, \quad (3.6)$$

kjer so λ_i lastne vrednosti matrike L in velja $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_V$ ter $|V|$ je število vozlišč grafa G . Pozorni moramo biti, da je najmanjša lastna vrednost Laplaceove matrike λ_1 vedno enaka nič.

3.1.7 Indeks povezanih podgrafov

Bertz in Sommer [6] ter Bertz in Wright [7] priporočajo uporabo več vrst povezanih podgrafov.

Definicija 3.8. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf. Z N_s označimo število po obliki enakih povezanih podgrafov in z N_t število vseh povezanih podgrafov v grafu G .

Bonch [18] uporabi N_t indeks za ocenjevanje kompleksnosti grafa in zato je predlagal dva nova indeksa TC in TC1, ki temeljita na povezanih podgrafih.

Definicija 3.9. Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo s povezan podgraf grafa G . Potem je TC indeks definiran kot vsota stopenj vozlišč v vseh povezanih podgrafih s . Torej kot

$$TC = \sum_s \sum_i st_G(s_i), \quad (3.7)$$

kjer je s_i i -to vozlišče v podgrafu s in $st_G(s_i)$ stopnja tega vozlišča v grafu G .

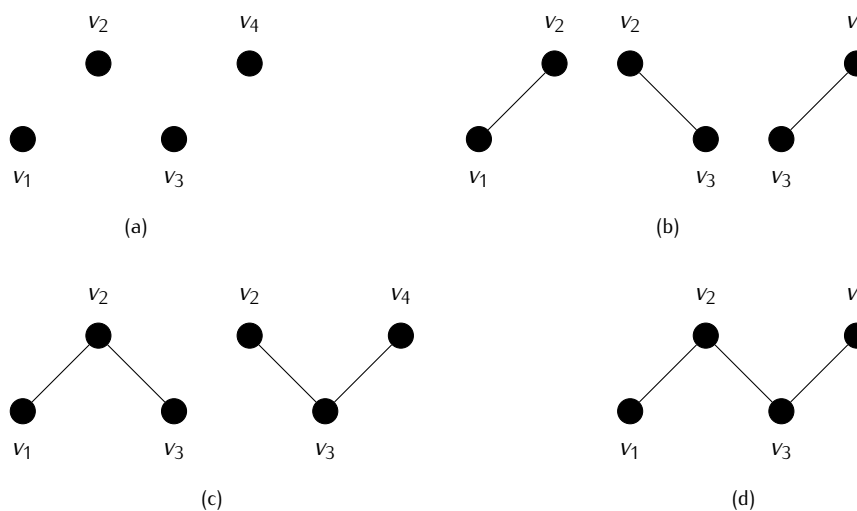
Indeks TC1 se izračuna podobno le, da se pri tem upošteva stopnja vozlišča $st_s(s_i)$ i -tega vozlišča v podgrafu s . Torej kot

$$TC1 = \sum_s \sum_i st_s(s_i). \quad (3.8)$$

Tako je TC vedno večji od TC1, saj je stopnja i -tega vozlišča v podgrafu kvečjemu enaka stopnji istega vozlišča v grafu G .

Primer 3.8 Vsi povezani podgrafi grafa na sliki 3.1 so prikazani na sliki 3.5. Hitro se lahko prepričamo, da je število neizomorfnih podgrafov enako $N_s = 4$ in število vseh povezanih podgrafov enako $N_t = 10$.

Primer 3.9 Vzemimo graf iz prejšnjega primera in označimo stopnjo vozlišč za indeksa TC in TC1 tako, kot nam kaže slika 3.6a in slika 3.6b. Stopnje vozlišč vseh podgrafov seštejemo in dobimo, da je $TC1 = 20$. Podobno naredimo za TC indeks, pri katerem moramo gledati stopnjo vozlišč prvotnega (originalnega) grafa. Seštejemo oznake vozlišč po vseh podgrafih in tako dobimo, da je $TC = 32$.



Slika 3.5: Vsi podgrafi grafa G na sliki 3.1.

3.1.8 Število skupnih sprehodov

Rücker in Rücker [66, 61] sta predlagala indeks za računanje števila skupnih sprehodov twc . Indeks twc se lahko izračuna z vsoto števil t.i. atomskih sprehodov awc in z vsoto števil t.i. molekularnih sprehodov mwc .

Definicija 3.10. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf z n vozlišči. Potem je število atomskih sprehodov $awc_l(i)$ število vseh možnih sprehodov dolžine l , ki se začnejo v vozlišču i :

$$awc_l(i) = \sum_{j=1}^n A_{ij}^l. \quad (3.9)$$

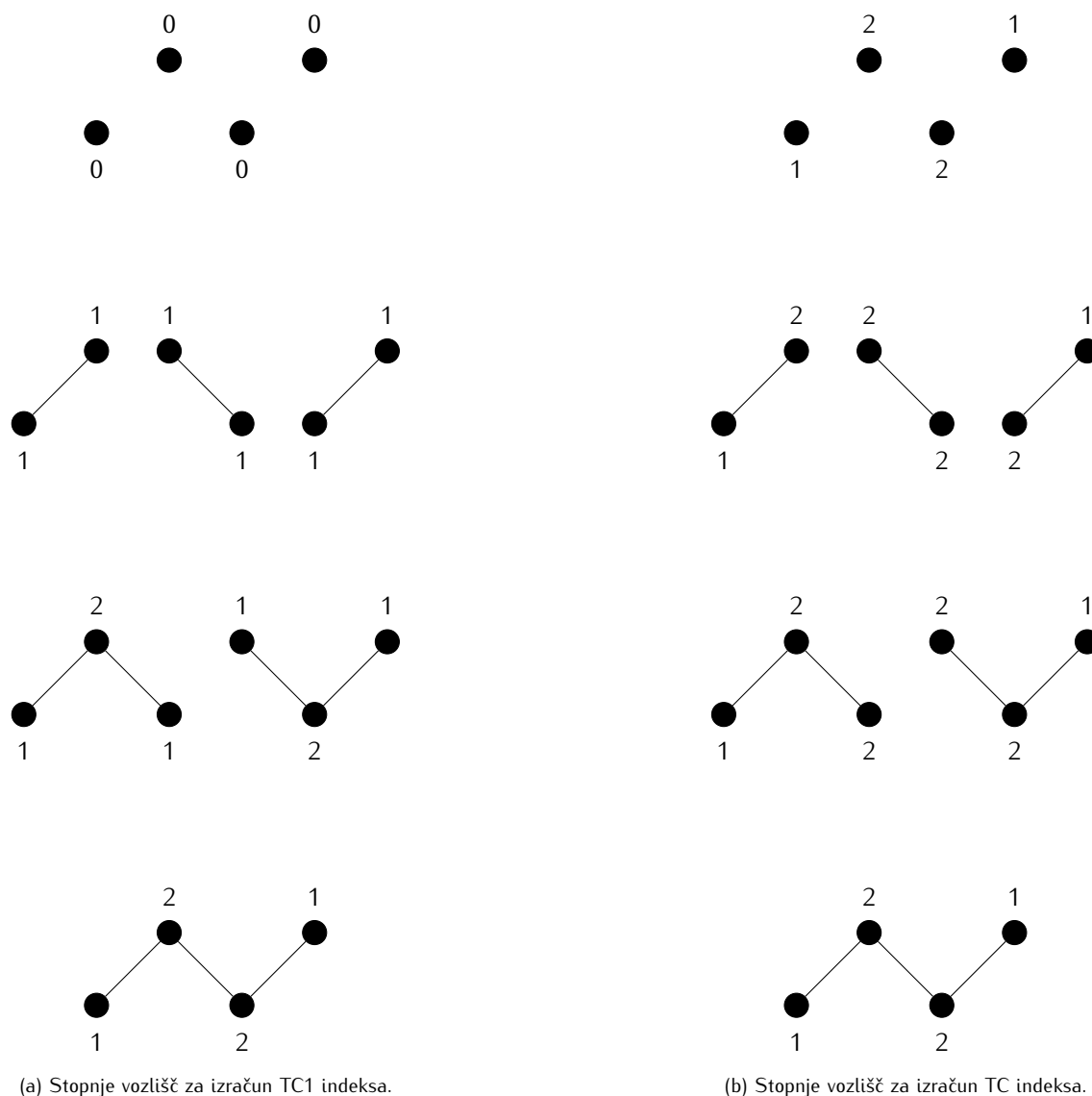
Število molekularnih sprehodov mwc_l je vsota vseh atomskih sprehodov dolžine l

$$mwc_l = \sum_{i=1}^n awc_l(i). \quad (3.10)$$

Sedaj lahko definiramo twc in sicer kot vsoto vseh molekularnih sprehodov mwc_l . Torej

$$twc = \sum_{l=1}^{n-1} mwc_l. \quad (3.11)$$

Simetrično modificiran twc se imenuje sprehod kompleksnosti wcx [66, 28].



Slika 3.6: Podgrafi in stopnje vozlišč za izračun TC in TC1 indeksa.

Definicija 3.11. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf z n vozlišči in naj bo $aw_c(i)$ število atomskih sprehodov dožnje l , ki se začnejo v vozlišču i . Naj bo $awcs(i)$ sledeča vsota

$$awcs(i) = \sum_{l=1}^{n-1} aw_c(i). \quad (3.12)$$

Potem je indeks wcx podan z naslednjo enačbo

$$wcx = \sum_{i \in V} awcs(i), \quad (3.13)$$

kjer se vozlišče i prvič pojavi glede na simetrijo.

Z drugimi besedami wcx upošteva samo različna vozlišča glede na simetrijo.

Primer 3.10 Vzemimo primer grafa iz slike 3.1. Sestavimo matriko sosednosti A in izračunajmo A^2 in A^3 :

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, A^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, A^3 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Spomnimo se, da če je A matrika sosednosti, potem $[A^k]_{ij}$ predstavlja vse poti dolžine k , ki se začnejo v vozlišču i in končajo v vozlišču j . Število atomskih sprehodov $awc_l(i)$ in število molekularnih sprehodov je torej:

| $awc_l(i)$ | $l = 1$ | $l = 2$ | $l = 3$ |
|------------|---------|---------|---------|
| $awc_l(1)$ | 1 | 2 | 3 |
| $awc_l(2)$ | 2 | 3 | 5 |
| $awc_l(3)$ | 2 | 3 | 5 |
| $awc_l(4)$ | 1 | 2 | 3 |
| mwc_l | 6 | 10 | 16 |

Sledi, da je

$$twc = mwc_1 + mwc_2 + mwc_3 = 6 + 10 + 16 = 32.$$

Sedaj pa izračunajmo wcx . Podobno kot prej izračunamo

| $awc_l(i)$ | $l = 1$ | $l = 2$ | $l = 3$ | $awcs(i)$ |
|------------|---------|---------|---------|-----------|
| $awc_l(1)$ | 1 | 2 | 3 | 6 |
| $awc_l(2)$ | 2 | 3 | 5 | 10 |
| $awc_l(3)$ | 2 | 3 | 5 | 10 |
| $awc_l(4)$ | 1 | 2 | 3 | 6 |

Ker sta vozlišči 1 in 4 ter 2 in 3 simetrični, pri izračunu wcx ne upoštevamo vozlišč 4 in 3. Tako je wcx enak

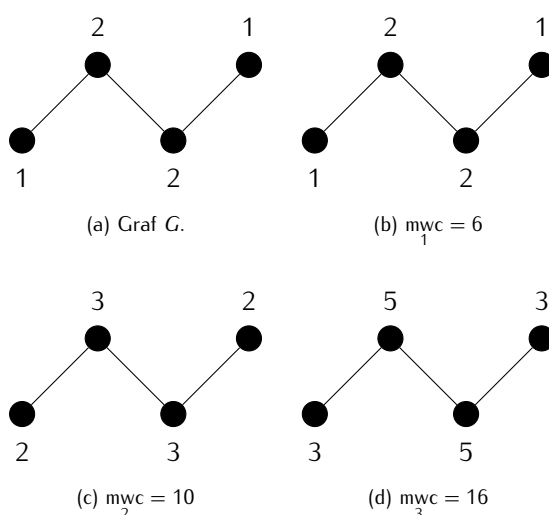
$$wcx = awcs(1) + awcs(2) = 6 + 10 = 16.$$

Obstaja še en način za izračun skupnega števila sprehodov twc , in sicer z uporabo razmerja med

Morganovimi podaljšanimi povezavami MEC [46] in sosednjimi vozlišči. To razmerje je najprej opazil Razinger [57]; Rucker in Rucker [61] pa sta dokazala, da sta matriki MEC in awc_l identični. Matriko awc_l (torej za sprehode dolžine l) dobimo tako, da vsakemu vozlišču v grafu G določimo novo utež, in sicer kot vsoto uteži vseh sosednjih vozlišč. Ta postopek ponovimo $n - 1$ krat. Začetna utež vozlišča je stopnja vozlišča v grafu G .

Zato je za izračun twc pri velikih grafih potrebno le zaporedje dodatnih korakov. Rucker in Rucker [61] ta postopek poimenujeta vsota Morganovih postopkov. Na podlagi teh postopkov so pripravili računalniški program MORGAN.

Primer 3.11 Kot primer vzemimo graf iz prejšnjega primera in označimo stopnjo vozlišč tako, kot nam prikazuje slika 3.7a. Nato izvedemo $n - 1$ iteracij, kjer v vsaki iteraciji izračunamo novo utež vozlišča, in sicer kot vsoto uteži vseh njegovih sosedov. Na slikah 3.7b - 3.7d lahko vidimo potek treh iteracij. Iz



Slika 3.7: Molekularni sprehodi grafa G .

tega sledi, da je $twc = mwc_1 + mwc_2 + mwc_3 = 6 + 10 + 16$. Podoben razmislek nam da wc_x .

3.1.9 Kompleksnostni Randičev indeks

Randičev indeks (RCI) [55] je odvisen od simetrije indeksa, ki temelji na stopnji vozlišč [54, 53].

Definicija 3.12. Naj bo $G = (V, E)$ enostaven povezan graf z n vozlišči. Potem je Randičev kompleksnostni indeks $RCI(G)$ grafa G enak

$$RCI(G) = \sum_{i=1}^{n^*} \sum_{j=1}^n \frac{st(j)}{2^{l(i,j)}}, \quad (3.14)$$

kjer je n^* število vozlišč, ki niso simetrična, in $l(i, j)$ je razdalja od vozlišča i do vozlišča j .

