

UNIVERZA NA PRIMORSKEM
FAKULTETA ZA MATEMATIKO, NARAVOSLOVJE IN INFORMACIJSKE TEHNOLOGIJE

Matematične znanosti, 2. stopnja

Daliborko Šabić

Wienerjevemu indeksu podobni indeksi na grafih

Magistrsko delo

Mentor: prof. dr. Dragan Stevanović

Koper, 2012

Ključna dokumentacijska informacija

Ime in priimek: Daliborko Šabić
Naslov magistrskega dela: Wienerjevemu indeksu podobni indeksi na grafih
Kraj: Koper
Leto: 2012
Število listov: 71 Število slik: 32 Število tabel: 0
Število prilog: 0 Št. strani prilog: 0
Število referenc: 32
Mentor: prof. dr. Dragan Stevanović
UDK: 519.17(043.2)
Ključne besede: Wienerjev indeks, hiper-Wienerjev indeks, kvazi-Wienerjev indeks, Kirchhoffov indeks, Hararyjev indeks, Szegedov indeks, Clujev indeks, Schultz indeks, molekularni topološki indeks, Wienerjev indeks višjega reda, teorija grafov
Math. Subj. Class. (2000): 05C12, 05C05, 05C50, 92E10

Izvleček

Tema magistrskega dela je Wienerjev indeks in njemu podobni indeksi, ki temeljijo na razdaljah med točkami v grafu. Tako so poleg Wienerjevega indeksa predstavljeni kvazi-Wienerjev indeks, Schultzov indeks, hiper-Wienerjev indeks, Kirchhoffov indeks, Hararyjev indeks, Szegedov indeks, Clujev indeks in število sprehodov v grafu.

Key words documentation

Name and surname: Daliborko Šabić
Title of Master's degree: Wiener-like indices on graphs
Place: Koper
Year: 2012
Number of pages: 71 Number of figures: 32 Number of tables: 0
Number of additions: 0 Number of addition pages: 0
Number of references: 32
Advisor: prof. dr. Dragan Stevanović
UDC: 519.17(043.2)
Key words: Wiener index, hyper-Wiener index, quasi-Wiener index, Kirchhoff index, Harary index, Szeged index, Cluj index, Schultz index, molecular topological index, Wiener-type numbers of higher rank, graph theory
Math. Subj. Class. (2000): 05C12, 05C05, 05C50, 92E10

Abstract

The theme of the master work is about Wiener index and other indices based on distances between vertices in graph. In addition to Wiener index we also present quasi-Wiener index, Schultz index, hyper-Wiener index, Kirchhoff index, Harary index, Szeged index, Cluj index and Walk numbers.

Kazalo

1	Uvod	1
2	Osnove teorije grafov	3
3	Wienerjev indeks	11
4	Wienerjeva matrika in hiper-Wienerjev indeks	17
5	Kvazi-Wienerjev in Kirchhoffov indeks	26
6	Hararyjev indeks	33
7	Szegedov indeks	39
8	Clujev indeks	46
9	Število sprehodov: Wienerjevi tipi indeksov višjega reda	50
10	Schultzov indeks	56
	Literatura	63

Slike

2.1	Primer grafa.	3
2.2	Primeri grafov, ki niso enostavni.	4
2.3	Graf G	4
2.4	Primeri poti v grafu.	5
2.5	Primer cikla v grafu.	5
2.6	Primer povezanega in nepovezanega grafa.	6
2.7	Primer drevesa.	6
2.8	Najkrajši razdalji med u in v v grafu G	6
2.9	Graf molekule 2-metilbutan.	7
2.10	Stopnja točke $\deg(u)$ in $\deg(v)$ grafa G	8
2.11	2,2,4,6-tetrametilheptan	10
2.12	Naftalen	10
3.1	Vse razdalje grafa G na sliki 2.9.	12
3.2	Polna grafa in poti.	13
4.1	Vrednosti $N_{i,e}$ in $N_{j,e}$	17
4.2	Graf molekule 2,3-metilpentan.	18
4.3	Zvezdi S_7 in S_9	19
4.4	Množici $N_{i,p}$ in $N_{j,p}$	20
4.5	Graf molekule 2-metilpentan.	21
4.6	Zgornja meja hiper-Wienerjevega indeksa.	25
5.1	Graf molekule isobutan.	28
6.1	Graf molekule 2-metilbutan.	33

6.2	Graf molekule 4-etil-1,1-dimetilciklobutan.	34
6.3	Hararyjev indeks poti P_n predstavlja spodnjo mejo.	38
7.1	$N_{i,e} = 4$ in $N_{j,e} = 3$	39
7.2	Molekula etilbenzena in njen graf.	41
7.3	Polna bipartitna grafa.	41
7.4	$N_{i,p} = 4$ in $N_{j,p} = 3$	43
8.1	Graf etilbenzena.	46
9.1	Graf molekule 2-metilpropan.	51
10.1	Graf molekule 2,2,4-trimetilpentana oziroma izooktana.	56
10.2	Graf molekule butana.	61

"Credendo vides."

- Voyage of the Basset

Poglavje 1

Uvod

Dejstvo, da imajo molekule "strukturo", je znano že od sredine 19. stoletja. Od takrat je ena glavnih nalog kemije iskanje kemičnih in fizikalnih lastnosti substanc glede na molekularno strukturo. Leta 1947 je H. Wiener v članku "Structural determination of paraffin boiling points" [31] prvič prikazal relacijo med molekulami in teorijo grafov. V tem članku je avtor uporabil svoj indeks W_e za izračun vrelišča alkanov in sicer kot

$$\text{bp} = \alpha W_e + \beta P + \gamma,$$

kjer so α, β, γ konstante in P število parov točk na razdalji 3. Iz matematičnega vidika je najbolj zanimivo dejstvo, da je indeks W_e izračunan s pomočjo grafa, in sicer kot vsota vseh razdalj med dvema točkama v grafu oziroma

$$W_e = \sum_{u,v \in V} d_{uv},$$

kjer je V množica točk v enostavnem povezanem neusmerjenem grafu G , d_{uv} pa je najkrajša razdalja med točkama u in v . Kljub tako zanimivemu odkritju na tem področju dolgo časa ni bilo posebnega napredka. Po letu 1970 je sledil nenaden preobrat. Wienerjev indeks je pridobil na popularnosti, kar se tudi odraža na številu objavljenih člankov. Prav tako se je njegova popularnost odražala po letu 1990, ko se je pojavilo več drugih indeksov, ki so temeljili na razdaljah med točkami v grafu in so bili v tesni povezavi z W_e . Med njimi so se pojavili tudi:

leto	indeks	leto	indeks
1989	kvazi-Wienerjev indeks	1989	Schultzov indeks
1993	hiper-Wienerjev indeks	1993	Kirchhoffov indeks
1993	Hararyjev indeks	1994	Szegedov indeks
1996	Clujev indeks	1996	Število sprehodov

Vse naštete indekse bomo spoznali v naslednjih poglavjih.

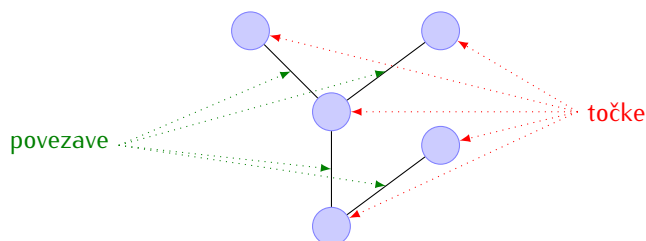
Poglavje 2

Osnove teorije grafov

Definicija 2.1 (Graf) Graf $G = (V, E)$ je matematičen objekt, ki je sestavljen iz dveh množic in sicer iz

- množice V , ki vsebuje točke, in
- množice E , ki vsebuje povezave.

Primer 2.1 Primer grafa lahko vidimo na sliki 2.1. Množica V vsebuje pet točk in množica E vsebuje štiri povezave.



Slika 2.1: Primer grafa.

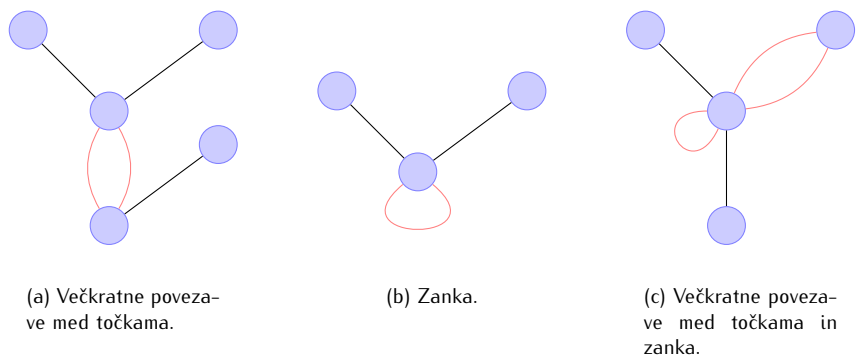
--

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

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

Primer 2.2 Na sliki 2.2 so primeri treh grafov, ki niso enostavni. Na sliki 2.3 je prikazan primer enostavnega grafa.

--

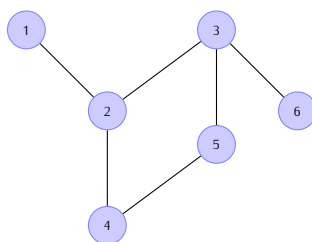


Slika 2.2: Primeri grafov, ki niso enostavni.

Definicija 2.3 (Sprehod) Naj bo $G = (V, E)$ graf. Sprehod w v grafu G je zaporedje povezav, kjer se naslednja povezava začne v tisti točki, kjer se je prejšnja povezava končala. Dolžina sprehoda je enaka številu povezav v sprehodu.