Primer 3.12 Tudi tokrat kot primer vzemimo graf na sliki 3.1. RCI indeks najlažje izračunamo s pomočjo matrike, kjer je $\frac{st(j)}{2^{l(i,j)}}$ element i -te vrstice in j -tega stolpca. Najprej oblikujemo matriko D_{RCI} :

$$D_{RCI} = \begin{bmatrix} \frac{st(1)}{2^{l(1,1)}} & \frac{st(2)}{2^{l(1,2)}} & \frac{st(3)}{2^{l(1,3)}} & \frac{st(4)}{2^{l(1,4)}} \\ \frac{st(1)}{2^{l(2,1)}} & \frac{st(2)}{2^{l(2,2)}} & \frac{st(3)}{2^{l(2,3)}} & \frac{st(4)}{2^{l(2,4)}} \\ \frac{st(1)}{2^{l(3,1)}} & \frac{st(2)}{2^{l(3,2)}} & \frac{st(3)}{2^{l(3,3)}} & \frac{st(4)}{2^{l(3,4)}} \\ \frac{st(1)}{2^{l(4,1)}} & \frac{st(2)}{2^{l(4,2)}} & \frac{st(3)}{2^{l(4,3)}} & \frac{st(4)}{2^{l(4,4)}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{st(1)}{2^{l(1,1)}} & \frac{st(2)}{2^{l(1,2)}} & \frac{st(3)}{2^{l(1,3)}} & \frac{st(4)}{2^{l(1,4)}} \\ \frac{st(1)}{2^{l(1,2)}} & \frac{st(2)}{2^{l(2,2)}} & \frac{st(3)}{2^{l(2,3)}} & \frac{st(4)}{2^{l(2,4)}} \\ \frac{st(1)}{2^{l(1,3)}} & \frac{st(2)}{2^{l(2,3)}} & \frac{st(3)}{2^{l(3,3)}} & \frac{st(4)}{2^{l(3,4)}} \\ \frac{st(1)}{2^{l(1,4)}} & \frac{st(2)}{2^{l(2,4)}} & \frac{st(3)}{2^{l(3,4)}} & \frac{st(4)}{2^{l(4,4)}} \end{bmatrix}$$

Stopnja prvega in zadnjega vozlišča je enaka $st(1) = st(4) = 1$, stopnja drugega in tretjega vozlišča je $st(2) = st(3) = 2$. Zato je matrika D_{RCI} enaka

$$D_{RCI} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & \frac{2}{2^1} & \frac{2}{2^2} & \frac{1}{2^3} \\ \frac{1}{2^1} & \frac{2}{2^0} & \frac{2}{2^1} & \frac{1}{2^2} \\ \frac{1}{2^2} & \frac{2}{2^1} & \frac{2}{2^0} & \frac{1}{2^1} \\ \frac{1}{2^3} & \frac{2}{2^2} & \frac{2}{2^1} & \frac{1}{2^0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{2} & 2 & 1 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & 1 & 2 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{2} & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Vrstice matrike D_{RCI} seštejemo. Pri čemer iz vsakega simetrijskega razreda vzamemo le eno vozlišče. V našem primeru seštejemo elemente prve in druge vrstice in dobimo $RCI \approx 6,4$.

Poglavje 4

Uporabnost in ocenitev topoloških kompleksnostnih indeksov

V tem poglavju bomo videli, kako se določeni indeksi obnašajo na posebnih primerih grafov.

4.1 Kompleksnostni indeksi poti

Obravnavali bomo poti, ki vsebujejo od dveh do osem vozlišč. Preučili bomo, kako se obnašajo indeksi z večanjem števila vozlišč. Poti so primerne za uporabo, saj njihova zgradba močno vpliva na kompleksnost in velikost. Vendar pa obstaja še ena zgradba, ki je prisotna na drevesih in se ji ni mogoče izogniti. To so simetrije. Obravnavane poti so upodobljene na sliki (4.1), njihovi indeksi pa so navedeni v tabeli 4.1. Iz tabele 4.1 je razvidno, da se indeksi povečujejo z večanjem števila poti oziroma z velikostjo drevesa.

Definicija 4.1 (Graf poti). Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n vozlišči. Potem je graf G pot P_n , če je najdaljša pot v G dolga $n - 1$.

Primeri poti lahko vidimo na sliki 4.1 na strani 37.

4.1.1 MI in MBI indeks

Trditev 4.1. $MI(P_n)$ za pot P_n je enak

$$MI(P_n) = \frac{n^2(n-1)^2}{4n-2}. \quad (4.1)$$

Dokaz. Vseh povezav v drevesu je $e = n - 1$. Ker gre za pot, je $\sum_l P_l$ enak

$$\begin{aligned} \sum_l P_l &= \sum_{l=1}^e ((n-1) - l + 1) \\ &= \sum_{l=1}^{n-1} (n-l) \\ &= \sum_{l=1}^{n-1} n - \sum_{l=1}^{n-1} l \\ &= (n-1)n - \frac{(n-1)n}{2} \\ &= \frac{(n-1)n}{2}. \end{aligned}$$

Če to vstavimo v originalno formulo za MI, dobimo:

$$\begin{aligned} MI(P_n) &= \frac{ne}{n+e} \sum_l P_l \\ &= \frac{n(n-1)}{n+(n-1)} \cdot \frac{(n-1)n}{2} \\ &= \frac{n^2(n-1)^2}{2(2n-1)} \\ &= \frac{n^2(n-1)^2}{4n-2}. \end{aligned}$$

□

Trditev 4.2. $MBI(P_n)$ indeks za pot P_n je enak

$$MBI(P_n) = \frac{n^2(n+1)(n-1)^2}{6(2n-1)}. \quad (4.2)$$

Dokaz. Vseh povezav v drevesu je $e = n - 1$. Ker gre za pot, potem sledi, da je

$$\begin{aligned} \sum_l lP_l &= \sum_{l=1}^e l((n-1) - l + 1) \\ &= \sum_{l=1}^{n-1} l(n-l) \\ &= \sum_{l=1}^{n-1} ln - \sum_{l=1}^{n-1} l^2 \\ &= n \sum_{l=1}^{n-1} l - \sum_{l=1}^{n-1} l^2 \\ &= n \frac{(n-1)n}{2} - \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} \\ &= n(n-1) \left(\frac{n}{2} - \frac{(2n-1)}{6} \right) \\ &= n(n-1) \left(\frac{3n-(2n-1)}{6} \right) \\ &= n(n-1) \left(\frac{n+1}{6} \right). \end{aligned}$$

Če to vstavimo v originalno formulo MBI, dobimo:

$$\begin{aligned} \text{MBI}(P_n) &= \frac{ne}{n+e} \sum_l lP_l \\ &= \frac{n(n-1)}{n+(n-1)} n(n-1) \left(\frac{n+1}{6}\right) \\ &= \frac{n^2(n-1)^2(n+1)}{6(2n-1)}. \end{aligned}$$

□

4.1.2 BTI in BI indeksi

Da se izognemo težavam pri označevanju, bomo v tem podpoglavju število vozlišč v grafu označevali z m .

Trditev 4.3. $\text{BTI}(P_m)$ indeks za pot P_m je enak

$$\text{BTI}(P_m) = \binom{m}{2} \log_2 \binom{m}{2} - \sum_{i=2}^{m-1} i \log_2 i. \quad (4.3)$$

Dokaz. Število poti, ki imajo dožino l , je v poti P_m enako

$$n_l = V - l, \quad l = 1, \dots, m-1.$$

Ker je vseh poti v P_m

$$\begin{aligned} n &= \sum_{l=1}^{m-1} n_l \\ &= \sum_{l=1}^{m-1} (m-l) \\ &= \sum_{l=1}^{m-1} m - \sum_{l=1}^{m-1} l \\ &= (m-1)m - \frac{(m-1)m}{2} \\ &= \frac{m(m-1)}{2} \\ &= \binom{m}{2} \end{aligned}$$

in ker lahko vsoto $\sum_{l=1}^{m-1} n_l \log_2 n_l$ zapišemo kot

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{m-1} n_l \log_2 n_l &= (m-1) \log_2(m-1) + (m-2) \log_2(m-2) + \dots + 2 \log_2 2 + 1 \log_2 1 \\ &= (m-1) \log_2(m-1) + (m-2) \log_2(m-2) + \dots + 2 \log_2 2 \\ &= \sum_{i=2}^{m-1} i \log_2 i, \end{aligned}$$

dobimo:

$$\begin{aligned} \text{BTI}(P_m) &= n \log_2 n - \sum_l^{m-1} n_l \log_2 n_l \\ &= \binom{m}{2} \log_2 \binom{m}{2} - \sum_{i=2}^{m-1} i \log_2 i. \end{aligned}$$

□

Trditev 4.4. $\text{BI}(P_m)$ indeks za pot P_m je enak

$$\text{BI}(P_m) = \begin{cases} 2(m-2) \log_2(m-2) - (m-2), & \text{če je } m \text{ sod,} \\ 2(m-2) \log_2(m-2) - (m-3), & \text{če je } m \text{ lih.} \end{cases} \quad (4.4)$$

Dokaz. Vseh parov povezav, ki imajo eno skupno krajišče v grafu, je $n = m - 2$. Najprej si oglejmo primer, ko je število m sodo število. V tem primeru je vseh simetričnih povezav v drevesu enako $\frac{m}{2} - 1 = \frac{m-2}{2}$.

Če podatke vstavimo v originalno formulo, dobimo

$$\begin{aligned} \text{BI}(P_m) &= 2n \log_2 n - \sum_i n_i \log_2 n_i \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - \sum_{i=1}^{\frac{m-2}{2}} 2 \log_2 2 \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - \sum_{i=1}^{\frac{m-2}{2}} 2 \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - \frac{m-2}{2} \cdot 2 \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - (m-2). \end{aligned}$$

V primeru, da je m liho število, je v drevesu simetričnih povezav $\frac{m-1}{2} - 1 = \frac{m-1-2}{2} = \frac{m-3}{2}$. Če podatke vstavimo v originalno formulo, dobimo

$$\begin{aligned} \text{BI}(P_m) &= 2n \log_2 n - \sum_i n_i \log_2 n_i \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - \sum_{i=1}^{\frac{m-3}{2}} 2 \log_2 2 \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - \sum_{i=1}^{\frac{m-3}{2}} 2 \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - \frac{m-3}{2} \cdot 2 \\ &= 2(m-2) \log_2(m-2) - (m-3). \end{aligned}$$

□

4.1.3 $t(P_n)$ indeks

Indeks $t(P_n)$ ni podan, saj je P_n aciklični graf.

4.1.4 Indeks povezanih podgrafov

Trditev 4.5. *Indeksa $N_s(P_m)$ in $N_t(P_m)$ za pot P_m sta enaka*

$$N_s(P_m) = m \quad (4.5)$$

in

$$N_t(P_m) = \frac{m(m+1)}{2}. \quad (4.6)$$

Dokaz. Naj bo $n_i = m - i$ število vseh podgrafov dolžine i , kjer je $i = 0, \dots, m - 1$. Število različnih podgrafov je seveda enako m . Od tod sledi, da je $N_s(P_m) = m$. Vseh podgrafov pa je enako

$$\begin{aligned} N_t(P_m) &= \sum_{i=0}^{m-1} n_i \\ &= \sum_{i=0}^{m-1} (m - i) \\ &= \sum_{i=0}^{m-1} m - \sum_{i=0}^{m-1} i \\ &= m \cdot m - \sum_{i=1}^{m-1} i \\ &= m \cdot m - \frac{(m-1)m}{2} \\ &= \frac{2m^2 - (m^2 - m)}{2} \\ &= \frac{2m^2 - m^2 + m}{2} \\ &= \frac{m^2 + m}{2} \\ &= \frac{m(m+1)}{2} \end{aligned}$$

□

4.1.5 TC in TC1 indeks

Trditev 4.6. *Indeksa $TC(P_m)$ in $TC1(P_m)$ za pot P_m sta enaka*

$$TC(P_m) = \frac{m(m-1)(m+4)}{3} \quad (4.7)$$

in

$$TC1(P_m) = \frac{m(m^2 - 1)}{3}. \quad (4.8)$$

Dokaz. Najprej dokažimo formulo (4.8). Vsota stopenj vozlišč podpota v P_m dolžine $0 \leq l \leq m - 1$, je

enaka $d_l = 2l$. Vseh podgrafov dolžine l je $n_l = m - l$. Torej indeks $TC1(P_m)$ lahko zapišemo kot

$$\begin{aligned}
 TC1(P_m) &= \sum_{l=0}^{m-1} n_l \cdot d_l \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} (m-l) \cdot 2l \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} (2ml - 2l^2) \\
 &= 2m \sum_{l=0}^{m-1} l - 2 \sum_{l=0}^{m-1} l^2 \\
 &= 2m \frac{(m-1)m}{2} - 2 \frac{(m-1)m(2(m-1)+1)}{6} \\
 &= m(m-1)m - \frac{(m-1)m(2(m-1)+1)}{3} \\
 &= m(m-1) \left(m - \frac{2m-2+1}{3} \right) \\
 &= m(m-1) \left(\frac{3m}{3} - \frac{(2m-1)}{3} \right) \\
 &= m(m-1) \frac{3m-(2m-1)}{3} \\
 &= m(m-1) \frac{m+1}{3} \\
 &= \frac{m(m^2-1)}{3}.
 \end{aligned}$$

Dokaz formule (4.7) je dokaj podoben dokazu za formulo (4.8). Naj bo $0 \leq l \leq m-1$ neka dolžina podpota v P_m . Potem je število vseh podpota enako n_l . Če vzamemo, da je stopnja vseh vozlišč enaka 2 (vključno s prvim in zadnjim vozliščem), potem je vsota vseh stopenj v vseh podgrafih enaka $n_l \cdot 2(l+1)$. Vendar moramo upoštevati, da je stopnja prvega in zadnjega vozlišča enaka 1, zato to vrednost zmanjšamo za 2. Torej je vsota vseh stopenj v podgrafih dolžine l enaka $n_l \cdot 2(l+1) - 2$.

$$\begin{aligned}
 TC(P_m) &= \sum_{l=0}^{m-1} n_l \cdot 2(l+1) - 2 \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} (m-l) \cdot 2(l+1) - 2 \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} 2((m-l) \cdot (l+1) - 1) \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} 2((ml + m - l^2 - l) - 1) \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} 2((ml + m) - l^2 - (l+1)) \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} 2(m(l+1) - l^2 - (l+1)) \\
 &= \sum_{l=0}^{m-1} 2((m-1)(l+1) - l^2) \\
 &= 2(m-1) \sum_{l=0}^{m-1} (l+1) - 2 \sum_{l=0}^{m-1} l^2 \\
 &= 2(m-1) \frac{m(m+1)}{2} - 2 \frac{(m-1)m(2(m-1)+1)}{6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= m(m-1) \left((m+1) - \frac{2m-1}{3} \right) \\
 &= m(m-1) \frac{3(m+1) - (2m-1)}{3} \\
 &= m(m-1) \frac{3m+3-2m+1}{3} \\
 &= m(m-1) \frac{m+4}{3} \\
 &= \frac{m(m-1)(m+4)}{3}.
 \end{aligned}$$

□

4.1.6 RCI indeks

Trditev 4.7. $RCI(P_m)$ za pot P_m je enak

$$RCI(P_m) = \begin{cases} 3m - 6 + \frac{6}{2^m}, & \text{če je } m \text{ sod,} \\ 3m - 3 - \frac{3(2^{\frac{m-1}{2}} - 1)}{2^{m-1}}, & \text{če je } m \text{ lih.} \end{cases} \quad (4.9)$$

Dokaz. Preden začnemo z dokazom, je dobro vedeti, da je

$$\sum_{i=0}^x \frac{1}{2^i} = \frac{2^{x+1} - 1}{2^x}$$

in

$$\sum_{i=1}^x 2^i = 2(2^x - 1).$$

Pokazali smo, kako ustvarimo matriko, s pomočjo katere izračunamo RCI indeks. Ta ima v primeru poti P_m obliko

$$D_{RCI} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & \frac{2}{2^1} & \cdots & \cdots & \frac{1}{2^{m-1}} \\ \frac{1}{2^1} & \frac{2}{2^0} & \frac{2}{2^1} & \ddots & \frac{1}{2^{m-2}} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2^{m-2}} & \ddots & \frac{2}{2^1} & \frac{2}{2^0} & \frac{1}{2^1} \\ \frac{1}{2^{m-1}} & \cdots & \cdots & \cdots & \frac{1}{2^0} \end{bmatrix}.$$

Matriko D_{RCI} lahko zapišemo v obliki

$$D_{\text{RCI}} = 2 \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \cdots & \cdots & \frac{1}{2^{m-1}} \\ \frac{1}{2^1} & \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \ddots & \frac{1}{2^{m-2}} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2^{m-2}} & \ddots & \frac{1}{2^1} & \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} \\ \frac{1}{2^{m-1}} & \cdots & \cdots & \cdots & \frac{1}{2^0} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{m-1}} \\ \frac{1}{2^1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{m-2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{2^{m-2}} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^1} \\ \frac{1}{2^{m-1}} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^0} \end{bmatrix}.$$

Ker moramo za izračun indeksa izločiti simetrije, matriko D_{RCI} reduciramo na

$$D_{\text{RCI}}^* = 2 \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \frac{1}{2^{m-1}} \\ \frac{1}{2^1} & \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{1}{2^{m-2}} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} & \cdots & \frac{1}{2^1} & \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \cdots & \frac{1}{2^{\frac{m+1}{2}}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{m-1}} \\ \frac{1}{2^1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{m-2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{\frac{m+1}{2}}} \end{bmatrix},$$

če je sodo število vozlišč v P_m in na

$$D_{\text{RCI}}^* = 2 \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \frac{1}{2^{m-1}} \\ \frac{1}{2^1} & \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{1}{2^{m-2}} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2^{\frac{m+1}{2}}} & \cdots & \frac{1}{2^1} & \frac{1}{2^0} & \frac{1}{2^1} & \cdots & \frac{1}{2^{\frac{m+1}{2}}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{2^0} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{m-1}} \\ \frac{1}{2^1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{m-2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{2^{\frac{m+1}{2}}} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2^{\frac{m+1}{2}}} \end{bmatrix},$$

če je liho število vozlišč v P_m .