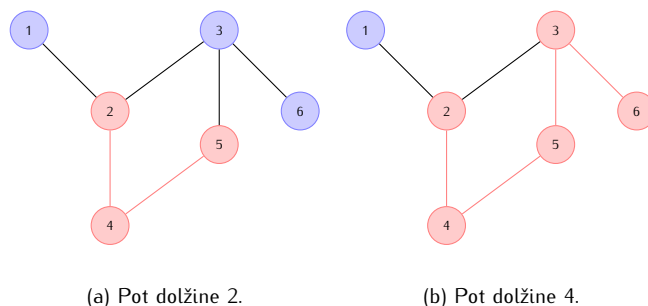
Definicija 2.4 (Sled in pot) Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo w sprehod v grafu G . Če se nobena povezava $e \in E$ v sprehodu w ne ponovi, potem je w enostaven sprehod ali sled. Če je w enostaven sprehod in se tudi nobena točka ne ponovi, potem je w pot.

Primer 2.3 Oštevilčimo graf G tako kot smo prikazali na sliki 2.3. Če z $e_{i,j} \in E$ označimo povezavo med točkama $i, j \in V$, potem zaporedje povezav $w = \{e_{2,3}, e_{2,4}, e_{4,5}, e_{3,5}, e_{2,3}, e_{1,2}\}$ predstavlja sprehod, ne pa tudi sled, ker se v zaporedju dvakrat pojavi povezava $e_{2,3}$. Sprehod $s = \{e_{1,2}, e_{2,4}, e_{4,5}, e_{3,5}, e_{2,3}\}$ je hkrati tudi sled, ker se nobena povezava ne ponovi.



Slika 2.3: Graf G .

Primer 2.4 Na sliki 2.4(a) je z rdečo barvo označena pot dolžine 2 in na sliki 2.4(b) pot dolžine 4. Seveda to nista edini poti v grafu.

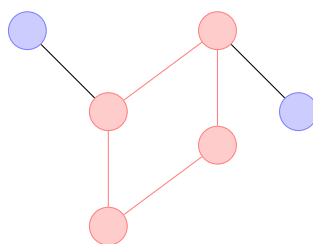


Slika 2.4: Primera poti v grafu.

Definicija 2.5 (Sklenjeni sprehod) Naj bo s poljuben sprehod v grafu $G = (V, E)$ in naj bosta $u, v \in V$ krajišči sprehoda s . Če velja $u = v$, potem je s sklenjeni sprehod.

Definicija 2.6 (Cikel) Naj bo p poljubna pot v grafu $G = (V, E)$ in naj bosta $u, v \in V$ krajišči poti p . Če velja $u = v$, potem je p cikel.

Primer 2.5 Na sliki 2.5 je cikel označen z rdečo barvo.



Slika 2.5: Primer cikla v grafu.

--

Definicija 2.7 (Povezan graf) Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bosta $u, v \in V$ poljubni točki. Če med vsako točko u in točko v obstaja pot, potem je graf povezan.

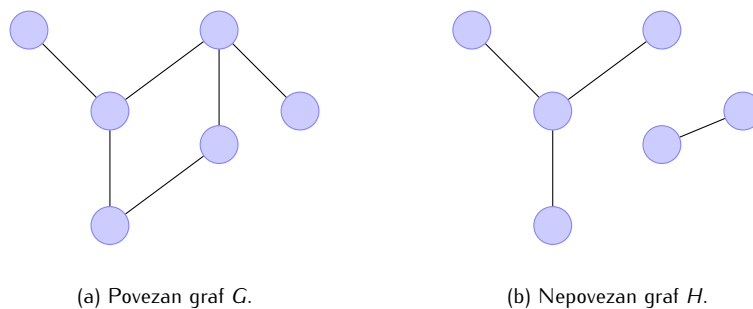
Primer 2.6 Primer povezanega in nepovezanega grafa lahko vidimo na sliki 2.6.

--

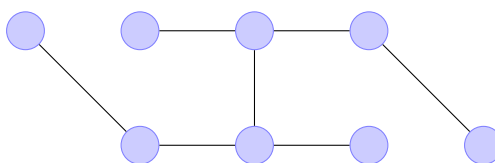
Definicija 2.8 (Drevo) Naj bo $G = (V, E)$ povezan graf. Graf G , ki ne vsebuje ciklov, je acikličen graf oziroma drevo.

Primer 2.7 Graf na sliki 2.7 je aciklični graf oziroma drevo.

--



Slika 2.6: Primer povezanega in nepovezanega grafa.

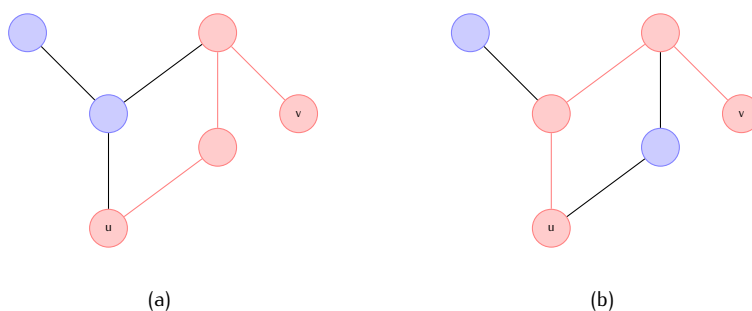


Slika 2.7: Primer drevesa.

Definicija 2.9 (Razdalja med dvema točkama) Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bosta $u, v \in V$ poljubni točki v grafu G . Razdalja med u in v je enaka dolžini najkrajše poti med tema dvema točkama v grafu G . Razdaljo med u in v označimo z $d_{u,v}$.

V grafu je lahko več različnih najkrajših poti med dvema točkama.

Primer 2.8 Na sliki 2.8 lahko vidimo, da za izbrani točki u in v obstajata dve najkrajši poti.



Slika 2.8: Najkrajši razdalji med u in v v grafu G .

--

V magistrskem delu smo se omejili samo na enostavne in povezane grafe. Zato mora biti bralec pozoren pri nadaljnem branju.

Do sedaj smo grafe predstavljali samo v vizualni obliki. Graf pa lahko predstavimo tudi v matrični obliki. Ena od takih predstavitev je matrika sosednosti, ki nam pove, kateri dve točki sta povezani.

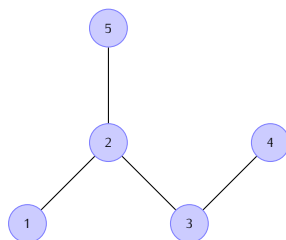
Definicija 2.10 (Matrika sosednosti) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bosta točki $v_i, v_j \in V$ za $i = 1, \dots, n$ in $j = 1, \dots, n$. Potem matriko A velikosti $n \times n$ imenujemo matrika sosednosti in vsak element matrike $[A]_{ij}$ je definiran kot

$$[A]_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{če obstaja povezava med } v_i \text{ in } v_j, \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Primer 2.9 Če vzamemo kot primer graf na sliki 2.9 in točke oštevilčimo od 1 do 5, je matrika sosednosti oblike

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

Seveda je položaj ničel in enic odvisen od označevanja točk, vendar število le teh ostaja vedno enako.



Slika 2.9: Graf molekule 2-metilbutan.

--

Podobno kot smo spoznali matriko sosednosti, predstavimo še matriko razdalj.

Definicija 2.11 (Matrika razdalj) Na bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bosta točki $v_i, v_j \in V$ definirani za $i = 1, \dots, n$ in $j = 1, \dots, n$. Potem matriko D velikosti $n \times n$ imenujemo matrika razdalj in vsak element matrike $[D]_{ij}$ zavzema sledečo vrednost

$$[D]_{ij} = \begin{cases} d_{ij}, & \text{dolžina najkrajše poti med } v_i \text{ in } v_j, \\ \infty, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Primer 2.10 Matrika razdalj D grafa prikazanega na sliki 2.9 je enaka

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

--

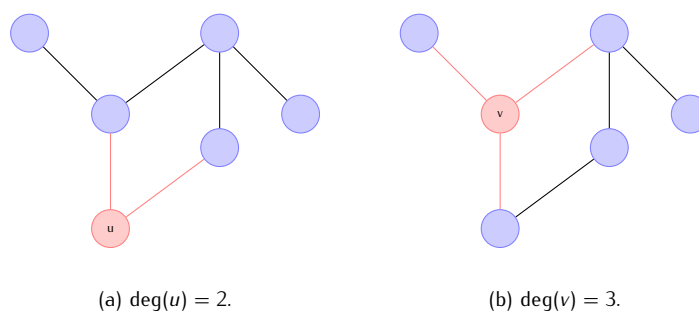
Definicija 2.12 (Stopnja točke in vektor stopenj) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Stopnja (valenca) točke $v \in V$ je število povezav $e \in E$, katerih krajišče je točka v . Stopnjo točke v označimo z $\deg(v)$.

Vektor stopenj S , je vektor, kjer je vsak element enak

$$[S]_i = \deg(v_i),$$

za vsako točko $v_i \in V$, $i = 1, \dots, n$.

Primer 2.11 V grafu G prikazanem na sliki 2.10(a) je točka u krajišče dveh povezavam. V drugem primeru 2.10(b) pa je točka v krajišče treh povezavam. Vektor stopenj S je v tem primeru



Slika 2.10: Stopnja točke $\deg(u)$ in $\deg(v)$ grafa G .

$$S = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 3 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Omenimo še eno vrsto predstavitve grafa s pomočjo matrike.

Definicija 2.13 (Laplaceva matrika) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bosta $v_i, v_j \in V$ za $i = 1, \dots, n$ in $j = 1, \dots, n$. Elementi Laplaceve matrike L , ki je velika $n \times n$, so definirani kot

$$[L]_{ij} = \begin{cases} \deg(v_i), & \text{če je } v_i = v_j, \\ -1, & \text{če je } v_i \text{ sosedna } v_j \text{ in } v_i \neq v_j, \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Primer 2.12 Laplaceva matrika grafa prikazanega na sliki 2.9 je

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

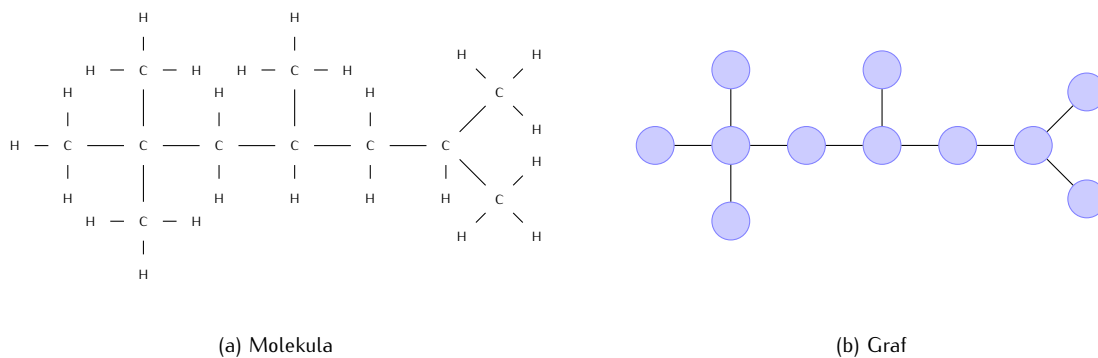
Ker imamo opravka s kemijski spojinami, predstavimo pojem molekularni graf.

Definicija 2.14 Molekularni graf je graf z "ena na ena" korespondenco glede na strukturo kemijske spojine in sicer tako, da vsaka točka v grafu predstavlja atom molekule in vsaka povezava med dvema točkama predstavlja eno ali več kemijskih vezi med dvema atomoma.

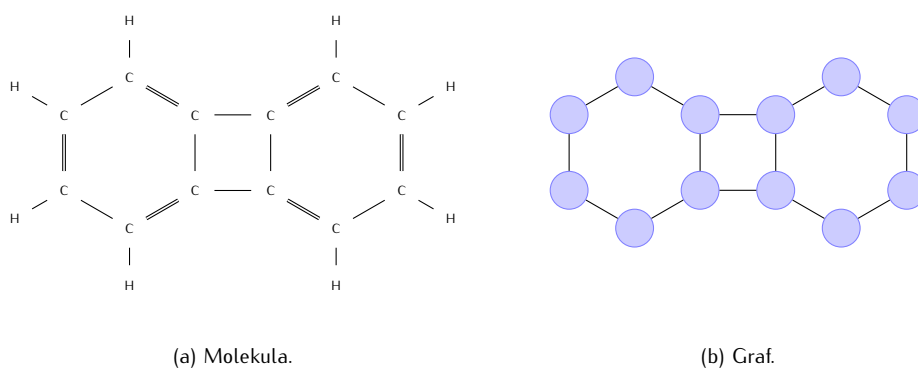
Definicija 2.15 (Topološki indeks) Topološki indeks je funkcija, ki molekularnemu grafu priredi število.

V magistrskem delu smo se omejili na molekularne grafe, kjer so atomi vodika (H) odstranjeni¹. Primer pretvorbe molekul v grafe lahko vidimo na sliki 2.11 in 2.12.

¹ang. hydrogen-depleted molecular graph



Slika 2.11: 2,2,4,6-tetrametilheptan



Slika 2.12: Naftalen

Poglavje 3

Wienerjev indeks

Leta 1947 je Henry Wiener opazil zelo dobro povezavo med vreliščem alkanov in vsoto vseh razdalj med točkami v molekularnem grafu alkana [31]. Na začetku je bil indeks definiran samo za drevesa in se je imenoval "path number".

Definicija 3.1 (Wienerjev indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo množica $\binom{V}{2}$ množica vseh neurejenih parov elementov iz množice V . Potem je Wienerjev indeks W_e grafa G definiran kot

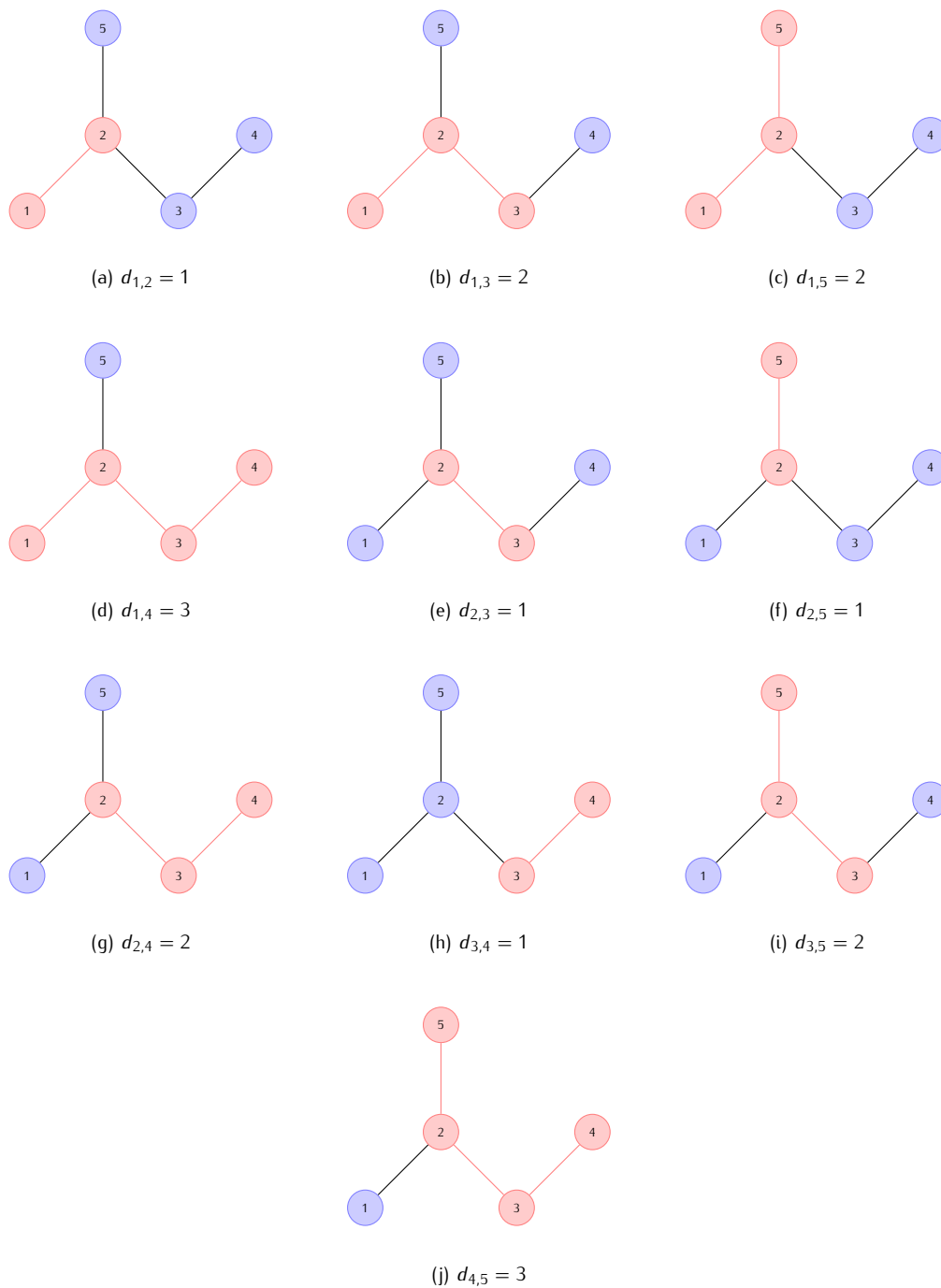
$$W_e = \sum_{u,v \in \binom{V}{2}} d_{u,v}.$$

Primer 3.1 Kot primer vzemimo graf na sliki 2.9. Na sliki 3.1 lahko vidimo, da ima graf

- 4 najkrajše poti dolžine 1 (slike 3.1(a), 3.1(e), 3.1(f), 3.1(h)),
- 4 najkrajše poti dolžine 2 (slike 3.1(b), 3.1(c), 3.1(g), 3.1(i)),
- 2 najkrajši poti dolžine 3 (slike 3.1(d), 3.1(j)).

Wienerjev indeks grafa G je

$$\begin{aligned} W_e &= d_{1,2} + d_{2,3} + d_{2,5} + d_{3,4} + d_{1,3} + d_{1,5} + d_{2,4} + d_{3,5} + d_{1,4} + d_{4,5} \\ &= 1 + 1 + 1 + 1 + 2 + 2 + 2 + 2 + 3 + 3 = 4 + 8 + 6 = 18. \end{aligned}$$



Slika 3.1: Vse razdalje grafa G na sliki 2.9.