Recimo najprej, da ima P_m sodo mnogo vozlišč, torej da je m sodo število. Potem je:

$$\begin{aligned} \text{RCI}(P_m) &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \left(\sum_{j=0}^{i-1} \frac{1}{2^j} + \sum_{j=1}^{m-i} \frac{1}{2^j} \right) - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{1}{2^k} \\ &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \left(\frac{2^{i-1+1}-1}{2^{i-1}} + \frac{2^{m-i}-1}{2^{m-i}} \right) - \frac{2^{m-1+1}-1}{2^{m-1}} \\ &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \left(\frac{(2^i-1) \cdot 2^{m-i+1}}{2^{i-1} \cdot 2^{m-i+1}} + \frac{(2^{m-i}-1) \cdot 2^i}{2^m} \right) - \left(\frac{2 \cdot 2^m - 2}{2^m} \right) \\ &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \left(\frac{(2^i \cdot 2^{m-i+1} - 2^{m-i+1})}{2^m} + \frac{(2^{m-i} \cdot 2^i - 2^i)}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\ &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \left(\frac{2^{m+1} - 2^{m-i+1} + 2^m - 2^i}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\ &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \left(\frac{3 \cdot 2^m - 2^{m-i+1} - 2^i}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \left(3 - \frac{2}{2^i} - \frac{2^i}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\
 &= 2 \left(3 \frac{m}{2} - \frac{2 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^{\frac{m}{2}}} - \frac{2 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\
 &= 3m - \left(\frac{2 \cdot 2 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^{\frac{m}{2}}} + \frac{2 \cdot 2 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\
 &= 3m - \left(\frac{4 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^{\frac{m}{2}}} + \frac{4 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\
 &= 3m - \left(\frac{4 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^{\frac{m}{2}}} + \frac{4 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^m} \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\
 &= 3m - \frac{4 \left(2^{\frac{m}{2}} - 1 \right)}{2^m} \left(2^{\frac{m}{2}} + 1 \right) + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\
 &= 3m - \frac{4 \left(2^m - 1 \right)}{2^m} + \left(\frac{2-2 \cdot 2^m}{2^m} \right) \\
 &= 3m + \frac{-4 \cdot 2^m + 4 + 2 - 2 \cdot 2^m}{2^m} \\
 &= 3m + \frac{-6 \cdot 2^m + 6}{2^m} \\
 &= 3m - 6 + \frac{6}{2^m}.
 \end{aligned}$$

Sedaj pa si oglejmo še primer, ko je m liho število.

$$\begin{aligned}
 \text{RCI}(P_m) &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m+1}{2}} \left(\sum_{j=0}^{i-1} \frac{1}{2^j} + \sum_{j=1}^{m-i} \frac{1}{2^j} \right) - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{1}{2^k} - \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m+1}{2}} \left(\frac{2^{i-1+1}-1}{2^{i-1}} + \frac{2^{m-i}-1}{2^{m-i}} \right) - \frac{2^{m-1+1}-1}{2^{m-1}} - \frac{2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{\frac{m-1}{2}}} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m+1}{2}} \left(\frac{(2^i-1) \cdot 2^{m-i+1}}{2^{i-1} \cdot 2^{m-i+1}} + \frac{(2^{m-i}-1) \cdot 2^i}{2^m} \right) - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m+1}{2}} \left(\frac{(2^i \cdot 2^{m-i+1} - 2^{m-i+1})}{2^m} + \frac{(2^{m-i} \cdot 2^i - 2^i)}{2^m} \right) - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m+1}{2}} \left(\frac{2^{m+1}-2^{m-i+1}+2^m-2^i}{2^m} \right) - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m+1}{2}} \left(\frac{3 \cdot 2^m - 2^{m-i+1} - 2^i}{2^m} \right) - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{m+1}{2}} \left(3 - \frac{2}{2^i} - \frac{2^i}{2^m} \right) - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 2 \left(3 \cdot \frac{m+1}{2} - \frac{2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right)}{2^{\frac{m+1}{2}}} - \frac{2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right)}{2^m} \right) - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 3(m+1) - \frac{2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right)}{2^{\frac{m+1}{2}-1}} - \frac{2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right)}{2^{m-1}} - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 3(m+1) - \frac{2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right) 2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} - \frac{2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right)}{2^{m-1}} - \frac{2^m-1+2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 3(m+1) - \frac{2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right) 2^{\frac{m-1}{2}} + 2 \left(2^{\frac{m+1}{2}} - 1 \right) + 2^m - 1 + 2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= 3(m+1) - \frac{2^{m+1} - 2^{\frac{m+1}{2}} + 2 \cdot 2^{\frac{m+1}{2}} - 2 + 2^m - 1 + 2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 3(m+1) - \frac{3 \cdot 2^m - 2 \cdot 2^{\frac{m-1}{2}} + 2^2 \cdot 2^{\frac{m-1}{2}} - 3 + 2^{\frac{m-1}{2}}}{2^{m-1}} \\
 &= 3m + 3 - \frac{3 \cdot 2^m + 3 \cdot 2^{\frac{m-1}{2}} - 3}{2^{m-1}} \\
 &= 3m + 3 - \frac{3 \cdot 2^m}{2^{m-1}} - \frac{3 \cdot 2^{\frac{m-1}{2}} - 3}{2^{m-1}} \\
 &= 3m - 3 - \frac{3(2^{\frac{m-1}{2}} - 1)}{2^{m-1}}.
 \end{aligned}$$

□

4.1.7 Število skupnih poti

Trditev 4.8. Indeks twc za pot P_m je enak

$$\text{twc} = \text{mwc}_m - 2m + \sum_{i=0}^{m-1} s_i, \quad (4.10)$$

ker je

$$\text{mwc}_l = 2^l m - \sum_{i=0}^{l-1} 2^{l-1-i} s_i \quad (l \leq m) \quad (4.11)$$

in

$$s_i = \begin{cases} 2^{\binom{i}{2}}, & \text{če je } m \text{ sod,} \\ 2^{\binom{i+1}{2}}, & \text{če je } m \text{ lih.} \end{cases} \quad (4.12)$$

Dokaz trditve bralec lahko prebere v [61, 66].

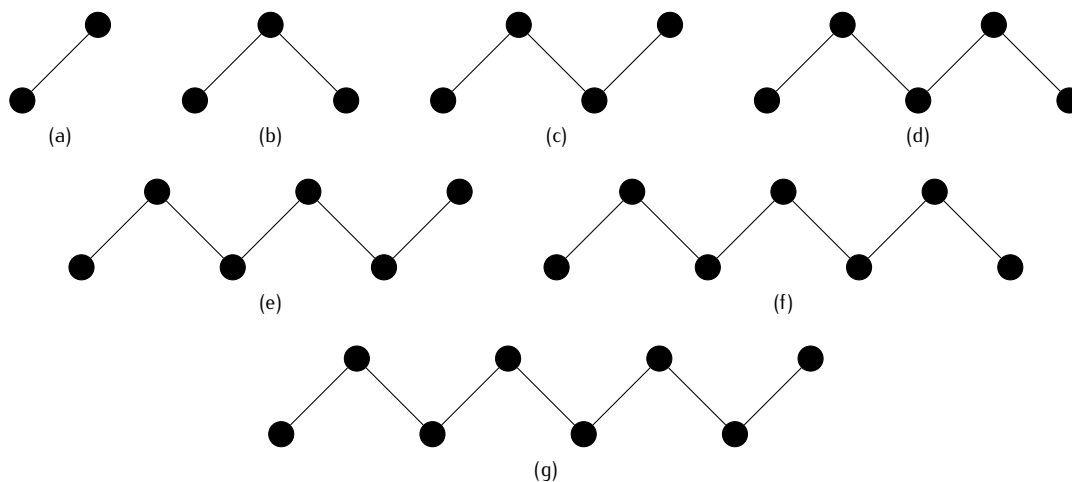
4.1.8 Sprehod kompleksnosti

Trditev 4.9. Indeks wcx za pot P_m je enak

$$\text{wcx} = \frac{1}{2} \left(\text{mwc}_m - 2m + \sum_{i=0}^{m-1} s_i \right) \quad (4.13)$$

in je definiran le za sode števila m .

Dokaz trditve bralec lahko prebere v [61, 66].



Slika 4.1: Poti.

| slika | Topološki kompleksnostni indeksi | | | | | | | | | | | |
|-------|----------------------------------|-------|-------|------|------|-------|-------|-----|-----|------|------|-----|
| | MI | WI | MBI | BTI | BI | N_s | N_t | TC | TC1 | RCI | twc | wcx |
| 4.1a | 1 | 0.7 | 0.7 | 0 | - | 2 | 3 | 4 | 2 | 1.5 | 2 | 1 |
| 4.1b | 4 | 3.6 | 4.8 | 2.8 | 0.0 | 3 | 6 | 14 | 8 | 5.3 | 10 | 7 |
| 4.1c | 10 | 10.3 | 17.8 | 8.8 | 2.0 | 4 | 10 | 32 | 20 | 6.4 | 32 | 16 |
| 4.1d | 20 | 22.2 | 44.4 | 18.5 | 7.5 | 5 | 15 | 60 | 40 | 11.4 | 88 | 56 |
| 4.1e | 35 | 40.9 | 95.5 | 32.2 | 12.0 | 6 | 21 | 100 | 70 | 12.1 | 222 | 111 |
| 4.1f | 56 | 67.8 | 180.9 | 50.4 | 19.2 | 7 | 28 | 154 | 112 | 17.7 | 536 | 320 |
| 4.1g | 84 | 104.5 | 313.6 | 73.1 | 25.0 | 8 | 36 | 224 | 168 | 18.0 | 1254 | 617 |

Tabela 4.1: Topološka kompleksnost indeksov za poti na sliki 4.1.

Legenda:

WI = Wienerjev indeks; MI = Minoli indeks; MBI = Minoli-Bonchev indeks; BTI = Bonchev-Trinajstič indeks, BI = Bertzov indeks; N_s , N_t = število in vrste povezanih podgrafov; TC, TC1 = Boncheva indeksa; RCI = Randičev kompleksnosti indeks, twc = skupni sprehodi; wcx = sprehod kompleksnosti

4.2 Kompleksnost ciklov

V tem sklopu si bomo ogledali topološke indekse ciklov C_m . Na sliki 4.3 prikazujemo cikle C_m za $m \in \{3, \dots, 8\}$, njihovi indeksi pa so navedeni v tabeli (4.2).

4.2.1 MI in MBI indeks

Trditev 4.10. $MI(C_m)$ indeks za cikel C_m je enak

$$MI(C_m) = \frac{m^2(m-1)}{2}. \quad (4.14)$$

Dokaz. Poljubno vozlišče i je začetek poti dolžine l za $1 \leq l \leq m-1$. Vseh poti, ki se začnejo v vozlišču

i je $m - 1$. Ker je v ciklu m vozlišč, sledi, da je $\sum_l P_l = m(m - 1)$. Če to vstavimo v originalno formulo za MI dobimo:

$$\begin{aligned} \text{MI}(C_m) &= \frac{|V||E|}{|V|+|E|} \sum_l P_l \\ &= \frac{m \cdot m}{m+m} \cdot (m - 1)m \\ &= \frac{m^2 \cdot (m-1)m}{2m} \\ &= \frac{m^2 \cdot (m-1)}{2}. \end{aligned}$$

□

Trditev 4.11. $\text{MBI}(C_m)$ indeks za cikel C_m je enak

$$\text{MBI}(C_m) = \frac{m^3(m - 1)}{4}. \quad (4.15)$$

Dokaz. V ciklu C_m je natanko m poti dolžine l , $1 \leq l \leq m - 1$. Zato je

$$\begin{aligned} \sum_l lP_l &= \sum_{l=1}^{m-1} lP_l \\ &= \sum_{l=1}^{m-1} lm \\ &= m \sum_{l=1}^{m-1} l \\ &= m \frac{m(m-1)}{2} \\ &= \frac{m^2(m-1)}{2}. \end{aligned}$$

Vsoto vstavimo v originalno formulo za MBI in dobimo

$$\begin{aligned} \text{MBI}(C_m) &= \frac{|V||E|}{|V|+|E|} \sum_l lP_l \\ &= \frac{m \cdot m}{m+m} \frac{m^2(m-1)}{2} \\ &= \frac{m \cdot m}{2m} \frac{m^2(m-1)}{2} \\ &= \frac{m^3(m-1)}{4}. \end{aligned}$$

□

4.2.2 BTI in BI indeks

Trditev 4.12. $\text{BTI}(C_m)$ indeks za C_m je enak

$$\text{BTI}(C_m) = \begin{cases} \binom{m}{2} \log_2(m - 1) - \frac{m(m-2)}{2}, & \text{če je } m \text{ sod,} \\ \binom{m}{2} \log_2 \frac{m-1}{2}, & \text{če je } m \text{ lih.} \end{cases}$$

Dokaz. Privzemimo, da je m liho število. Potem je najdaljša pot v C_m dolga ravno $\frac{m-1}{2}$. Število vseh poti v C_m dolžine i , za $1 \leq i \leq \frac{m-1}{2}$ pa je ravno m . Vseh poti v grafu je $n = \binom{m}{2}$. Če to vstavimo v formulo (3.3), dobimo

$$\begin{aligned} \text{BTI}(C_m) &= n \log_2 n - \sum_l n_l \log_2 n_l \\ &= \binom{m}{2} \log_2 \binom{m}{2} - \sum_{l=1}^{\frac{m-1}{2}} m \log_2 m \\ &= \binom{m}{2} \log_2 \binom{m}{2} - \frac{m-1}{2} m \log_2 m \\ &= \binom{m}{2} (\log_2 \binom{m}{2} - \log_2 m) \\ &= \binom{m}{2} (\log_2 m + \log_2 \frac{m-1}{2} - \log_2 m) \\ &= \binom{m}{2} \log_2 \frac{m-1}{2}. \end{aligned}$$