Hosoya je razširil definicijo Wienerjevega indeksa in ga definiral kot polovico vsote elementov matrike razdalj D grafa G . Torej kot

$$W_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [D]_{ij}.$$

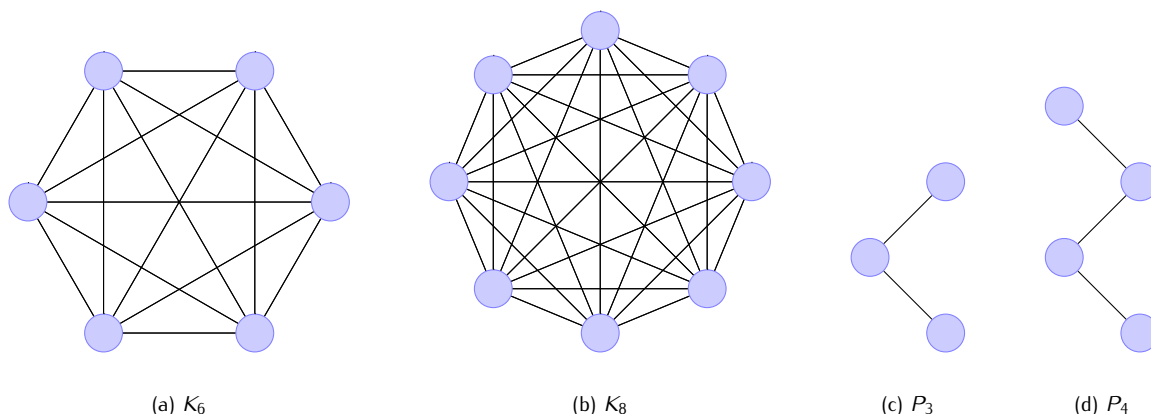
Za dokaz zgornje in spodnje meje moramo definirati pojma polni graf in graf poti.

Definicija 3.2 (Polni graf) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Grafu G pravimo, da je polni graf K_n , če obstaja med vsakim parom točk $u, v \in V$ povezava $e \in E$.

Definicija 3.3 (Pot) Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n točkami. Grafu G pravimo pot P_n , če je v grafu najdaljša razdalja enaka $n - 1$ in za vsak $v \in V$ velja $\deg(v) \leq 2$.

Hitro se lahko prepričamo, da polni graf K_n vsebuje $\frac{n(n-1)}{2}$ povezav in pot P_n vsebuje $n - 1$ povezav.

Primer 3.2 Primera polnih grafov K_6 in K_8 ter poti P_3 in P_4 vidimo na sliki 3.2.



Slika 3.2: Polna grafa in poti.

--

Trditev 3.1 Naj bo $K_n = (V, E)$ poln graf z n točkami. Wienerjev indeks W_e polnega grafa K_n je

$$W_e = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Dokaz. Ker so vse točke med seboj povezane, velja

$$W_e = \sum_{e \in E} d_e = \sum_{e \in E} 1 = \frac{n(n-1)}{2} \cdot 1 = \frac{n(n-1)}{2}.$$

■

Trditev 3.2 Naj bo $P_n = (V, E)$ pot z n točkami. Wienerjev indeks W_e poti P_n je

$$W_e = \frac{(n-1)n(n+1)}{6}.$$

Dokaz. Wienerjev indeks poti P_n je enak

$$W_e = \sum_{l=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{(n-1)-l+1} l,$$

kjer prva vsota predstavlja seštevek vseh povezav dolžine l in druga vsota predstavlja število vseh povezav dolžine k . Sledi, da je

$$\begin{aligned} W_e &= \sum_{l=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{(n-1)-l+1} l \\ &= \sum_{l=1}^{n-1} l(n-l) \\ &= \sum_{l=1}^{n-1} ln - \sum_{l=1}^{n-1} l^2 \\ &= n \cdot \frac{(n-1)n}{2} - \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} \\ &= n(n-1) \frac{3n-(2n-1)}{6} \\ &= \frac{(n-1)n(n+1)}{6}. \end{aligned}$$

■

Trditev 3.3 Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo $e \in E$ povezava grafa G . Naj bo graf $G' = (V, E \setminus \{e\})$ povezan graf. Označimo z W_e Wienerjev indeks grafa G in z $W_{e'}$ Wienerjev indeks grafa G' . Potem velja

$$W_e < W_{e'}.$$

Dokaz. Naj ima povezava e za krajišči točki $u, v \in V$. Za vsako najkrajšo pot med $x, y \in V$, ki vsebuje e velja, da je razdalja med x in y v G manjša od razdalje v G' . Ker je razdalja med u in v v grafu G manjša od razdalje v grafu G' , potem velja $W_e < W_{e'}$. ■

Zanimiva je tudi zgornja in spodnja meja Wienerjevega indeksa, ko poznamo število povezav v grafu.

Trditev 3.4 Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in m povezavami. Naj bo W_e Wienerjev indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$n(n-1) - m \leq W_e \leq \frac{n^3 + 5n - 6}{6} - m.$$

Dokaz. Da bi pokazali spodnjo mejo, moramo raziskati razdaljo med dvema točkama $u, v \in V$. Če sta u in v sosedni točki, potem je razdalja enaka $d_{uv} = 1$. V nasprotnem primeru je razdalja $d_{uv} \geq 2$. Ker imamo m povezav, to pomeni, da imamo natanko m neurejenih parov točk, ki so sosedne, in $\binom{n}{2} - m$ neurejenih parov točk, ki niso sosedne. Sledi, da je

$$m + 2 \left(\binom{n}{2} - m \right) = n(n-1) - m \leq W_e.$$

Zgornja meja se dokaže z indukcijo po n in $n-1 \leq m \leq \binom{n}{2}$. Za $n=2$ neenakost drži, ker je K_2 edini graf in Wienerjev indeks je $W_e(K_2) = 1 \leq \frac{8+10-6}{6} - 1 = 1$. Predpostavimo, da zgornja meja velja za vse povezane grafe z n točkami. Naj bo $T = (W, P)$ drevo z $n+1$ točkami in naj bo $v \in W$ list. Naj bo T' drevo dobljeno iz drevesa T brez točke v . Če z $d_{T,v}$ označimo vsoto $\sum_{u \in W} d_{u,v}$, iz tega sledi

$$\begin{aligned} W_e(T) &= W_e(T') + d_{T,v} \leq \frac{n^3+5n-6}{6} - (n-1) + \sum_{i=1}^n i \\ &= \frac{(n+1)^3+5(n+1)-6}{6} - n. \end{aligned}$$

Predpostavimo, da neenakost drži za vse povezane grafe z n točkami in $m \geq n-1$ povezavami. Vzemimo graf G z n točkami in $m+1$ povezavami. Ker graf G ni drevo, vsebuje tako povezavo e , kjer je graf $G' = (V, E \setminus \{e\})$ povezan graf. Po trditvi 3.3 velja $W_e(G) < W_e(G') - 1$. Ker predpostavka velja za G' , potem velja

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

■

Trditev 3.5 (Zgornja in spodnja meja) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo W_e Wienerjev indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$\frac{n(n-1)}{2} \leq W_e \leq \frac{(n-1)n(n+1)}{6}.$$

Dokaz. Spodnjo mejo dokažemo s pomočjo trditve 3.3. Če vse točke v grafu povežemo, bo Wienerjev indeks zagotovo najmanjši. Sledi, da je spodnja meja W_e enaka Wienerjevemu indeksu polnega grafa $W_e(K_n)$. Torej

$$W_e(K_n) = \frac{n(n-1)}{2} \leq W_e.$$

Zgornjo mejo izpeljemo s pomočjo trditve 3.4. Ker je v grafu $n - 1 \leq m$ povezav, potem velja

$$\begin{aligned}W_e &\leq \frac{n^3+5n-6}{6} - m \\ &\leq \frac{n^3+5n-6}{6} - (n-1) \\ &= \frac{n^3+5n-6}{6} - \frac{6n-6}{6} \\ &= \frac{n^3-n}{6} \\ &= \frac{(n-1)n(n+1)}{6}.\end{aligned}$$

Sledi, da je zgornja meja enaka Wienerjevemu indeksu poti $W_e(P_n)$.

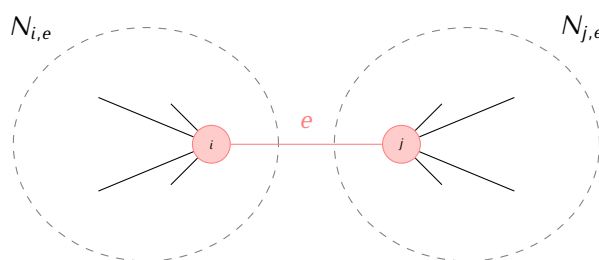
S tem smo dokazali, da velja $W_e(K_n) \leq W_e \leq W_e(P_n)$. ■

Poglavje 4

Wienerjeva matrika in hiper-Wienerjev indeks

Definicija 4.1 (Vrednost $N_{i,e}$) Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo. Naj bo $e \in E$ povezava in naj bosta $i, j \in V$ krajišči povezave e . Če iz grafa G odstranimo povezavo e , potem z $N_{i,e}$ označimo moč množice točk, ki so povezane z točko i , in z $N_{j,e}$ moč množice točk, ki so povezane s točko j .

Točki sta povezani, ko med njima obstaja sprehod (slika 4.1).

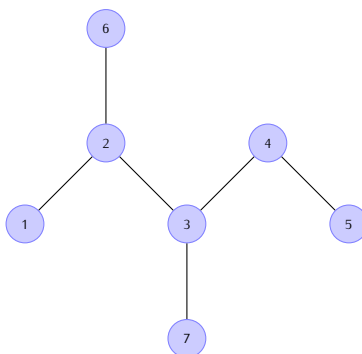


Slika 4.1: Vrednosti $N_{i,e}$ in $N_{j,e}$.

Ena od možnosti izračuna indeksa je s pomočjo števila poti, ki potekajo skozi določeno povezavo.

Trditev 4.1 (Wienerjev indeks) Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo in naj bo $e \in E$ povezava, katere krajišči sta $i, j \in V$. Potem je Wienerjev indeks enak

$$W_e = \sum_{e \in E} (N_{i,e} \cdot N_{j,e}).$$



Slika 4.2: Graf molekule 2,3-metilpentan.

Dokaz. Ker je G drevo, potem med poljubnima dvema točkama iz V obstaja enolično določena pot. Tako lahko za vsako povezavo e izračunamo število poti, ki potekajo skozi povezavo in sicer kot $N_{i,e} \cdot N_{j,e}$. Torej vsota število poti, ki potekajo skozi določeno povezavo, mora biti Wienerjev indeks W_e . ■

Definicija 4.2 (Wienerjeva matrika) Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo z n točkami. Potem so elementi Wienerjeve matrike M_{W_e} velikosti $n \times n$ enaki

$$[M_{W_e}]_{ij} = \begin{cases} N_{i,e} \cdot N_{j,e}, & \text{če sta točki } i \text{ in } j \text{ sosedni in } i \neq j, \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Tako lahko Wienerjev indeks W_e izračunamo tudi s pomočjo Wienerjeve matrike M_{W_e} in sicer kot

$$W_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{W_e}]_{ij}. \quad (4.1)$$

Primer 4.1 Izračunajmo Wienerjev indeks za graf prikazan na sliki 4.2. Najprej izračunajmo Wienerjevo matriko M_{W_e}

$$M_{W_e} = \begin{bmatrix} 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 12 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 12 & 0 & 10 & 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 10 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

in nato Wienerjev indeks po formuli 4.1

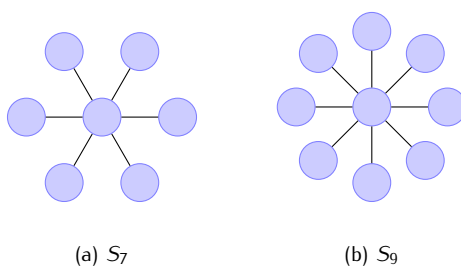
$$W_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^7 \sum_{j=1}^7 [M_{W_e}]_{ij} = 46. \quad (4.2)$$

--

Da bi pokazali zgornjo in spodnjo mejo Wienerjevega indeksa za drevesa, potrebujemo sledečo definicijo.

Definicija 4.3 (Zvezda) Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n točkami. Grafu G rečemo zvezda S_n , če je v grafu najdaljša razdalja med točkama enaka 2.

Primer 4.2 Primera zvezd S_7 in S_9 vidimo na sliki 4.3.



Slika 4.3: Zvezdi S_7 in S_9 .

--

Trditev 4.2 Naj bo $S_n = (V, E)$ zvezda z n točkami. Wienerjev indeks W_e zvezde S_n je

$$W_e = (n - 1)^2.$$

Dokaz. Wienerjev indeks zvezde S_n je

$$\begin{aligned} W_e &= \sum_{e \in E} (N_{i,e} \cdot N_{i,e}) \\ &= \sum_{e \in E} (1 \cdot (n - 1)) \\ &= (n - 1) (1 \cdot (n - 1)) \\ &= (n - 1)^2. \end{aligned}$$

■

Trditev 4.3 (Zgornja in spodnja meja) Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n točkami in naj bo W_e Wienerjev indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$(n - 1)^2 \leq W_e \leq \frac{(n - 1)n(n + 1)}{6}.$$

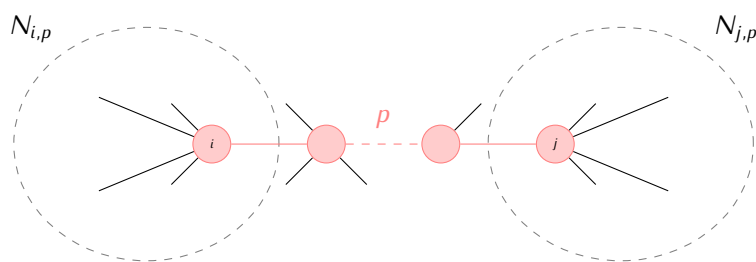
Dokaz. Dokaz za zgornjo mejo smo že dokazali v trditvi 3.5. Ostane nam, da dokažemo še trditev za spodnjo mejo. Ker je v grafu $n - 1 = m$ povezav, potem po trditvi 3.4 velja

$$\begin{aligned} W_e &\geq n(n - 1) - m \\ &= n(n - 1) - (n - 1) \\ &= (n - 1)^2 = W_e(S_n). \end{aligned}$$

S tem smo dokazali, da velja $W_e(S_n) \leq W_e \leq W_e(P_n)$. ■

Definicija 4.4 (Vrednost $N_{i,p}$) Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo in naj bo p pot v grafu G , ki ima za krajišči točki $i, j \in V$. Odstranimo pot p iz grafa G tako, da odstranimo vse točke poti p razen krajišč ter povezave, ki so povezane z odstranjenimi točkami. Potem z $N_{i,p}$ označimo množico točk, ki so povezane s točko i , in z $N_{j,p}$ množico točk, ki so povezane s točko j .

Množici sta bolj nazorno prikazani na sliki 4.4.



Slika 4.4: Množici $N_{i,p}$ in $N_{j,p}$.

Definicija 4.5 (Hiper-Wienerjev indeks) Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo z n točkami. Naj bo p najkrajša pot v drevesu G in naj bosta $i, j \in V$ krajišči poti p . Potem je hiper-Wienerjev indeks enak

$$W_p = \sum_{p \in G} (N_{i,p} \cdot N_{j,p}).$$

Definicija 4.6 (Hiper-Wienerjeva matrika) Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo z n točkami. Potem so elementi

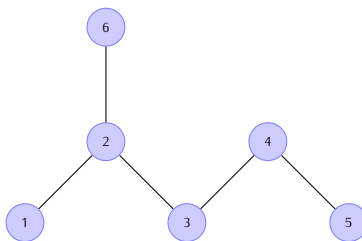
hiper-Wienerjeve matrike M_{W_p} velikosti $n \times n$ enaka

$$[M_{W_p}]_{ij} = \begin{cases} N_{i,p} \cdot N_{j,p}, & \text{če sta točki } i \text{ in } j \text{ krajišči poti } p \text{ in } i \neq j, \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Tako lahko hiper-Wienerjev indeks W_p izračunamo tudi s pomočjo hiper-Wienerjeve matrike M_{W_p} in sicer kot

$$W_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{W_p}]_{ij}. \quad (4.3)$$

Primer 4.3 Kot primer vzemimo graf na sliki 4.5. Hiper-Wienerjeva matrika M_{W_p} za graf je



Slika 4.5: Graf molekule 2-metilpentan.

$$M_{W_p} = \begin{bmatrix} 0 & 5 & 3 & 2 & 1 & 1 \\ 5 & 0 & 9 & 6 & 3 & 5 \\ 3 & 9 & 0 & 8 & 4 & 3 \\ 2 & 6 & 8 & 0 & 5 & 2 \\ 1 & 3 & 4 & 5 & 0 & 1 \\ 1 & 5 & 3 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

in hiper-Wienerjev indeks je enak

$$W_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 [M_{W_p}]_{ij} = 58.$$

--

Randić, Klein, Lukovits in Gutman so v članku [18, 27] pokazali, da obstaja relacija med W_e in W_p .

Trditev 4.4 Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n točkami in naj bodo W_p hiper-Wienerjev indeks, W_e Wienerjev

indeks in D matrika razdalj grafa G . Potem velja

$$W_p = \frac{D^+ + W_e}{2},$$

kjer je $D^+ = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i}^n [D]_{ij}^2$.

Dokaz. Zmnožek v formuli (4.3)

$$N_{i,p} \cdot N_{j,p} = t_p$$

predstavlja število poti p' , ki vsebujejo pot p (t.j. $p \subseteq p'$). Za vsak p' dolžine k obstaja $k = m + 1$ notranjih poti p dolžine m . Skupaj je $k + (k - 1) + \dots + 1 = \frac{k(k+1)}{2} = t'_p$ notranjih poti dolžine krajše ali enake k . Ker je poljubna pot v drevesu enolično določena s krajiščema i in j , lahko pot p predstavimo kot p_{ij} oziroma ij . Tako lahko formulo (4.3) zapišemo kot

$$W_p = \sum_{i < j} t_{ij}. \quad (4.4)$$

Podobno velja tudi $t'_{p'} = t'_{ij}$, kjer je

$$t'_{ij} = \frac{d_{ij}(d_{ij} + 1)}{2}. \quad (4.5)$$

Hitro lahko vidimo, da velja

$$\sum_{ij} t_{ij} = \sum_{ij} t'_{ij}, \quad (4.6)$$

ker se vsaka zunanja pot p' dolžine d_{ij} pojavi $\frac{d_{ij}(d_{ij}+1)}{2}$ krat. Zato sta vsoti vseh notranjih in zunanjih poti enaki. Iz enačb (4.4), (4.5) in (4.6) sledi, da je

$$W_p = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \frac{d_{ij}(d_{ij} + 1)}{2} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (d_{ij}^2 + d_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n d_{ij}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n d_{ij}. \quad (4.7)$$

Prvi člen vsote predstavlja nenormalizirani sekundarni moment razdalje D^+ in drugi člen predstavlja Wienerjev indeks W_e . O D^+ si bralec lahko prebere več v članku [18]. Tako lahko formulo zapišemo kot

$$W_p = \frac{D^+ + W_e}{2}.$$

■

Za dokaz trdive o zgornji in spodnji meji potrebujemo naslednji trditvi.