Naj bo sedaj m sodo število. Potem imamo v C_m natanko $\frac{m}{2}$ najdaljših poti dolžine $\frac{m}{2}$. Preostalih krajših poti med vozlišči je m za vsako pot dolžine $i = 1, \dots, \frac{m}{2} - 1$. Če to vstavimo v formulo (3.3), dobimo

$$\begin{aligned} \text{BTI}(C_m) &= n \log_2 n - \sum_l n_l \log_2 n_l \\ &= \binom{m}{2} \log_2 \binom{m}{2} - \sum_{l=1}^{\frac{m}{2}-1} m \log_2 m - \frac{m}{2} \log_2 \frac{m}{2} \\ &= \binom{m}{2} \log_2 m + \binom{m}{2} \log_2(m-1) - \binom{m}{2} \log_2 2 - \left(\frac{m}{2} - 1\right) m \log_2 m - \frac{m}{2} \log_2 m + \frac{m}{2} \log_2 2 \\ &= \binom{m}{2} \log_2 m + \binom{m}{2} \log_2(m-1) - \binom{m}{2} - \left(\frac{m}{2} - 1\right) m \log_2 m - \frac{m}{2} \log_2 m + \frac{m}{2} \\ &= \left(\binom{m}{2} - m \left(\frac{m}{2} - 1\right) - \frac{m}{2}\right) \log_2 m + \binom{m}{2} \log_2(m-1) - \binom{m}{2} + \frac{m}{2} \\ &= \frac{m^2 - m - m^2 + 2m - m}{2} \log_2 m + \binom{m}{2} \log_2(m-1) - \left(\frac{m^2 - m}{2} - \frac{m}{2}\right) \\ &= \frac{0}{2} \log_2 m + \binom{m}{2} \log_2(m-1) - \frac{m^2 - 2m}{2} \\ &= \binom{m}{2} \log_2(m-1) - \frac{m(m-2)}{2}. \end{aligned}$$

□

Trditev 4.13. $\text{BI}(C_m)$ za C_m je enak

$$\text{BI}(C_m) = m \log_2 m.$$

Dokaz. Bertzov indeks je v osnovi definiran kot

$$\text{BI} = 2n \log_2 n - \sum_i n_i \log_2 n_i,$$

kjer je n število vseh sosednjih povezav in n_i število vseh sosednjih povezav glede na i -to simetrijo. Ker

imamo opravka s cikli, sta n in n_i enaka številu m . Sledi, da indeks lahko poenostavimo v sledečo obliko

$$\begin{aligned} \text{BI}(C_m) &= 2n \log_2 n - \sum_i n_i \log_2 n_i \\ &= 2m \log_2 m - m \log_2 m \\ &= m \log_2 m. \end{aligned}$$

□

4.2.3 $t(C_m)$ indeks

Trditev 4.14. $t(C_m)$ indeks za C_m je enak

$$t(G) = m.$$

Dokaz. Notranji dual cikla je eno samo vozlišče brez povezav. Iz tega sledi, da je matrika sosednosti $A^* = [0]$ in $\Delta^* = [m]$. Ker je A^* ničelna matrika, je $L^* = \Delta^*$. Sledi, da je indeks enak

$$\begin{aligned} t(G) &= \det L^* \\ &= \det \Delta^* \\ &= m. \end{aligned}$$

□

4.2.4 Indeks povezanih podgrafov

Trditev 4.15. Število povezanih podgrafov $N_s(C_m)$ za C_m je enak

$$N_s(C_m) = m + 1.$$

Dokaz. V grafu imamo m podgrafov, ki imajo dolžino med 0 in $m - 1$ in vsi so poti. Tej množici podgrafov dodamo še sam cikel (graf je tudi sam sebi podgraf). Torej število povezanih podgrafov je enako

$$N_s = m + 1.$$

□

Trditev 4.16. Število vseh povezanih podgrafov $N_t(C_m)$ za C_m je enak

$$N_t(C_m) = m^2 + 1.$$

Dokaz. Število vseh podgrafov dolžine l , $0 \leq l < m$ (če je podgraf pot), je m . Le v primeru, ko je $l = m$, takrat imamo samo en podgraf in sicer kar sam cikel. S formulo zapisano

$$\begin{aligned} N_t(C_m) &= \sum_{l=0}^{m-1} m + 1 \\ &= m \cdot m + 1 \\ &= m^2 + 1. \end{aligned}$$

□

4.2.5 TC in TC1 indeks

Trditev 4.17. $TC(C_m)$ indeks za C_m je enak

$$TC(C_m) = m(m(m+1) + 2).$$

Dokaz. Vsota stopenj vozlišč v grafu C_m , ki pripadajo podpoti dolžine l , kjer je $0 \leq l < m$ (ko je podgraf pot), je enaka $2(l+1)$, saj so v C_m vsa vozlišča stopnje 2. Izjema je podgraf dolžine $l = m$ (torej cikel). Ta je samo eden in vsota njegovih stopenj je enaka $2m$. Formula za $TC(C_m)$ indeks za cikle je zato sledeča.

$$\begin{aligned} TC(C_m) &= \sum_{l=0}^{m-1} m \cdot 2(l+1) + 2m \\ &= 2m \sum_{l=0}^{m-1} (l+1) + 2m \\ &= 2m \left(\sum_{l=0}^{m-1} l + \sum_{l=0}^{m-1} 1 \right) + 2m \\ &= 2m \left(\frac{(m-1)m}{2} + m \right) + 2m \\ &= (m-1)m^2 + 2m^2 + 2m \\ &= m((m-1)m + 2m + 2) \\ &= m(m((m-1) + 2) + 2) \\ &= m(m(m+1) + 2). \end{aligned}$$

□

Trditev 4.18. $TC1(C_m)$ indeks za C_m je enak

$$TC1(C_m) = m(m(m-1) + 2)$$

Dokaz. Vsota stopenj vozlišč v podpoti podgrafa dolžine l , kjer je $0 \leq l < m$ (če je podgraf pot), je enak

$2(l+1) - 2 = 2l$ in vseh podpoti dolžine l je m . Izjema je podgraf dolžine $l = m$ (torej cikel). Ta je samo eden in vsota njegovih stopenj je $2m$. Formula za $TC1(C_m)$ indeks za cikle je torej sledeča:

$$\begin{aligned} TC1(C_m) &= \sum_{l=0}^{m-1} m \cdot 2l + 2m \\ &= 2m \sum_{l=0}^{m-1} l + 2m \\ &= 2m \frac{m(m-1)}{2} + 2m \\ &= m(m(m-1) + 2). \end{aligned}$$

□

4.2.6 RCI indeks

Trditev 4.19. $RCI(C_m)$ indeks za C_m je enak

$$RCI(C_m) = \begin{cases} \frac{6(2^{\frac{m}{2}} - 1)}{2^{\frac{m}{2}}}, & \text{če je } m \text{ sod,} \\ 6 - \frac{1}{2^{\frac{(m-5)}{2}}}, & \text{če je } m \text{ lih.} \end{cases}$$

Dokaz. Po enačbi (3.14) je RCI indeks enak

$$RCI = \sum_{i=1}^{m^*} \sum_{j=1}^m \frac{d_j}{2^{l(i,j)}}.$$

Ker imamo opravka s cikli, je vrednost $m^* = 1$ in $d_j = 2$ za $1 \leq j \leq m$. Zato lahko enačbo zapišemo kot

$$RCI(C_m) = 2 \sum_{j=1}^m \frac{1}{2^{l(i,j)}}.$$

Najprej predpostavimo, da je m liho število. Ker je potem v C_m liho število vozlišč, je $RCI(C_m)$ enak

$$\begin{aligned} RCI(C_m) &= 2 \sum_{j=1}^m \frac{1}{2^{l(i,j)}} \\ &= 2 \left(\frac{1}{2^0} + \frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{2^2} + \cdots + \frac{1}{2^{\frac{m-2}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m-2}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \frac{1}{2^1} + 2 \cdot \frac{1}{2^2} + \cdots + 2 \cdot \frac{1}{2^{\frac{m-2}{2}}} + 2 \cdot \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \left(\frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^2} + \cdots + \frac{1}{2^{\frac{m-2}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} \right) \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \sum_{i=1}^{\frac{m-1}{2}} \frac{1}{2^i} \right). \end{aligned}$$

Ker je vsota $\sum_{i=1}^n \frac{1}{2^i}$ enaka

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{2^i} = \frac{2^n - 1}{2^n} = 1 - \frac{1}{2^n},$$

lahko enačbo zapišemo kot

$$\begin{aligned} \text{RCI}(C_m) &= 2 \left(1 + 2 \cdot \sum_{i=1}^{\frac{m-1}{2}} \frac{1}{2^i} \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \left(1 - \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} \right) \right) \\ &= 2 + 2^2 \cdot \left(1 - \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} \right) \\ &= 2 + 2^2 - \frac{2^2}{2^{\frac{m-1}{2}}} \\ &= 6 - \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}} \cdot 2^{-2}} \\ &= 6 - \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}-4}} \\ &= 6 - \frac{1}{2^{\frac{m-5}{2}}}. \end{aligned}$$

Sedaj pa predpostavimo, da ima C_m sodo število vozlišč. Potem je $\text{RCI}(C_m)$ enak

$$\begin{aligned} \text{RCI}(C_m) &= 2 \sum_{j=1}^m \frac{1}{2^{(i,j)}} \\ &= 2 \left(\frac{1}{2^0} + \frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{2^2} + \dots + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(\frac{1}{2^0} + \frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{2^2} + \dots + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} - \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \frac{1}{2^1} + 2 \cdot \frac{1}{2^2} + \dots + 2 \cdot \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} + 2 \cdot \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} - \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \left(\frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^2} + \dots + \frac{1}{2^{\frac{m-1}{2}}} + \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) - \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \frac{1}{2^i} - \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(1 + 2 \cdot \frac{2^{\frac{m}{2}} - 1}{2^{\frac{m}{2}}} - \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(\frac{2^{\frac{m}{2}}}{2^{\frac{m}{2}}} + 2 \cdot \frac{2^{\frac{m}{2}} - 1}{2^{\frac{m}{2}}} - \frac{1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(\frac{2^{\frac{m}{2}} - 1}{2^{\frac{m}{2}}} + 2 \cdot \frac{2^{\frac{m}{2}} - 1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 2 \left(3 \cdot \frac{2^{\frac{m}{2}} - 1}{2^{\frac{m}{2}}} \right) \\ &= 6 \cdot \frac{2^{\frac{m}{2}} - 1}{2^{\frac{m}{2}}}. \end{aligned}$$

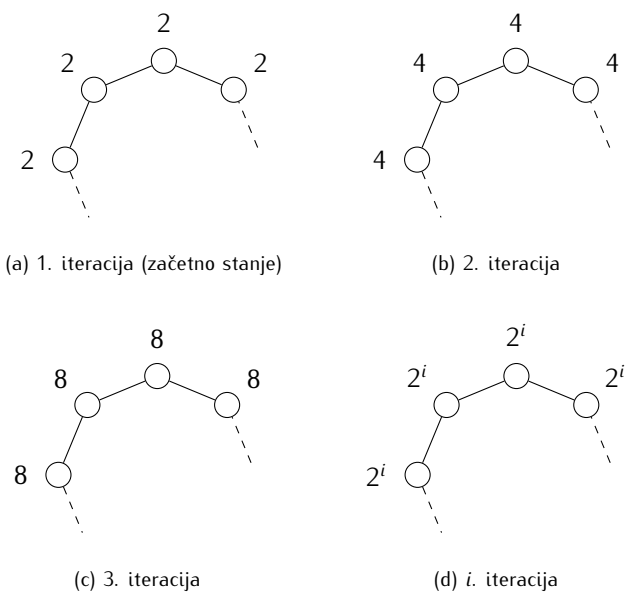
□

4.2.7 Število skupnih poti in sprehod kompleksnosti

Trditev 4.20. Indeks $\text{twc}(C_m)$ za C_m je enak

$$\text{twc}(C_m) = 2m(2^{m-1} - 1).$$

Dokaz. Rucker in Rucker [61] sta dokazala, da sta MEC in awc_l identična, kjer je l število sprehodov v grafu. Zato bomo dokaz izpeljali s pomočjo Morganovega algoritma. Najprej vsako vozlišče na začetku označimo s stopnjo vozlišča, torej z 2. Nato v naslednji iteraciji izračunamo novo vrednost vozlišča, ki pa je enaka vsoti vrednosti vseh sosednjih vozlišč (glej sliko 4.2). To ponovimo $(m - 1)$ -krat. Dobljena vsota vseh vrednosti je enaka twc indeksu. Torej je indeks $twc(C_m)$ enak



Slika 4.2: Morganov algoritem na ciklih.

$$\begin{aligned}
 twc(C_m) &= \sum_{i=1}^{m-1} m \cdot 2^i \\
 &= m \cdot \sum_{i=1}^{m-1} 2^i \\
 &= m \cdot 2(2^{m-1} - 1) \\
 &= 2m(2^{m-1} - 1).
 \end{aligned}$$

□

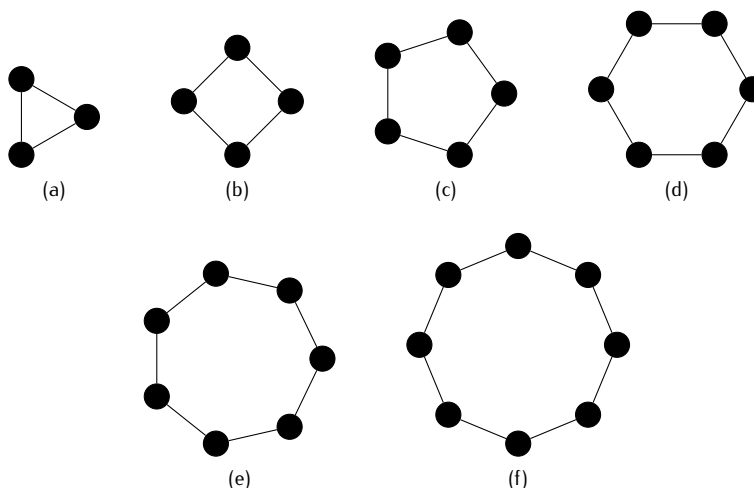
Trditev 4.21. Indeks $wcx(C_m)$ za C_m je enak

$$wcx(C_m) = 2(2^{m-1} - 1).$$

Dokaz. Dokaz je zelo podoben prejšnjemu dokazu. V tem primeru je zaradi simetrije indeks enak

$$\begin{aligned} \text{wcx}(C_m) &= \sum_{i=1}^{m-1} \cdot 2^i \\ &= 2(2^{m-1} - 1). \end{aligned}$$

□



Slika 4.3: Cikli

| slika | Topološki kompleksnostni indeksi | | | | | | | | | | | | |
|-------|----------------------------------|-----|-------|------|------|---|----------------|----------------|-----|-----|------|------|-----|
| | WI | MI | MBI | BTI | BI | t | N _s | N _t | TC | TC1 | RCI | twc | wcx |
| 4.3a | 3 | 9 | 13.5 | 0 | 4.8 | 3 | 4 | 10 | 42 | 24 | 4.00 | 18 | 6 |
| 4.3b | 8 | 24 | 48.0 | 5.5 | 8.0 | 4 | 5 | 17 | 88 | 56 | 4.50 | 56 | 14 |
| 4.3c | 15 | 50 | 125.0 | 10.0 | 11.6 | 5 | 6 | 26 | 160 | 110 | 5.00 | 150 | 30 |
| 4.3d | 27 | 90 | 270.0 | 22.8 | 15.5 | 6 | 7 | 37 | 264 | 192 | 5.25 | 372 | 62 |
| 4.3e | 39 | 147 | 514.5 | 33.3 | 19.7 | 7 | 8 | 50 | 406 | 308 | 5.50 | 882 | 126 |
| 4.3f | 47 | 224 | 896.0 | 54.6 | 24.0 | 8 | 9 | 65 | 592 | 464 | 5.63 | 2032 | 254 |