Trditev 4.5 Naj bo $S_n = (V, E)$ zvezda z n točkami. Hiper-Wienerjev indeks W_p grafa S_n je

$$W_p = \frac{(n-1)(3n-4)}{2}.$$

Dokaz. Prvi člen v enačbi predstavlja vse poti od "centra" zvezde do preostalih točk. Drugi člen pa predstavlja vse poti dolžine 2 med poljubnima dvema točkama iz V .

$$\begin{aligned} W_p &= \sum_{i=1}^{n-1} (1 \cdot (n-1)) + \sum_{i=1}^{n-2} \sum_{j=i+1}^{n-1} (1 \cdot 1) \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} (n-1) + \sum_{i=1}^{n-2} (n-1-i) \\ &= (n-1)^2 + (n-2)(n-1) - \frac{(n-2)(n-1)}{2} \\ &= (n-1)^{\frac{2(n-1)+(n-2)}{2}} \\ &= \frac{(n-1)(3n-4)}{2}. \end{aligned}$$

■

Trditev 4.6 Naj bo $P_n = (V, E)$ pot z n točkami. Hiper-Wienerjev indeks W_p grafa P_n je

$$W_p = \frac{(n-1)n(n+1)(n+2)}{24}.$$

Dokaz. Dokaz je direkten, t.j.

$$\begin{aligned} W_p &= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{l=1}^{n-i} i \cdot (n-i-(l-1)) \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} \frac{i^3 - 2i^2n - i^2 + in^2 + in}{2} \\ &= \frac{(n-1)n(n+1)(n+2)}{24}. \end{aligned}$$

■

Trditev 4.7 (Zgornja in spodnja meja) Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n točkami in naj bo W_p hiper-Wienerjev indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$\frac{(n-1)(3n-4)}{2} \leq W_p \leq \frac{(n-1)n((n+1)(n+2))}{24}.$$

Dokaz. Najprej dokažimo spodnjo mejo. Naj bo m število povezav v grafu in naj bo hiper-Wienerjev indeks definiran tako kot je v trditvi 4.4. V grafu G je natanko m parov točk med katerimi je razdalja 1.

Vsi preostali $\frac{n(n-1)}{2} - m$ pari pa imajo razdaljo večjo od 1. Sledi, da velja

$$W_e \geq m \cdot 1 + \left(\frac{n(n-1)}{2} - m \right) \cdot 2 \quad \text{in} \quad D^+ \geq m \cdot 1^2 + \left(\frac{n(n-1)}{2} - m \right) \cdot 2^2.$$

Če vstavimo podatke v originalno formulo in pri tem upoštevamo $m = n - 1$, dobimo

$$\begin{aligned} W_p &= \frac{D^+ + W_e}{2} \geq \frac{(m \cdot 1 + (\frac{n(n-1)}{2} - m) \cdot 2) + (m \cdot 1^2 + (\frac{n(n-1)}{2} - m) \cdot 2^2)}{2} \\ &= \frac{2 \cdot m + (\frac{n(n-1)}{2} - m) \cdot 2 \cdot 3}{2} \\ &= m + 3 \left(\frac{n(n-1)}{2} - m \right) \\ &= \frac{3n(n-1)}{2} - 2m \\ &= \frac{3n(n-1)}{2} - 2(n-1) \\ &= (n-1) \frac{3n-4}{2} \\ &= \frac{(n-1)(3n-4)}{2} = W_p(S_n) \end{aligned}$$

Sedaj pa dokažimo zgornjo mejo. Naj bo F graf z vsaj dvema točkama in r točka grafa F . Naj bosta a in b celi števili za kateri velja $0 \leq a \leq b$. V dokazu uporabimo razdalje med točkami v različnih grafih. Vpeljemo oznako $^R d_{i,j}$, ki predstavlja razdaljo med točko i in točko j v grafu R . Oznako R nadomestimo s primerno oznako grafa. Ustvarimo graf H tako, da točko r povežemo s krajiščem poti P_{a+1} in P_b . Označimo drugo krajišče poti P_{a+1} z x , tako kot je prikazano na sliki 4.6(a). Ustvarimo graf H' tako, da točko r povežemo s krajiščem poti P_a in P_{b+1} . Tokrat označimo drugo krajišče poti P_{b+1} z x , tako kot je prikazano na sliki 4.6(b). Vse poti v razliki $Sz_e(H') - Sz_e(H)$, razen tistih, ki vsebujejo točko x , se izključujejo. Poti med točko x in preostalimi točkami v drugi veji so enake in se izključujejo. Edino kar ostane so poti z enim krajiščem x in z drugim krajiščem y v grafu F brez točke r . Razliko lahko zapišemo kot

$$W_p(H') - W_p(H) = \frac{1}{2} \left(\sum {}^{H'} d_{x,y}^2 + \sum {}^{H'} d_{x,y} \right) - \frac{1}{2} \left(\sum {}^H d_{x,y}^2 + \sum {}^H d_{x,y} \right)$$

kjer gre vsota čez vse točke v grafu $F - r$. Za te točke velja

$$\begin{aligned} \sum {}^{H'} d_{x,y} &= {}^G d_{r,y} + b + 1 \\ \sum {}^H d_{x,y} &= {}^G d_{r,y} + a + 1 \end{aligned}$$

Če podatke vstavimo v razliko, dobimo

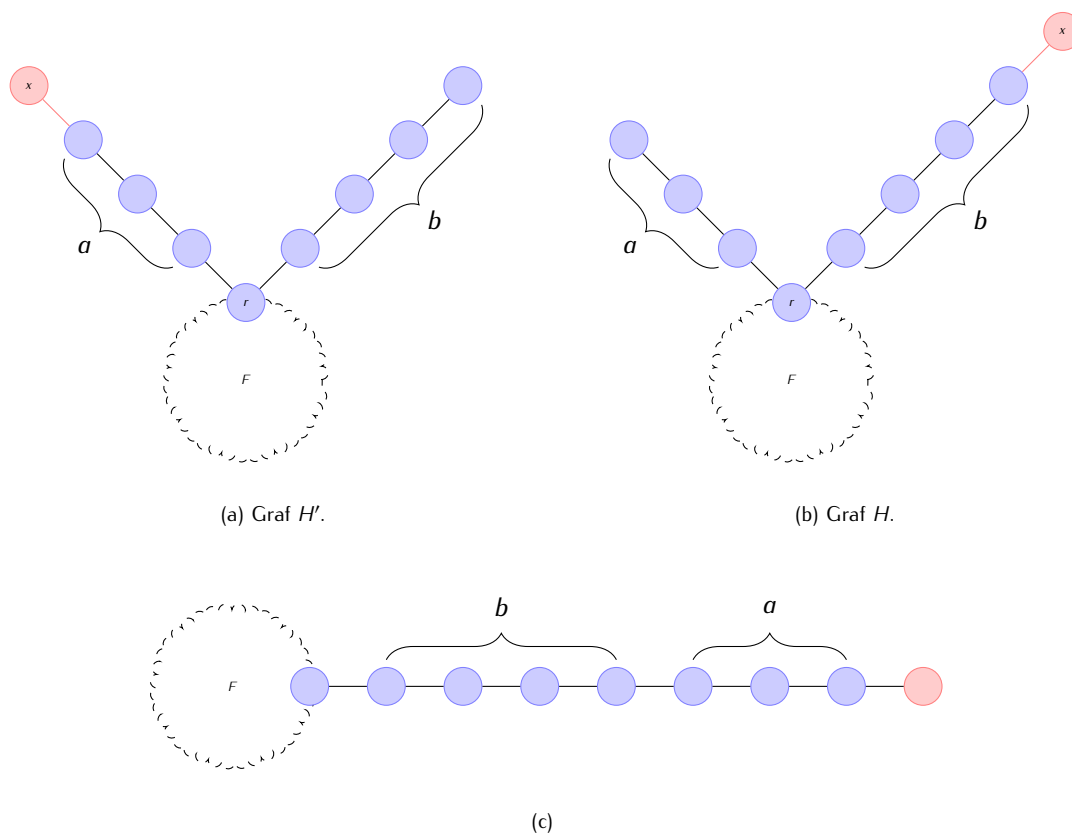
$$W_p(H') - W_p(H) = \frac{1}{2} (b - a) \sum_y (2 \cdot {}^G d_{r,y}^2 + a + b + 3)$$

Ker je vsak člen v vsoti pozitiven, je vsota tudi pozitivna in ker je $b > a$, je tudi razlika $b - a$ pozitivna. Iz tega sledi, da je

$$W_p(H') > W_p(H).$$

To pomeni, če premaknemo točko s krajše veje na daljšo vejo, se bo hiper-Wienerjev indeks povečal. Z večkratnim premikanjem točk iz ene na drugo vejo, dobimo na koncu pot P_n , ki predstavlja zgornjo mejo za hiper-Wienerjev indeks.

S tem smo dokazali, da je hiper-Wienerjev indeks med $W_p(S_n) \leq W_p \leq W_p(P_n)$. ■



Slika 4.6: Zgornja meja hiper-Wienerjevega indeksa.

Poglavje 5

Kvazi-Wienerjev in Kirchhoffov indeks

Definicija 5.1 (Kvazi-Wienerjev indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo L Laplaceova matrika grafa G in $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ lastne vrednosti matrike L . Kvazi-Wienerjev indeks qW je enak

$${}^qW = n \sum_{i=2}^n \frac{1}{\lambda_i}. \quad (5.1)$$

Ne smemo pozabiti, da je λ_1 vedno enak 0.

Mohar, Babić in Trinajstić so v članku [21] pokazali sledečo relacijo za drevesa.