Tabela 4.2: Topološka kompleksnost indeksov za cikle na sliki 4.3

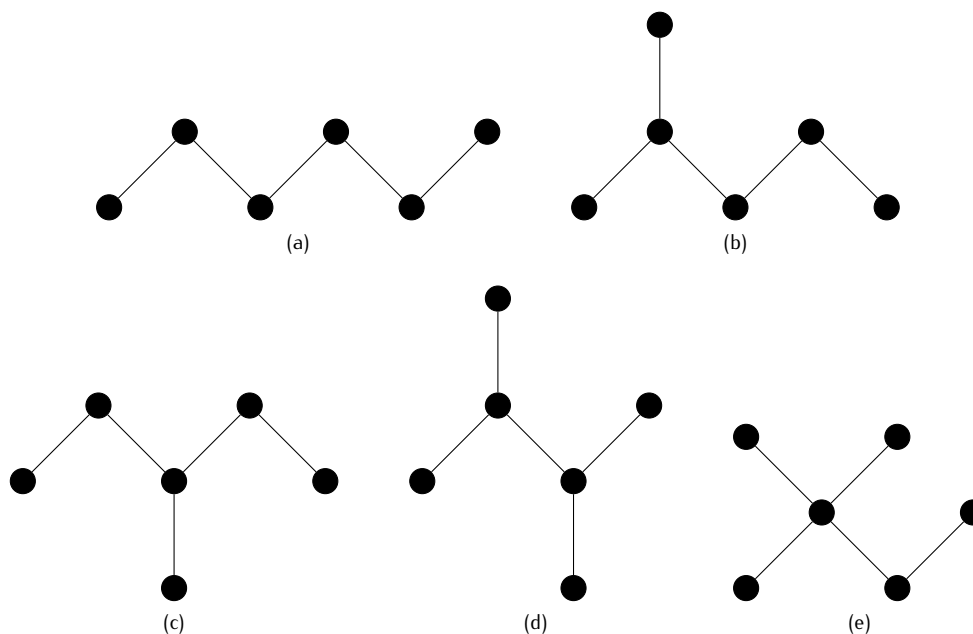
Legenda:

WI = Wienerjev indeks; MI = Minoli indeks; MBI = Minoli-Bonchev indeks; BTI = Bonchev-Trinajstič indeks, BI = Bertzov indeks; N_s, N_t = število in vrste povezanih podgrafov; TC, TC1 = Boncheva indeksa; RCI = Randičev kompleksnosti indeks, twc = skupni sprehodi; wcx = sprehod kompleksnosti

4.3 Razvejanost in kompleksnost na drevesih s šestimi vozlišči

V tem razdelku bomo pogledali razvejanost in kompleksnost na drevesih s šestimi vozlišči. Drevesa so upodobljena na sliki 4.4 in njihovi indeksi so prikazani v tabeli 4.3. Indeks Minoli ni vključen, saj ima enako vrednost za vsa drevesa in sicer 40,9.

Kot je razvidno iz tabele 4.3, simetrija ne vpliva na indekse N_t , TC, TC1 in twc. Ti indeksi se večajo z razvejanostjo grafa. Ravno obratni učinek imata MBI in BTI, ki se z razvejanostjo manjšata. Za BI, N_s , RCI, wcx in WI pa ne moremo napovedati obnašanja.



Slika 4.4: Drevesa

| slika | Topološki kompleksnostni indeksi | | | | | | | | | | |
|-------|----------------------------------|------|------|------|-------|-------|-----|-----|------|-----|-----|
| | WI | MBI | BTI | BI | N_s | N_t | TC | TC1 | RCI | twc | wcx |
| 4.4a | 10 | 95.5 | 32.2 | 12.0 | 6 | 21 | 100 | 70 | 12.1 | 222 | 111 |
| 4.4b | 31 | 87.3 | 28.6 | 21.2 | 8 | 24 | 127 | 88 | 21.9 | 268 | 234 |
| 4.4c | 31 | 84.5 | 27.4 | 19.2 | 8 | 25 | 136 | 94 | 17.8 | 284 | 201 |
| 4.4d | 29 | 79.1 | 23.5 | 21.0 | 7 | 28 | 164 | 112 | 9.8 | 330 | 124 |
| 4.4e | 28 | 76.4 | 22.6 | 29.8 | 8 | 30 | 181 | 122 | 19.5 | 370 | 272 |

Tabela 4.3: Drevesa

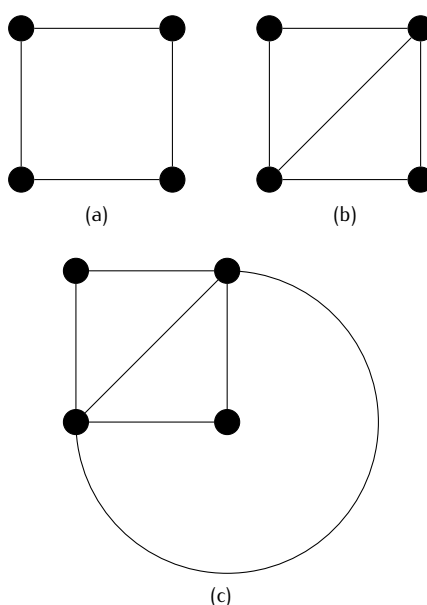
Legenda:

WI = Wienerjev indeks; MI = Minoli indeks; MBI = Minoli-Bonchev indeks; BTI = Bonchev-Trinajstič indeks, BI = Bertzov indeks; N_s , N_t = število in vrste povezanih podgrafov; TC, TC1 = Boncheva indeksa; RCI = Randičev kompleksnosti indeks, twc = skupni sprehodi; wcx = sprehod kompleksnosti

4.4 Cikličnost in kompleksnost

Cikličnost lahko upoštevamo v obliki zapiranja ciklov ali pa z večanjem števila ciklov. Če primerjamo indekse za poti iz tabele 4.1 in za cikle iz tabele 4.4 z enakim številom vozlišč, je iz tabele 4.4 razvidno, da ima naslednjih osem indeksov (MI, MBI, N_s , N_t , TC, TC1, twc, wcx) vedno večjo vrednost za cikle kot za poti, kar nakazuje, da je zgradba ciklov bolj zapletena. To je pričakovano, saj so cikli bolj simetrični. Vendar je treba opozoriti, da so indeksi WI, BTI, RCI in wcx vedno manjši za cikle kot za poti.

Kot je navedeno zgoraj se cikličnost kaže skozi vse večje število ciklov. Za ponazoritev tega smo uporabili tri ravninske grafe, ki vsebujejo cikle na štirih vozliščih, ki so upodobljeni na sliki 4.5, njihovi indeksi pa so navedeni v tabeli 4.4.



Slika 4.5: Planarni na štirih vozliščih.

| slika | Topološki kompleksnostni indeksi | | | | | | | | | | | | |
|-------|----------------------------------|------|-------|-----|------|--------|-------|-------|-----|-----|------|-----|-----|
| | WI | MI | MBI | BTI | BI | $t(G)$ | N_s | N_t | TC | TC1 | RCI | twc | wcx |
| 4.5a | 8 | 24.0 | 48.0 | 5.5 | 8.0 | 4 | 5 | 17 | 88 | 56 | 4.5 | 56 | 14 |
| 4.5b | 7 | 42.2 | 86.7 | 3.9 | 36.0 | 8 | 9 | 33 | 254 | 152 | 12.0 | 102 | 51 |
| 4.5c | 7 | 72.0 | 158.4 | 0.0 | 43.0 | 16 | 10 | 64 | 648 | 372 | 7.5 | 156 | 39 |

Tabela 4.4: Planarni grafi na štiri vozliščih.

Legenda:

WI = Wienerjev indeks; MI = Minoli indeks; MBI = Minoli-Bonchev indeks; BTI = Bonchev-Trinajstić indeks, BI = Bertzov indeks; N_s , N_t = število in vrste povezanih podgrafov; TC, TC1 = Boncheva indeksa; RCI = Randićev kompleksnosti indeks, twc = skupni sprehodi; wcx = sprehod kompleksnosti

Poglavje 5

Wienerjev indeks v odvisnosti od največje stopnje grafa

To poglavje je povzeto iz članka [67], kjer je Stevanović obravnaval zgornjo mejo Wienerjevega indeksa za grafe z n vozlišči z najvišjo stopnjo $\Delta \geq 3$.

V definiciji 2.14 smo definirali največjo stopnjo vozlišča v grafu G in jo označili z $\Delta(G)$ oziroma samo Δ .

Definicija 5.1. Naj bosta $n, \Delta \in \mathbb{N}$. Potem $\mathcal{G}_{n,\Delta}$ označuje množico vseh povezanih grafov z n vozlišči in največjo stopnjo Δ .

V definiciji 2.19 smo definirali razdaljo med vozliščema i in j v grafu G in jo označili z $d_G(i, j)$. Sedaj lahko definiramo vsoto vseh razdalj poljubnega vozlišča v grafu G do preostalih vozlišč.

Definicija 5.2. Naj bo $G = (V, E)$ povezan graf z n vozlišči in naj bo $u \in V$ poljubno vozlišče v grafu. Naj bo $d_G(i, j)$ razdalja med vozliščema i in j v grafu G . Potem je vsota razdalj vozlišča u do vseh drugih vozlišč v grafu G definirana kot

$$d_G(u) = \sum_{v \in V} d_G(u, v).$$

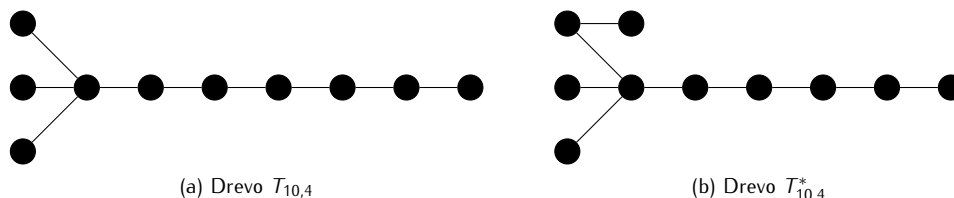
Definicija 5.3 (List). Vozlišče u v grafu $G = (V, E)$ stopnje $\text{st}(u) = 1$ imenujemo list.

Definicija 5.4 (Prazen graf). Naj bo $G = (V, E)$ graf z n vozlišči. Grafu G rečemo prazen graf, če množica E ne vsebuje nobene povezave. Tak graf označimo s \bar{K}_n .

Definicija 5.5. Naj bo $T_{n,\Delta}$ drevo z n vozlišči, ki je dobljeno s poti $P_{n-\Delta+1}$ in praznega grafa $\bar{K}_{\Delta-1}$ tako, da eno krajišče poti (t.j. list) povežemo z ostalimi vozlišči grafa $\bar{K}_{\Delta-1}$.

Naj bo $T_{n,\Delta}^*$ drevo, kjer je $n \geq \Delta + 2$, ki ga dobimo iz $T_{n-1,\Delta}$ tako, da dodamo novo vozlišče in to vozlišče povežemo z enim izmed listov drevesa $T_{n-1,\Delta}$, ki so povezani z vozliščem stopnje Δ .

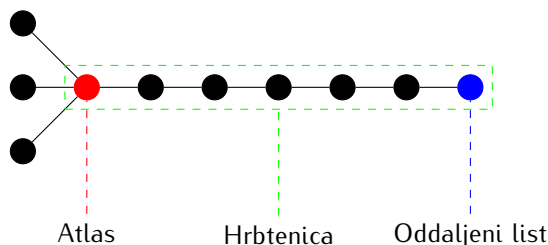
Primer 5.1 Primer grafov $T_{10,4}$ in $T_{10,4}^*$ vidimo na sliki 5.1.



Slika 5.1: Drevesi $T_{10,4}$ in $T_{10,4}^*$.

Definicija 5.6. Naj bosta $m, \Delta \in \mathbb{N}$, tako da je $0 \leq m \leq \binom{\Delta-1}{2}$. Naj bo $\mathcal{T}_{n,\Delta,m}$ množica dreves z n vozlišči, ki so dobljena s poti $P_{n-\Delta+1}$ in poljubnega grafa z $\Delta - 1$ vozlišči in m povezavami tako, da eno krajišče poti (t.j. list) povežemo z ostalimi vozlišči grafa.

V grafu $G \in \mathcal{T}_{n,\Delta,m}$ pot $P_{n-\Delta+1}$ imenujemo hrbtenica grafa G . Krajišče hrbtenice s stopnjo Δ imenujemo atlas grafa G in drugo krajišče hrbtenice grafa, ki je stopnje 1, imenujemo oddaljeni list grafa G .



Slika 5.2: Hrbtenica, atlas in oddaljeni list.

Ker obravnavamo le povezane grafe, je za $\Delta = 1$ možno le $n = 2$ (torej P_2). Podobno velja v primeru, ko je $\Delta = 2$. Takrat množica $\mathcal{G}_{n,\Delta}$ vsebuje le dva grafa, in sicer pot P_n in cikel C_n . Zato bomo odslej v tem poglavju predpostavili, da je $\Delta \geq 3$.

Definicija 5.7 (Premer). Naj bo $G = (V, E)$ in naj bosta $u, v \in V$ poljubni vozlišči. Premer grafa G je definiran kot

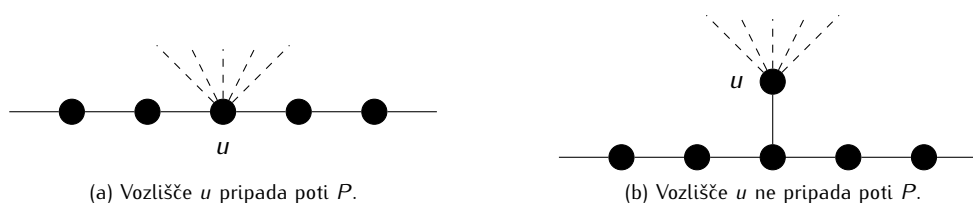
$$\text{diam}(G) = \max_{u,v \in V} d_G(u, v).$$

Lema 5.1. Premer grafa $G \in \mathcal{G}_{n,\Delta}$ je največ $n - \Delta + 1$.

Dokaz. Naj bo u vozlišče s stopnjo Δ v grafu G in naj bo P pot dolžine $\text{diam}(G)$ v grafu G s krajišči x in y . Najmanj $\Delta - 2$ sosednjih vozlišč vozlišča u ne pripada poti P , ker v primeru:

- ko vozlišče u pripada poti P (glej sliko 5.3a), največ dva soseda vozlišča u pripadata poti P . Če bi poti P pripadali več kot dve sosedi vozlišča u , potem pot P ne bi bila najkrajša pot med x in y , kar je v nasprotju s predpostavko, da je P najkrajša pot. Če poti P pripada samo en sosed vozlišča u , potem $u = x$ ali $u = y$ in $\Delta - 1$ sosedov vozlišča ne pripada poti P . Torej največ dva soseda vozlišča u pripadata poti P in sledi, da najdaljša možna pot P vsebuje največ $n - (\Delta - 2) = n - \Delta + 2$ vozlišč.
- ko vozlišče u ne pripada poti P (glej sliko 5.3b), največ dva od sosedov vozlišča u pripada poti P . Če poti P pripada en sam sosed vozlišča u , ima P največ $n - \Delta + 2$ vozlišč. Če poti P pripadata dva soseda vozlišča u , morata ta dva soseda biti na poti P sosednji, sicer P ne bi bila najdaljša pot med vozliščema x in y . Torej v tem primeru P vsebuje največ $n - \Delta - 1$ vozlišč. Če poti P pripadata več kot dva soseda, pa očitno P ni najdaljša pot med x in y , kar pa je v protislovju s predpostavko.

Sledi, da pot P vsebuje največ $n - \Delta + 2$ vozlišč, zato je njegoval dolžina kvečjemu $n - \Delta + 1$.



Slika 5.3: Največji možni premer grafa G .

□

Lema 5.2. Naj bo G graf v $\mathcal{G}_{n,\Delta}$. Potem velja

$$d_G(u) \leq \frac{(n - \Delta + 1)(n + \Delta - 2)}{2}$$

za vsako vozlišče u v grafu G . Enakost velja natanko tedaj, ko je $G \in \mathcal{T}_{n,\Delta,m}$ za neki m in je u oddaljeni list v grafu G .

Dokaz. Naj bo $\text{ecc}(u)$ razdalja od vozlišča u do njemu najbolj oddaljenega vozlišča v grafu G . Potem so vozlišča na poti od u do (enega od) najbolj oddaljenih vozlišč na razdalji $1, 2, \dots, \text{ecc}(u)$ od vozlišča u , medtem, ko je razdalja do ostalih vozlišč grafa G največ $\text{ecc}(u)$. Torej,

$$\begin{aligned} d_G(u) &\leq (1 + 2 + \dots + \text{ecc}(u)) + \text{ecc}(u)(n - 1 - \text{ecc}(u)) \\ &= \text{ecc}(u) \left(n - \frac{\text{ecc}(u) + 1}{2} \right). \end{aligned}$$

Vrednost funkcije $f(x) = x(n - \frac{x+1}{2})$ strogo narašča za $x < n - \frac{1}{2}$. Zato za $\text{ecc}(u) \leq \text{diam}(G) \leq n - \Delta + 1 < n - \frac{1}{2}$ velja, da je

$$d_G(u) \leq f(\text{ecc}(u)) \leq f(n - \Delta + 1) = \frac{(n - \Delta + 1)(n + \Delta - 2)}{2}.$$

Enakost velja natanko tedaj, ko je $d_G(u) = f(\text{ecc}(u))$ in $\text{ecc}(u) = \text{diam}(G) = n - \Delta + 1$. Sledi, da obstaja natanko eno vozlišče na razdalji d od vozlišča u za vsak $d = 1, 2, \dots, \text{ecc}(u) - 1$. Preostala vozlišča pa so na razdalji $\text{ecc}(u)$ od vozlišča u . Torej je G iz množice $\mathcal{T}_{n,\Delta,m}$ in vozlišče u kot oddaljeni list grafa G .

□

Naj bo u oddaljeni list v $T_{n,\Delta}$ tako kot v prejšnji lemi. Potem iz

$$\text{WI}(T_{n,\Delta}) = \text{WI}(T_{n-1,\Delta}) + d_{T(n,\Delta)}(u)$$

dobimo rekurzijo

$$\text{WI}(T_{n,\Delta}) = \text{WI}(T_{n-1,\Delta}) + \frac{(n - \Delta + 1)(n + \Delta - 2)}{2}. \quad (5.1)$$

S pomočjo te rekurzivne zveze lahko izpeljemo tudi splošno formulo

$$\begin{aligned} \text{WI}(T_{n,\Delta}) &= \text{WI}(T_{n-1,\Delta}) + \frac{(n-\Delta+1)(n+\Delta-2)}{2} \\ &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \sum_{i=1}^j \frac{((n-i+1)-\Delta+1)((n-i+1)+\Delta-2)}{2} \\ &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \sum_{i=1}^j \frac{((n-\Delta+2)-i)((n+\Delta-1)-i)}{2} \\ &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \sum_{i=1}^j \left(\frac{(n-\Delta+2)(n+\Delta-1) - i(n-\Delta+2+n+\Delta-1) + i^2}{2} \right) \\ &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \sum_{i=1}^j \left(\frac{(n-\Delta+2)(n+\Delta-1)}{2} - \frac{i(2n+1)}{2} + \frac{i^2}{2} \right) \\ &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \frac{j(n-\Delta+2)(n+\Delta-1)}{2} - \frac{(2n+1)}{2} \frac{j(j+1)}{2} + \frac{1}{2} \frac{j(j+1)(2j+1)}{6} \\ &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \frac{j(n-\Delta+2)(n+\Delta-1)}{2} + \frac{j(j+1)}{2} \left(\frac{(2j+1)}{6} - \frac{(2n+1)}{2} \right) \\ &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \frac{j(n-\Delta+2)(n+\Delta-1)}{2} + \frac{j(j+1)}{2} \cdot \frac{(2j-6n-2)}{6}. \end{aligned}$$

Najmanjše možno drevo $T_{n-j,\Delta}$, kjer je vrednost Δ fiksna, je zvezda. Sledi, da je vrednost $n - j$ enaka

$\Delta + 1$ oziroma $j = n - \Delta - 1$. Naj bo $k = n - \Delta$. Vrednosti vstavimo v formulo.

$$\begin{aligned}
 \text{WI}(T_{n,\Delta}) &= \text{WI}(T_{n-j,\Delta}) + \frac{j(n-\Delta+2)(n+\Delta-1)}{2} + \frac{j(j+1)}{2} \cdot \frac{(2j-6n-2)}{6} \\
 &= \text{WI}(T_{n-(n-\Delta-1),\Delta}) + \frac{(n-\Delta-1)(n-\Delta+2)(n+\Delta-1)}{2} + \frac{(n-\Delta-1)((n-\Delta-1)+1)}{2} \cdot \frac{(2(n-\Delta-1)-6n-2)}{6} \\
 &= \Delta^2 + \frac{(n-\Delta-1)(n-\Delta+2)(n+\Delta-1)}{2} - \frac{(n-\Delta-1)(n-\Delta)(2n+\Delta+2)}{6} \\
 &= \Delta^2 + \frac{(k-1)(k+2)(k+2\Delta-1)}{2} - \frac{(k-1)k(2k+3\Delta+2)}{6} \\
 &= \Delta^2 + \frac{(k-1)(k+2)(k-1)}{2} + (k-1)(k+2)\Delta - \frac{(k-1)k(2k+2)}{6} - (k-1)k\frac{\Delta}{2} \\
 &= \Delta^2 + \frac{k^3-3k+2}{2} + (k-1)(k+2)\Delta - \frac{k^3-k}{3} - (k-1)k\frac{\Delta}{2} \\
 &= \Delta^2 + \frac{k^3-7k+6}{6} + (k^2+3k-4)\frac{\Delta}{2} \\
 &= \Delta^2 + \left(\frac{k^3+3k^2+2k}{6} - \frac{3k^2+9k}{6} + 1 \right) + \left(\frac{\Delta(k^2+3k)}{2} - 2\Delta \right) \\
 &= \frac{k(k+1)(k+2)}{6} - \frac{k(k+3)}{2} + \frac{\Delta k(k+3)}{2} + \Delta^2 - 2\Delta + 1 \\
 &= \frac{k(k+1)(k+2)}{6} + \left(\frac{\Delta k(k+3)}{2} - \frac{k(k+3)}{2} + \Delta - 1 \right) + \Delta^2 - 3\Delta + 2 \\
 &= \binom{k+2}{3} + \left(\frac{\Delta k(k+3)}{2} - \frac{k(k+3)}{2} + \Delta - 1 \right) + (\Delta - 1)(\Delta - 2) \\
 &= \binom{k+2}{3} + (\Delta - 1) \left(\frac{k(k+3)}{2} + 1 \right) + (\Delta - 1)(\Delta - 2) \\
 &= \binom{k+2}{3} + (\Delta - 1) \frac{(k+1)(k+2)}{2} + (\Delta - 1)(\Delta - 2) \\
 &= \binom{n-\Delta+2}{3} + (\Delta - 1) \frac{(n-\Delta+1)(n-\Delta+2)}{2} + (\Delta - 1)(\Delta - 2).
 \end{aligned}$$

Torej lahko rečemo, da je Wienerjev indeks drevesa $\text{WI}(T_{n,\Delta})$ enak

$$\text{WI}(T_{n,\Delta}) = \binom{n-\Delta+2}{3} + (\Delta - 1) \frac{(n-\Delta+1)(n-\Delta+2)}{2} + (\Delta - 1)(\Delta - 2).$$

Če vrednost n fiksiramo in spreminjamo samo vrednost Δ (torej gledamo $\text{WI}(T_{n,\Delta})$ kot funkcijo dveh spremenljivk), potem velja sledeča relacija

$$\text{WI}(P_n) = \text{WI}(T_{n,2}) > \text{WI}(T_{n,3}) > \text{WI}(T_{n,4}) > \dots > \text{WI}(T_{n,n-1}) = \text{WI}(S_n).$$

Preden nadaljujemo z izrekom, najprej definirajmo $G - v$.

Definicija 5.8. Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo $v \in V$. Potem je $G - v$ graf, ki ga dobimo z odstranitvijo vozlišča v iz grafa G ter vseh povezav $e \in E$, ki ima vozlišče v za krajišče.

Izrek 5.1. Za vsak graf $G \in \mathcal{G}_{n,\Delta}$ velja

$$\text{WI}(G) \leq \text{WI}(T_{n,\Delta}).$$

Enakost velja, ko je graf G izomorfen drevesu $T_{n,\Delta}$.

Dokaz. Naj bo G graf iz množice $\mathcal{G}_{n,\Delta}$. Najprej opazimo, da se Wienerjev indeks strogo poveča pri odstranitvi povezave med vozliščema u in v iz grafa G . Saj se razdalja med poljubnimi pari vozlišč ne zmanjša, medtem ko se razdalja med vozlišči u in v strogo poveča. Sledi, da za vsako vpeto drevo T v grafu G velja

$$WI(G) \leq WI(T).$$

Enakost velja natanko tedaj, ko je $G = T$. Ker ima poljuben graf iz množice $\mathcal{G}_{n,\Delta}$ vpeto drevo z maksimalno stopnjo Δ , lahko v dokazu obravnavamo le taka drevesa.

Izrek bomo dokazali z indukcijo po n . Za $n = \Delta + 1$ obstaja samo eno drevo z $\Delta + 1$ vozlišč in najvišjo stopnjo Δ , in sicer $S_{\Delta+1} \cong T_{\Delta+1,\Delta}$. Torej trditev velja za $n = \Delta + 1$.

Sedaj predpostavimo, da ima drevo $T_{n,\Delta}$, $n \geq \Delta + 1$, največji Wienerjev indeks v množici grafov $\mathcal{G}_{n,\Delta}$. Naj bo T poljubno drevo iz $\mathcal{G}_{n+1,\Delta}$.

Potem drevo T vsebuje tak list q , da se z njegovo odstranitvijo ne zmanjšuje največja stopnja v drevesu T . V nasprotnem primeru, bi drevo T vsebovalo le eno vozlišče s stopnjo Δ in vsi listi bi bili sosednji temu vozlišču. Torej bi bilo drevo T izomorfnu zvezdi, kar pa je v nasprotju z $n + 1 \geq \Delta + 2$.

Naj bo vozlišče p sosednje vozlišču q v drevesu T . Potem za vsako vozlišče u v drevesu T velja

$$d_T(u, q) = d_{T-q}(u, p) + 1,$$

medtem ko razdalje med vsemi ostalimi pari vozlišč drevesa $T - q$ ostanejo nespremenjene. Tako velja

$$\begin{aligned} WI(T) &= \sum_{\{u,v\} \in \binom{V(T)}{2}} d_T(u, v) \\ &= \sum_{\{u,v\} \in \binom{V(T-q)}{2}} d_{T-q}(u, v) + \sum_{u \in V(T-q)} d_T(u, q) \\ &= WI(T - q) + \sum_{u \in V(T-q)} (d_{T-q}(u, p) + 1) \\ &= WI(T - q) + d_{T-q}(p) + n. \end{aligned}$$

Po induktivni predpostavki velja

$$WI(T - q) \leq WI(T_{n,\Delta}) \tag{5.2}$$

in s pomočjo leme 5.2 dobimo, da je

$$d_{T-q}(p) \leq \frac{(n - \Delta + 1)(n + \Delta - 2)}{2}. \tag{5.3}$$

S pomočjo rekurzije (5.1) pa dobimo, da je

$$\text{WI}(T) \leq \text{WI}(T_{n,\Delta}) + \frac{(n - \Delta + 1)(n + \Delta - 2)}{2} + n = \text{WI}(T_{n+1,\Delta}).$$

Zgornja enakost velja natanko tedaj, ko enakost velja v enačbah (5.2) in (5.3). Induktivna predpostavka pove, da je $T - q \cong T_{n,\Delta}$ in vozlišče p je oddaljeni list v $T_{n,\Delta}$. S tem smo pokazali, da je $T \cong T_{n+1,\Delta}$. Sledi, da je $T_{n+1,\Delta}$ edini graf v $\mathcal{G}_{n+1,\Delta}$, ki doseže najvišjo vrednost Wienerjevega indeksa [67].

□

Lema 5.3. *Naj bo $G \in \mathcal{G}_{n,\Delta}$. Če je $\Delta < n - 1$, potem obstaja tako vozlišče u v grafu G , da je $G - u \in \mathcal{G}_{n-1,\Delta}$.*

Dokaz. Naj bo v vozlišče s stopnjo Δ v grafu G in naj bo T vpeto drevo v grafu G , ki vsebuje vse povezave s krajiščem v . Ker je $\Delta < n - 1$, obstaja list u v drevesu T , ki ni sosedni vozlišču v . Potem je $G - u \in \mathcal{G}_{n-1,\Delta}$, saj vsebuje povezan podgraf $T - u$ in $\text{st}_{G-u}(v) = \Delta$ [67].

□

Izrek 5.2. *Za graf $G \in \mathcal{G}_{n,\Delta}$ velja*

$$\text{WI}(G) > \text{WI}(T_{n,\Delta}) - (n - \Delta), \quad (5.4)$$

natanko takrat, ko je $G \in \mathcal{T}_{n,\Delta,m}$ za neki $m < n - \Delta$ ali pa je $G \cong T_{n,3}^$.*

Dokaz. Najprej predpostavimo, da je $G \in \mathcal{T}_{n,\Delta,m}$ za neki $m < n - \Delta$. Listi, ki so sosednji vozlišču s stopnjo Δ v $T_{n,\Delta}$, so med seboj na razdalji 2. Vendar izmed njih je m parov povezanih v G . Zato sledi, da je

$$\text{WI}(G) = \text{WI}(T_{n,\Delta}) - m > \text{WI}(T_{n,\Delta}) - (n - \Delta).$$

Še več, če je $G \cong T_{n,3}^*$ (torej $\Delta = 3$), potem je

$$\text{WI}(T_{n,3}^*) = \text{WI}(T_{n,3}) - (n - 5) > \text{WI}(T_{n,3}) - (n - 3).$$

Dokaz v nasprotni smeri bomo naredili z indukcijo po n za poljubno fiksno maksimalno stopnjo Δ . Za $n = \Delta + 1$ po relaciji (5.4) velja, da je $\text{WI}(G) = \text{WI}(T_{n,\Delta})$ in po izreku 5.1 v tem primeru velja $G \cong T_{n,\Delta} \in \mathcal{T}_{n,\Delta,0}$.