Trditev 5.1 Naj bo $G = (V, E)$ drevo z n točkami. Naj bo qW kvazi-Wienerjev indeks in W_e Wienerjev indeks za drevo G . Potem velja

$${}^qW = W_e.$$

Dokaz. Označimo z L Laplaceovo matriko grafa G in naj bo

$$p_L(x) = x^n + c_{n-1}x^{n-1} + \dots + c_1x + c_0$$

karakteristični polinom matrike L (glej knjigo [3]). Sledi, da so ničle polinoma $p_L(x)$ enake $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$, kjer je $\lambda_1 = 0$. Po Vietovi formuli obstaja relacija med ničlami in koeficienti poljubnega polinoma in sicer kot

$$s_i = (-1)^i \frac{c_{n-i}}{c_n} \quad \text{za } i = 1, \dots, n,$$

kjer s_i predstavlja vsoto vseh zmnožkov $(n - i)$ -teric sestavljenih iz ničel polinoma.

Najprej razvijemo vsoto v kvazi-Wienerjevemu indeksu

$$\sum_{i=2}^n \frac{1}{\lambda_i} = \frac{\lambda_2 \lambda_3 \cdots \lambda_n + \lambda_2 \lambda_4 \cdots \lambda_n + \cdots + \lambda_2 \lambda_3 \cdots \lambda_{n-1}}{\lambda_2 \lambda_3 \cdots \lambda_n}$$

S pomočjo Vietove formule lahko zgornjo vsoto zapišemo kot

$$\sum_{i=2}^n \frac{1}{\lambda_i} = -\frac{c_2}{c_1}.$$

Prav tako obstaja relacija med koeficienti in strukturo podgrafov (glej knjigo [3])

$$c_i = (-1)^{n-i} \sum_{F_i} \gamma(F_i),$$

kjer F_i predstavlja število vpetih dreves grafa G s k komponentami T_i , pri čemer vsaka komponenta vsebuje n_i točk in $\gamma(F_i) = n_1 n_2 \cdots n_i$. Iz tega sledi, da je

$$c_1 = (-1)^{n-1} n$$

in

$$c_2 = (-1)^{n-2} \sum_{e \in E} N_{i,e} N_{j,e},$$

kjer sta $i, j \in V$ krajišči povezave e . Vrednosti c_1 in c_2 vstavimo nazaj v formulo in dobimo

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^n \frac{1}{\lambda_i} &= -\frac{c_2}{c_1} \\ \sum_{i=2}^n \frac{1}{\lambda_i} &= -\frac{(-1)^{n-2} \sum_{e \in E} N_{i,e} N_{j,e}}{(-1)^{n-1} n} \\ n \sum_{i=2}^n \frac{1}{\lambda_i} &= \sum_{e \in E} N_{i,e} N_{j,e} \\ {}^q W &= W_e. \end{aligned}$$

■

Primer 5.1 Laplaceova matrika L za graf prikazan na sliki 5.1 je enaka

$$L = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Lastne vrednosti matrice L so $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 1$, $\lambda_3 = 1$ ter $\lambda_4 = 4$. Po formuli 5.1 je kvazi-Wienerjev indeks enak

$$\begin{aligned} {}^qW &= n \sum_{i=2}^n \frac{1}{\lambda_i} \\ &= 4 \left(\frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{\lambda_3} + \frac{1}{\lambda_4} \right) \\ &= 4 \left(\frac{1}{1} + \frac{1}{1} + \frac{1}{4} \right) \\ &= 4 \frac{4+4+1}{4} \\ &= 9. \end{aligned}$$

--

Klein in Randić [20] sta raziskovala "upor" na razdalji med točkami v grafu, nekako tako, kot bi iskali upor med točkami v električnem omrežju. Vsota vseh uporov na razdalji med točkami je topološki indeks, ki so ga s časom poimenovali Kirchhoffov indeks.

Da bi defnirali Kirchhoffov indeks moramo najprej definirati Moore-Penrosov psevdoinverz [2, 23, 24].

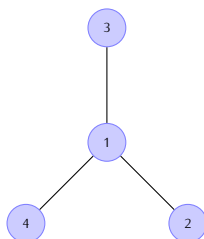
Definicija 5.2 (Moore-Penrosov psevdoinverz) Naj bo M matrika velikosti $n \times m$. Potem je matrika M^+ Moore-Penrosov psevdoinverz matrice M , velikosti $m \times n$, če zadošča naslednjim pogojem:

- $MM^+M = M$,
- $M^+MM^+ = M^+$,
- $(MM^+)^T = MM^+$,
- $(M^+M)^T = M^+M$.

Matrika M^+ je enolično določena [12].

Definicija 5.3 (Kirchhoffov indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo L Laplaceova matrika grafa G in naj bo L^+ Moore-Penrosov psevdoinverz matrice L . Kirchhoffov indeks je definiran kot

$$Kf = n \operatorname{tr}(L^+). \tag{5.2}$$



Slika 5.1: Graf molekule isobutan.

Primer 5.2 Kot primer vzemimo graf na sliki 5.1. V tem primeru smo pokazali, da je Laplaceova matrika za graf enaka

$$L = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Moore-Penrosov psevdoinverz Laplaceve matrike L je

$$L^+ = \begin{bmatrix} \frac{3}{16} & -\frac{1}{16} & -\frac{1}{16} & -\frac{1}{16} \\ -\frac{1}{16} & \frac{11}{16} & -\frac{5}{16} & -\frac{5}{16} \\ -\frac{1}{16} & -\frac{5}{16} & \frac{11}{16} & -\frac{5}{16} \\ -\frac{1}{16} & -\frac{5}{16} & -\frac{5}{16} & \frac{11}{16} \end{bmatrix}.$$

Po formuli 5.2 je Kirchhoffov indeks enak

$$\begin{aligned} \text{Kf} &= n \operatorname{tr}(L^+) \\ &= 4 \left(\frac{3}{16} + 3 \cdot \frac{11}{16} \right) \\ &= 4 \cdot \frac{36}{16} \\ &= 9. \end{aligned}$$

--

Trditev 5.2 Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo qW kvazi-Wienerjev indeks in naj bo Kf Kirchhoffov indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$${}^qW = \text{Kf}.$$

Dokaz. Naj bo L Laplaceova matrika grafa G . Naj bodo $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ lastne vrednosti in e, x_2, \dots, x_n pripadajoči lastni vektorji matrike L . Spomnimo se, da je $\lambda_1 = 0$ in e je njegov lastni vektor.

Naj bo L^+ psevdoinverz matrike L . Ker je L simetrična kvadratna matrika, potem je LL^+ ortogonalni projektor za vektorski prostor $\{x_2, \dots, x_n\}$, saj je $(LL^+)e = (L^+L)e = 0$ in $(LL^+)x_i = (L^+L)x_i = x_i$ za $i = 2, \dots, n$. Hitro se lahko prepričamo, da je

$$LL^+ = I - ee^T,$$

kjer je I identična matirka velikosti $n \times n$. Velja

$$(I - ee^T) e = Ie - (ee^T) e = e - e(e^T e) = e - e1 = 0$$

in

$$(I - ee^T) y = Iy - (ee^T) y = y - e(e^T y) = y - e0 = y.$$

Naj bo $U = [x_2 \ x_3 \ \dots \ x_n \ e]$ unitarna matrika, ki diagonalizira L . Potem velja

$$UU^T = U^T U = I$$

in lahko zapišemo

$$U^T L U = \Lambda.$$

Matriko L lahko zapišemo kot

$$L = U \Lambda U^T,$$

ker je

$$U \Lambda U^T = U (U^T L U) U^T = (U^T U) L (U U^T) = I L I = L.$$

Naj bo Moore-Penrosov psevdoinverz matrike L enak

$$L^+ = U \Lambda^+ U^T,$$

kjer je

$$\Lambda^+ = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_n} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_{n-1}} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \frac{1}{\lambda_2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Najprej preverimo, da velja $L^+ = U \Lambda^+ U^T$. Tako za LL^+ velja

$$LL^+ = (U \Lambda U^T) (U \Lambda^+ U^T) = U \Lambda (U^T U) \Lambda^+ U^T = U \Lambda \Lambda^+ U^T = U J U^T,$$

kjer je

$$J = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Ostane nam samo, da pokažemo, da je UJU^T ortogonalni projektor prostora $\{x_2, \dots, x_n\}$ oziroma, da velja $UJU^T = I - e^T e$. Torej moramo pokazati, da je

$$(UJU^T) e = 0 \quad \text{in} \quad (UJU^T) x_i = x_i$$

za $i = 2, \dots, n$. Ker je e ortogonalen na ostale lastne vektorje matrike L , je potem

$$e^T U = e^T [x_2 \cdots x_n e] = [e^T x_2 \cdots e^T x_n e^T e] = [0 \cdots 0 1].$$

Kar pomeni, da je

$$J(e^T U)^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

in je

$$(UJU^T) e = U \left(J(e^T U)^T \right) = U 0 = 0.$$

Sedaj pa še pokažimo, da je $(UJU^T) x_i = x_i$ za $i = 2, \dots, n$. Vsak x lahko zapišemo v obliki $x = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i y_i$, kjer so $\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}$ skalarji. Ker so lastni vektorji matrike L ortogonalni, potem velja

$$x^T y_i = \alpha_i \quad \text{in} \quad x^T e = 0.$$

Ker je

$$x^T U = x^T [x_2 \ x_3 \ \dots \ x_n \ e] = [\alpha_1 \ \dots \ \alpha_{n-1} \ 0],$$

lahko zapišemo

$$\begin{aligned}
 (UJU^T)x &= U(J(x^T U)^T) \\
 &= U \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \\ 0 \end{bmatrix} \\
 &= U \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \\ 0 \end{bmatrix} = [x_2 \ x_3 \ \dots \ x_n \ e] \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \\ 0 \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i y_i = x.
 \end{aligned}$$

Ker so $\frac{1}{\lambda_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_n}$ lastne vrednosti L^+ , potem velja

$$\begin{aligned}
 \text{tr } L^+ &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i}, \\
 n \text{tr } L^+ &= n \sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i}, \\
 \text{Kf} &= \text{qW}.
 \end{aligned}$$

■

Poglavje 6

Hararyjev indeks

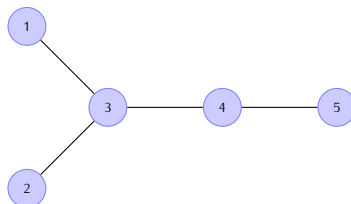
V člankih [14, 26] so avtorji predstavili Hararyjev indeks, ki je zgrajen na podlagi recipročne matrike najkrajših razdalj.