Predpostavimo, da smo to smer izreka dokazali za vse povezane grafe z manj kot n vozlišči, $n > \Delta + 1$. Naj bo $G \in \mathcal{G}_{n,\Delta}$ graf, za katerega velja relacija (5.4). Naj bo u tako vozlišče v grafu G kot v lemi 5.3, t.j. $G - u \in \mathcal{G}_{n-1,\Delta}$. Ko vozlišče u odstranimo iz grafa G , se razdalja med dvema vozliščema v $G - u$ ne

zmanjša, in tako je

$$\text{WI}(G) \leq \text{WI}(G - u) + d_G(u).$$

Po lemi 5.2 dobimo, da je

$$d_G(u) \leq \frac{(n - \Delta + 1)(n + \Delta - 2)}{2}.$$

Če v tej relaciji velja enakost, po isti lemi velja, da je G iz množice $\mathcal{T}_{n,\Delta,m}$ za nek m in je vozlišče u oddaljeni list tega drevesa. Iz prvega dela tega dokaza velja, da je $\text{WI}(G) = \text{WI}(T_{n,\Delta}) - m$ in iz relacije (5.4) sledi, da je $m < n - \Delta$. Zato lahko v preostalem delu dokaza predpostavimo, da je

$$d_G(u) \leq \frac{(n - \Delta + 1)(n + \Delta - 2)}{2} - 1.$$

Če $G - u$ ne pripada množici $\mathcal{T}_{n-1,\Delta,m}$ za vsak $m < (n - 1) - \Delta$, potem po induktivni predpostavki velja

$$\text{WI}(G - u) \leq \text{WI}(T_{n-1,\Delta}) - (n - 1 - \Delta).$$

Zato je,

$$\begin{aligned} \text{WI}(G) &\leq \text{WI}(G - u) + d_G(u) \\ &\leq \text{WI}(T_{n-1,\Delta}) - (n - 1 - \Delta) + \left(\frac{(n-\Delta+1)(n+\Delta-2)}{2} - 1 \right) \\ &\leq \text{WI}(T_{n,\Delta}) - (n - \Delta), \end{aligned}$$

kar pa je v nasprotju z relacijo (5.4).

Sedaj predpostavimo, da $G - u$ pripada $\mathcal{T}_{n-1,\Delta,m}$ za nek $m < (n - 1) - \Delta$. Torej velja

$$\text{WI}(G - u) = \text{WI}(T_{n-1,\Delta}) - m \leq \text{WI}(T_{n-1,\Delta}).$$

Glede na tip soseda vozlišča u ločimo dva primera.

Prvič, če je u sosedni listu, ki je sosedni atlasu grafa $G - u$, potem je na razdalji največ 3 od drugih sosedov atlasa in je na razdalji $2, 3, \dots, n - \Delta + 1$ od drugih vozlišč na hrbtenici grafa $G - u$. Torej je

$$\begin{aligned} d_G(u) &\leq 1 + (\Delta - 2) \cdot 3 + [2 + 3 + \dots + (n - \Delta + 1)] \\ &= \frac{(n-\Delta)(n-\Delta+3)}{2} + 3\Delta - 5. \end{aligned}$$

Enakost velja, ko je $m = 0$ in vozlišče u nima drugih sosedov v grafu G . Potem je

$$\begin{aligned}
 W(G) &\leq WI(G - u) + d_G(u) \\
 &\leq WI(T_{n-1,\Delta}) + \frac{(n-\Delta)(n-\Delta+3)}{2} + 3\Delta - 5 \\
 &= WI(T_{n,\Delta}) - \frac{(n-\Delta+1)(n+\Delta-2)}{2} + \frac{(n-\Delta)(n-\Delta+3)}{2} + 3\Delta - 5 \\
 &= WI(T_{n,\Delta}) - n(\Delta - 2) + (\Delta^2 - 4).
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

Če je $\Delta = 3$, potem zgornjo neenakost (5.5) zapišemo kot

$$WI(G) \leq WI(T_{n,3}) - (n - 5).$$

Enakost velja natanko tedaj, ko je $G - u \cong T_{n-1,3}$ in je vozlišče u list grafa G , oziroma, ko je $G \cong T_{n,3}^*$. Če velja stroga neenakost, potem po relaciji (5.4) velja $WI(G) = WI(T_{n,3}) - (n - 4)$. Vendar, če je vozlišče u sosedno drugemu vozlišču v $G - u$, stopnja $d_G(u)$ postane manjša od njegove zgornje meje vsaj za dva. V tem primeru je $WI(G) \leq WI(T_{n,3}) - (n - 3)$, kar je v nasprotju s (5.4). Podobno, če je $G - u \not\cong T_{n-1,3}$, potem mora veljati $WI(G - u) = WI(T_{n-1,3}) - 1$, in po induktivni predpostavki $G - u$ pripada $\mathcal{T}_{n-1,3,1}$. V tem primeru razdalja od vozlišča u do drugega atlasa postane dve namesto tri. Tako stopnja $d_G(u)$ postane manjša kot njegova zgornja meja za najmanj ena. Tako zopet dobimo $WI(G) \leq WI(T_{n,3}) - (n - 3)$, kar je v nasprotju z (5.4).

Če je $4 \leq \Delta \leq n - 2$, potem je

$$-n(\Delta - 2) + (\Delta^2 - 4) \leq -n + \Delta$$

in iz (5.5) dobimo $WI(G) \leq WI(T_{n,\Delta}) - (n - \Delta)$, kar je v nasprotju z neenakostjo (5.4).

Po drugi strani, če je vozlišče u sosedno vozliščem na hrbtnici, potem naj bo d v grafu G razdalja od atlasa do najbližjega sosedu vozlišča u na hrbtnici. Potrebno je upoštevati, da je $0 \leq d \leq n - \Delta - 2$, ker vozlišče u ni nujno oddaljeni list. Sledi, da je njegova razdalja do atlasa enaka $d + 1$ in razdalja do sosedov atlasa, ki ne ležijo na hrbtnici, enaka $d + 2$, medtem ko je njegova razdalja od vozlišč na hrbtnici od 1 do $d + 1$ v smeri atlasa in od 1 do $n - \Delta - d$ proti oddaljenemu listu $G - u$. Tako je

$$\begin{aligned}
 d_G(u) &\leq (\Delta - 1)(d + 2) + [1 + 2 + \dots + (d + 1)] + [2 + 3 + \dots + (n - \Delta - d)] \\
 &= (\Delta - 1)(d + 2) + \frac{(d+1)(d+2)}{2} + \frac{(n-\Delta-d+2)(n-\Delta-d-1)}{2} \\
 &= d^2 - d(n - 2\Delta) + \left(\frac{n^2}{2} + \frac{\Delta^2}{2} - n\Delta + \frac{n}{2} + \frac{3\Delta}{2} - 2\right) \\
 &= f_{n,\Delta}(d).
 \end{aligned}$$

Meja $f_{n,\Delta}(d)$ je kvadratna funkcija spremenljivke d . Ker d pripada intervalu $[0, n - \Delta - 2]$, $f_{n,\Delta}(d)$, doseže maksimum pri $d = n - \Delta - 2$. Sledi, da je

$$\begin{aligned} \text{WI}(G) &\leq \text{WI}(G - u) + d_G(u) \\ &\leq \text{WI}(T_{n-1,\Delta}) + \frac{n^2 - \Delta^2 - 3n + 3\Delta}{2} + 2 \\ &= \text{WI}(T_{n,\Delta}) - \frac{(n-\Delta+1)(n+\Delta-2)}{2} + \frac{n^2 - \Delta^2 - 3n + 3\Delta}{2} + 2 \\ &= \text{WI}(T_{n,\Delta}) - (n - 3) \\ &\leq \text{WI}(T_{n,\Delta}) - (n - \Delta), \end{aligned}$$

kar pa je v nasprotju z (5.4) [67].

□

5.1 Wienerjev indeks posebne družine grafov

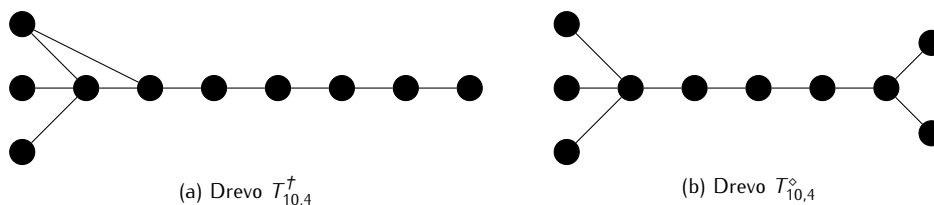
Naj bo $T_{n,\Delta}^\dagger$ graf dobljen iz grafa $T_{n,\Delta}$ tako, da povežemo dve sosednji atlasovi vozlišči, od katerih je eno vozlišče list in drugo leži na hrbtenici. Potem velja

$$\text{WI}(T_{n,\Delta}^\dagger) = \text{WI}(T_{n,\Delta}) - (n - \Delta).$$

Naj bo $T_{n,\Delta}^\circ$ graf dobljen iz grafa $T_{n-1,\Delta}$, tako da naredimo duplikat oddaljemu listu. Potem je

$$\text{WI}(T_{n,\Delta}^\circ) = \text{WI}(T_{n,\Delta}) - (n - 3).$$

Primer 5.2 Grafa $T_{10,4}^\dagger$ in $T_{10,4}^\circ$ sta prikazana na sliki 5.4.



Slika 5.4: Drevesi $T_{10,4}^\dagger$ in $T_{10,4}^\circ$.

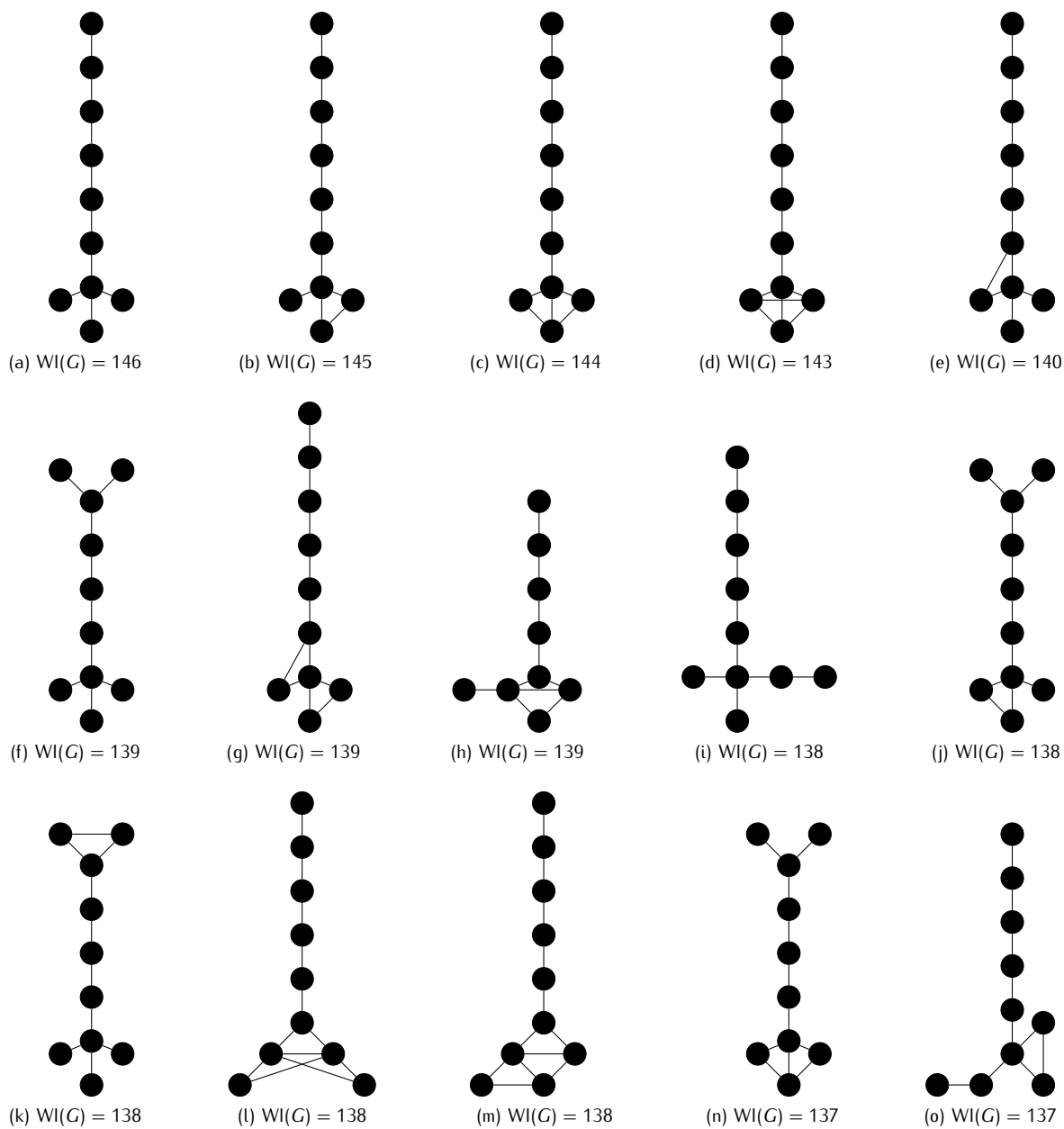
Na seznamu grafov iz $\mathcal{G}_{n,\Delta}$, ki je urejen po nenaraščajoči vrednosti Wienerjevega indeksa, bodo grafi iz $\mathcal{T}_{n,\Delta,m}$, $m < n - \Delta$ vedno prikazani prvi. Iz dokaza izreka 5.2 je očitno, da so grafi $T_{n,\Delta}^\dagger$, $T_{n,\Delta}^\circ$ in $T_{n,\Delta}^*$ visoko na seznamu. Slika 5.4 prikazuje prvih 24 grafov na takem seznamu za $(n, \Delta) = (10, 4)$.

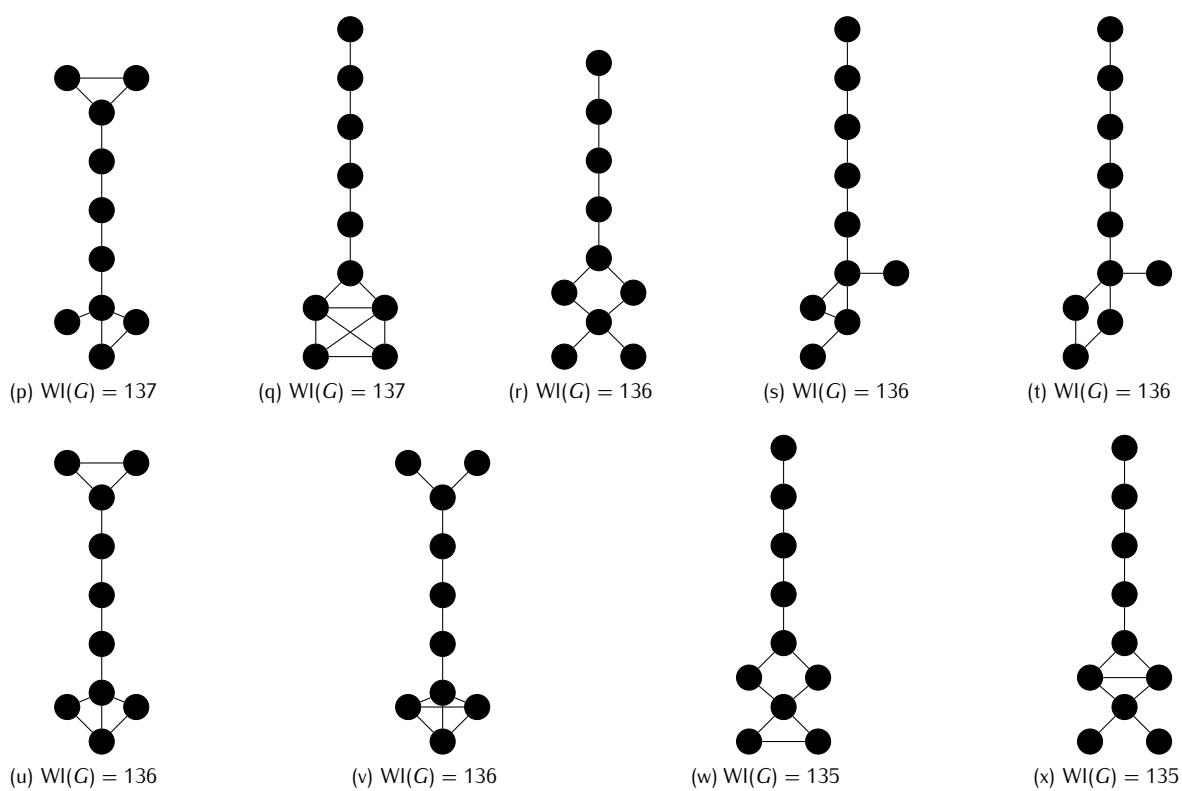
Kar najprej opazimo na sliki 5.4, je bolj ali manj splošna ugotovitev. Glede na določeno množico grafov je Wienerjev indeks večji pri grafih z večjim premerom. To ni v skladu z rezultati v prvem delu tega poglavja, ampak tudi z rezultati iz [25, 36, 35]: tako pri minimiziranju Wienerjevega indeksa pri drevesih z najvišjo stopnjo največ Δ kot pri maksimiranju Wienerjevega indeksa pri družini dreves samo dvema različnima stopnjama vozlišč. Ta načela izhajajo tudi iz starejših rezultatov, da imajo poti največji Wienerjev indeks med povezanimi grafi, medtem ko imajo popolni graf in zvezde najmanjši Wienerjev indeks med povezanimi grafi oziroma drevesi.

Poleg tega imajo grafi na sliki 5.4 nekaj podobnih lastnosti kot $T_{n,\Delta}$:

- njihov premer je zelo blizu zgornji meji iz leme 5.1, v vseh grafih je enak 6 ali 7;
- vozlišče stopnje Δ se nahaja blizu krajišča najdaljše poti, je na razdalji 1 ali 2 krajišč.

Število grafov v $\mathcal{G}_{n,\Delta}$ je veliko večje kot največji Wienerjev indeks, zato bo kar nekaj grafov imelo enak Wienerjev indeks. Da lažje sledimo spremembam Wienerjevega indeksa, lahko uporabimo mrežo grafov, v kateri so pozicionirani po nivojih glede na Wienerjev indeks, saj so grafi urejeni tako, da iz prvega grafa dobimo drug graf z majhno spremembo. Izreka 5.1 in 5.2 opisujeta vrh tega seznama. Blizu vrha seznama se bo Wienerjev indeks v večini primerov zmanjšal za ena, ko dodamo povezavo med listi, ki imajo skupnega sosedo. Nastale bodo pa tudi večje spremembe, zlasti pri nižjih vrsticah, ko grafi postanejo gostejši. Pri drevesih z najvišjo stopnjo največ Δ je dno seznama zelo dobro opisano v delih [25, 36, 35]. Vendar pa je karakterizacija grafov iz $\mathcal{G}_{n,\Delta}$, ki imajo najmanjši Wienerjev indeks, še vedno odprt problem.





Slika 5.4: Prvih 24 grafov z $n = 10$ vozlišči in najvišjo stopnjo $\Delta = 4$.

Literatura

- [1] A. Avihoo, D. Barash, *Prediction of small RNA conformational switching using fine-grain graph representations and the Wiener index*, V: *Fifth Haifa Workshop on Interdisciplinary Applications of Graph Theory, Combinatorics and Algorithms*, Haifa, Israel, 2005.
- [2] A. Avihoo, D. Barash, Shape similarity measures for the design of small RNA switches, *Journal of biomolecular structure & dynamics* **24** (2006), 17–24.
- [3] S. H. Bertz, *A mathematical model of complexity*. V: R. B. King (ed.), *Chemical applications of topology and graph theory*. Elsevier, Amsterdam, 1983, 206–221.
- [4] S. H. Bertz, C. Rücker, In search of simplification: the use of topological complexity indices to guide retrosynthetic analysis, *Croatica Chemica Acta* **77** (2004), 221–235.
- [5] S. H. Bertz, C. Zamfirescu, New complexity indices based on edge covers, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* **42** (2000), 39–70.
- [6] S. H. Bertz, T. J. Sommer, Rigorous mathematical approaches to strategic bonds and synthetic analysis based on conceptually simple new complexity indices, *Chemical Communications* (1997), 2409–2410.
- [7] S. H. Bertz, W. F. Wright, The graph theory approach to synthetic analysis: definition and application of molecular complexity and synthetic complexity, *Graph Theory Notes New York* **35** (1998), 32–48.
- [8] S. H. Bertz, The first general index of molecular complexity, *Journal of American Chemical Society* **103** (1981), 3599–3601.
- [9] S. H. Bertz, *Complexity of molecules and their synthesis*. V: D. Bonchev, D. H. Rouvray (eds.), *Complexity in Chemistry*, Taylor & Francis, London, 2003, 91–156.
- [10] S. H. Bertz, Convergence, molecular complexity and synthetic analysis. *Journal of American Chemical Society* **104** (1982), 5801–5803.

- [11] S. H. Bertz, On the complexity of graphs and molecules, *Bulletin of Mathematical Biophysics* **45** (1983), 849–855.
- [12] D. Bonchev, D. Kamenski, O. N. Temkin, Complexity index of the linear reaction mechanisms of chemical reactions, *Journal of Mathematical Chemistry* **1** (1987), 345–388.
- [13] D. Bonchev, G. A. Buck, From molecular to biological structure and back, *Journal of Chemical Information and Modeling* **47** (2007), 909–917.
- [14] D. Bonchev, N. Trinajstić, Information theory, distance matrix and molecular branching, *Journal of Chemical Physics* **67** (1977), 4517–4533.
- [15] D. Bonchev, N. Trinajstić, Overallmolecular descriptors. 3. Overall Zagreb indices, *SAR and QSAR in Environmental Research* **12** (2001), 213–236.
- [16] D. Bonchev, O. E. Polansky, *On the topological complexity of chemical systems. V: R. B. King, D. H. Rouvray (eds.), Graph Theory and Topology in Chemistry*, Elsevier, Amsterdam, 1987, 125–158.
- [17] D. Bonchev, W. A. Seitz, *The concept of complexity in chemistry. V: D.H. Rouvray (ed.), Concepts in chemistry: A contemporary challenge*, Research Studies Press, London, 1997, 353–381.
- [18] D. Bonchev, Novel indices for the topological complexity of molecules, *SAR and QSAR in Environmental Research* **7** (1997), 23–43.
- [19] D. Bonchev, *Problems of computing molecular complexity. V: D. H. Rouvray (ed.), Computational chemical graph theory*, Nova Science Publishers, New York, 1990, 33–63.
- [20] D. Bonchev, The overall Wiener index – a new tool for characterizing molecular topology, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **41** (2001), 582–592.
- [21] D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, *Spectra of graphs: theory and applications*, 3rd edition, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg, 1995.
- [22] S. M. Dancoff, H. Quastler, *The information content and error rate in living things. V: H. Quastler (ed.), Essays on the use of information theory in biology*, University of Illinois Press, Urbana, 1953.
- [23] A. A. Dobrynin, R. Entringer, I. Gutman, Wiener index of trees: theory and applications, *Acta Applicandae Mathematicae* **66** (2001), 211–249.
- [24] R. C. Entringer, D. E. Jackson, D. A. Snyder, Distance in graphs, *Czechoslovak Mathematical Journal* **26** (1976), 283–296.

- [25] M. Fischermann, A. Hoffmann, D. Rautenbach, L. Székely, L. Volkmann, Wiener index versus maximum degree in trees, *Discrete Applied Mathematics* **122** (2002), 127–137.
- [26] P. W. Fowler, Complexity, spanning trees and relative energies of fullerene isomers, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* **48** (2003), 87–96.
- [27] I. Gutman, B. Ruščić, N. Trinajstić, C. F. Wilcox, Graph theory and molecular orbitals. XII. Acyclic polyenes, *Journal of Chemical Physics* **62** (1975), 3399–3405.
- [28] I. Gutman, C. Rücker, G. Rücker, On walks in molecular graphs, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **41** (2001), 739–745.
- [29] I. Gutman, N. Trinajstić, Graph theory and molecular orbitals. III. Total π -electron energy of alternant hydrocarbons, *Chemical Physics Letters* **17** (1972), 535–538.
- [30] I. Gutman, R. B. Mallion, J. W. Essam, Counting spanning trees of a labelled molecular-graph, *Molecular Physics* **50** (1983), 859–877.
- [31] F. Harary, *Graph Theory*, 2nd printing, Addison-Wesley, Reading, MA, 1971.
- [32] D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *Topological complexity of molecules. V: R. A. Meyers (ed.), Encyclopedia of complexity and systems science*, Springer, New York, 2009, 9210–9224.
- [33] D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, D. Vukičević, Zagreb indices: extension to weighted graphs representing molecules containing heteroatoms, *Croatica Chemica Acta* **80** (2007), 541–545.
- [34] D. Janežič, B. Lučić, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, D. Vukičević, Hosoya matrices as the numerical realization of graphical matrices and derived structural descriptors, *Croatica Chemica Acta* **80** (2007), 271–276.
- [35] F. Jelen, E. Triesch, Superdominance order and distance of trees with bounded maximum degree, *Discrete Applied Mathematics* **125** (2003), 225–233.
- [36] F. Jelen, *Superdominance order and distance of trees*, Doctoral thesis, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Germany, 2002.
- [37] G. Karreman, Topological information content and chemical reactions, *Bulletin of Mathematical Biophysics* **17** (1955), 279–285.
- [38] M. Kunz, A Möbius inversion of the Ulam subgraphs conjecture, *Journal of Mathematical Chemistry* **9** (1992), 297–305.

- [39] M. Kunz, An equivalence relation between distance and coordinate matrices, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* **32** (1995), 193–203.
- [40] M. Kunz, On topological and geometrical distance matrices, *Journal of Mathematical Chemistry* **13** (1993), 145–151.
- [41] K. Kutnar, D. Marušič, D. Janežič, Fullerenes via their automorphism groups, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* **63** (2010), 267–282.
- [42] Z. Mihalič, N. Trinajstić, On the number of spanning trees in fullerenes, *Fullerene Science and Technology* **2** (1994), 89–95.
- [43] A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, Coding and ordering Kekulé structures, *Journal of Chemical Information and Modeling* **44** (2004), 415–421.
- [44] D. Minoli, Combinatorial graph complexity, *Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze fisiche, matematiche e naturali* **59** (1975), 651–661.
- [45] B. Mohar, *Laplacian matrices of graphs. V: A. Graovac (ed.), MATH/CHEM/COMP 1988: proceedings of an International Course and Conference on Interfaces between Mathematics, Chemistry, and Computer Science, Dubrovnik, Yugoslavia, 20–25 June 1988*, Elsevier, Amsterdam, 1989, 1–8.
- [46] H. L. Morgan, The generation of a unique machine description for chemical structures – A technique developed at Chemical Abstracts Service, *Journal of Chemical Documentation* **5** (1965), 107–113.
- [47] H. Morowitz, Some order-disorder considerations in living systems, *Bulletin of Mathematical Biophysics* **17** (1955), 81–86.
- [48] A. Mowshovitz, Entropy and the complexity of graphs: I. An index of the relative complexity of a graph, *Bulletin of Mathematical Biophysics* **30** (1968), 175–204.
- [49] S. Nikolić, I. M. Tolić, N. Trinajstić, I. Baučić, On the Zagreb indices as complexity indices, *Croatica Chemica Acta* **73** (2000), 909–921.
- [50] S. Nikolić, N. Trinajstić, A. Jurić, Z. Mihalič, G. Krilov, Complexity of some interesting (chemical) graphs, *Croatica Chemica Acta* **69** (1996), 883–897.
- [51] S. Nikolić, N. Trinajstić, I. M. Tolić, G. Rücker, C. Rücker, *On molecular complexity indices. V: D. Bonchev, D. H. Rouvray (eds.), Complexity in chemistry - introduction and fundamentals*, Taylor & Francis, London, 2003, 29–89.

- [52] S. M. Rajtmajer, A. Miličević, N. Trinajstić, M. Randić, D. Vukičević, On the complexity of Archimedean solids, *Journal of Mathematical Chemistry* **39** (2006), 119–132.
- [53] M. Randić, D. Plavšić, Characterization of molecular complexity, *International Journal of Quantum Chemistry* **91** (2003), 20–31.
- [54] M. Randić, D. Plavšić, On the concept of molecular complexity, *Croatica Chemica Acta* **75** (2002), 107–116.
- [55] M. Randić, On complexity of transitive graphs representing degenerate rearrangements, *Croatica Chemica Acta* **74** (2001), 683–705.
- [56] N. Rashevsky, Life, information theory and topology, *Bulletin of Mathematical Biophysics* **17** (1955), 229–235.
- [57] M. Razinger, Extended connectivity of chemical graphs, *Theoretica Chimica Acta* **61** (1982), 581–586.
- [58] D. H. Rouvray, *An introduction to complexity. V: D. Bonchev, D. H. Rouvray (eds.), Complexity in chemistry*, Taylor & Francis, London, 2003, 1–27.
- [59] D. H. Rouvray, *Are the concepts in chemistry all fuzzy, the concept of complexity in chemistry. V: D. H. Rouvray (ed.), Concepts in chemistry: A contemporary challenge*, Research Studies Press, London, 1997, 1–15.
- [60] G. Rücker, C. Rücker, Computer perception of constitutional (topological) symmetry: TOPSYM, a fast algorithm for partitioning atoms and pairwise relations among atoms into equivalence classes, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **30** (1990), 187–191.
- [61] G. Rücker, C. Rücker, Counts of all walks as atomic and molecular descriptors, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **33** (1993), 683–695.
- [62] G. Rücker, C. Rücker, Isocodal and isospectral points, edges and pairs in graphs and how to cope with them in computerized symmetry recognition, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **31** (1991), 422–427.
- [63] G. Rücker, C. Rücker, On finding non-isomorphic connected subgraphs and distinct molecular substructures, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **41** (2001), 314–320.
- [64] G. Rücker, C. Rücker, On using the adjacency matrix power method for perception of symmetry and for isomorphism testing of highly intricate graphs, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **31** (1991), 123–126.

- [65] G. Rucker, C. Rucker, Substructure, subgraph and walk counts as measures of the complexity of graphs and molecules, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **41** (2001), 1457–1462.
- [66] G. Rucker, C. Rucker, Walk counts, labyrinthicity and complexity of acyclic and cyclic graphs and molecules, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **40** (2000), 99–106.
- [67] D. Stevanović, Maximizing Wiener index of graphs with fixed maximum degree, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* **60** (2008), 71–83.
- [68] C. Shannon, W. Weaver, *Mathematical theory of communications*, University of Illinois Press, Urbana, 1949.
- [69] N. Trinajstić, D. Babić, S. Nikolić, D. Plavšić, D. Amić, Z. Mihalić, The Laplacian matrix in chemistry, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **34** (1994), 368–376.
- [70] N. Trinajstić, *Chemical graph theory*, CRC Press, Boca Raton, 1992.
- [71] R. Todeschini, V. Consonni, *Handbook of molecular descriptors*, Wiley, Weinheim, 2000, 300.
- [72] M. M. Waldrop, *Complexity: the emerging science at the edge of order and chaos*, 1st edition, Simon & Schuster, New York, 1993.
- [73] D. B. West, *Introduction to graph theory*, 2nd edition, Prentice Hall, Upper Saddle River, 2001.
- [74] H. Wiener, Structural determination of paraffin boiling points, *Journal of American Chemical Society* **69** (1947), 17–20.
- [75] H. Wiener, Correlation of heats of isomerization, and differences in heats of vaporization of isomers, among the paraffin hydrocarbons, *Journal of the American Chemical Society* **69** (1947), 2636–2638.