Definicija 6.1 (Recipročna matrika najkrajših razdalj) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo D matrika najkrajših razdalj grafa G . Potem je recipročna matrika najkrajših razdalj D' enaka

$$[D']_{ij} = \begin{cases} 0 & , [D]_{ij} = 0 \\ \frac{1}{[D]_{ij}} & , [D]_{ij} \neq 0 \end{cases}$$

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

Primer 6.1 Matrika najkrajših razdalj D grafa prikazanega na sliki 6.1, je enaka



Slika 6.1: Graf molekule 2-metilbutan.

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

in njena recipročna matrika najkrajših razdalj D' je

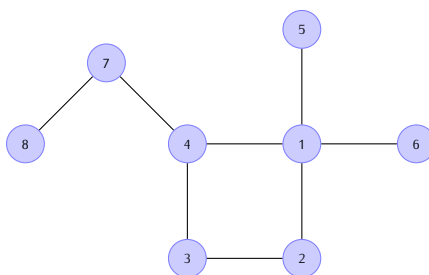
$$D' = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ 1 & 1 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 & 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

--

Definicija 6.2 (Hararyjev indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo D matrika najkrajših razdalj grafa G in D' recipročna matrika najkrajših razdalj matrike D . Hararyjev indeks je enak

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [D']_{ij}. \quad (6.1)$$

Primer 6.2 Matrika najkrajših razdalj za graf prikazanega na sliki 6.2 je



Slika 6.2: Graf molekule 4-etil-1,1-dimetilciklobutan.

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 3 & 3 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 2 & 0 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 2 & 2 & 0 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 2 & 1 & 3 & 3 & 0 & 1 \\ 3 & 4 & 2 & 2 & 4 & 4 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Recipročna matrika matrike najkrajših razdalj D je

$$D' = \frac{1}{12} \begin{bmatrix} 0 & 12 & 6 & 12 & 12 & 12 & 6 & 4 \\ 12 & 0 & 12 & 6 & 6 & 6 & 4 & 3 \\ 6 & 12 & 0 & 12 & 4 & 4 & 6 & 6 \\ 12 & 6 & 12 & 0 & 6 & 6 & 12 & 6 \\ 12 & 6 & 4 & 6 & 0 & 6 & 4 & 3 \\ 12 & 6 & 4 & 6 & 6 & 0 & 4 & 3 \\ 6 & 4 & 6 & 12 & 4 & 4 & 0 & 12 \\ 4 & 3 & 6 & 6 & 3 & 3 & 12 & 0 \end{bmatrix}.$$

Po formuli 6.1 je Hararyjev indeks enak

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n [D']_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{12} \cdot 390 = \frac{65}{4}.$$

--

Za določitev spodnje in zgornje meje potrebujemo sledeče trditve.

Trditev 6.1 Naj bo $P_n = (V, E)$ pot z n točkami. Hararyjev indeks H grafa P_n je

$$H = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{n-i}{i}.$$

Dokaz. Če z D' označimo recipročno matriko najkrajših razdalj, potem je ta enaka

$$D' = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n-1} \\ 1 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2} & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{1}{2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 1 \\ \frac{1}{n-1} & \cdots & \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

in Hararyjev indeks H za pot P_n je enak

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n [D']_{ij} = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{n-i}{i}.$$

■

Trditev 6.2 Naj bo $K_n = (V, E)$ poln graf z n točkami. Hararyjev indeks H grafa K_n je

$$H = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Dokaz. Ker sta poljubni točki iz V na razdalji 1, sta matrika najkrajših razdalj D in recipročna matrika najkrajših razdalj D' enaki

$$D = D' = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Hararyjev indeks H polnega grafa je

$$H(K_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n [D']_{ij} = \frac{1}{2}(n^2 - n) = \frac{n(n-1)}{2}.$$

■

Trditev 6.3 Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo $e \in E$ povezava. Naj bo graf $G' = (V, E \setminus \{e\})$ povezan graf. Označimo s H Hararyjev indeks grafa G in s H' Hararyjev indeks grafa G' . Potem velja

$$H' < H.$$

Dokaz. Naj ima povezava e za krajišči točki $u, v \in V$. Za vsako najkrajšo pot med $x, y \in V$, ki vsebuje e velja, da je razdalja med x in y v grafu G manjša od razdalje v G' . Ker je razdalja med u in v v grafu G manjša od razdalje v G' , potem velja $H' < H$. ■

Posledica te trditve je, da je Hararyjev indeks poljubnega grafa z n točkami večji ali enak od Hararyjevega indeksa poljubnega drevesa z n točkami.

Trditev 6.4 (Spodnja in zgornja meja) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo H Hararyjev indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$\sum_{i=1}^{n-1} \frac{n-i}{i} \leq H \leq \frac{n(n-1)}{2}.$$

Dokaz. Najprej dokažimo zgornjo mejo. Element recipročne matrike najkrajših razdalj je $[D']_{ij} = \frac{1}{d_{ij}}$, kjer je d_{ij} razdalja med točko i in točko j , in velja $\frac{1}{d_{ij}} \leq 1$. Največjo vrednost, ki jo Hararyjev indeks doseže, je

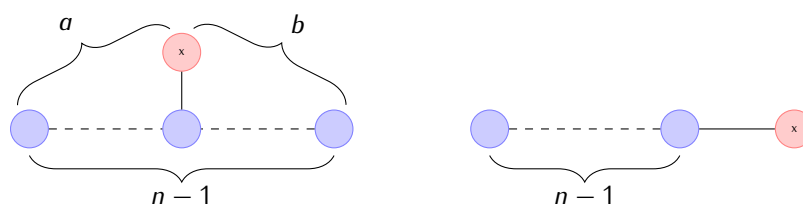
$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, i \neq j}^n 1 = \frac{n(n-1)}{2} = H(K_n).$$

Graf z n točkami, pri katerem Hararyjev indeks doseže najmanjšo vrednost, je pot P_n . To trditev bomo dokazali s pomočjo indukcije. Naj bo F' graf, ki ga dobimo s pomočjo poti P_{n-1} tako, da priprimo novo točko x na eno od točk, ki ni krajišče poti P_{n-1} . Z a označimo število točk od x do enega od krajišč in z b število točk od x do drugega krajišča poti P_{n-1} ter naj velja $a \geq b > 0$. Naj bo F'' graf, ki ga dobimo s pomočjo poti P_{n-1} tako, da priprimo novo točko x na eno od krajišč. Grafa F' in F'' sta prikazana na sliki 6.3. Naj bo $H(P_{n-1})$ Hararyjev indeks grafa P_{n-1} . Po predpostavki velja

$$\begin{aligned} H' &> H'' \\ H(P_{n-1}) + \sum_{j=1}^{a-1} \frac{1}{j} + \sum_{k=2}^{b-1} \frac{1}{k} &> H(P_{n-1}) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i} \\ \sum_{j=1}^{a-1} \frac{1}{j} + \sum_{k=2}^{b-1} \frac{1}{k} &> \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i} \\ \sum_{j=1}^{a-1} \frac{1}{j} - \sum_{j=1}^{a-1} \frac{1}{j} + \sum_{k=2}^{b-1} \frac{1}{k} &> \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i} - \sum_{j=1}^{a-1} \frac{1}{j} \\ \sum_{k=2}^{b-1} \frac{1}{k} &> \sum_{i=a}^{n-1} \frac{1}{i} \end{aligned}$$

Število členov na levi in desni strani je enako. Vsi členi na levi strani so večji od členov na desni strani. Kar pomeni, da je Hararyjev indeks za pot P_n najmanjši med vsemi grafi z n točkami.

S tem smo dokazali, da velja $H(P_n) \leq H \leq H(K_n)$. ■



(a) Število točk v podgrafu grafa F' .

(b) Število točk v podgrafu grafa F'' .

Slika 6.3: Hararyjev indeks poti P_n predstavlja spodnjo mejo.

V primeru, da želimo le približno oceno za spodnjo mejo, si lahko pomagamo s spodnjo mejo za harmonično vrsto

$$\ln(n+1) < \sum_{i=1}^n \frac{1}{i} < \ln n + 1.$$

V tem primeru je spodnja meja Hararyjevega indeksa enaka

$$\sum_{i=1}^{n-1} \frac{n-i}{i} = n \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i} - (n-1) > n \ln(n-1+1) - (n-1) = n \ln n - n + 1.$$

Primer 6.3 Hararyjev indeks H grafa G z 8 točkami je med

$$13,7429 < H < 28.$$

--

Das, Zhou, Trinajstić in Cai [32, 4] so obravnavali različne meje Hararyjevega indeksa. Med njimi je tudi zgornja in spodnja meja Hararyjevega indeksa za graf z n točkami in m povezavami, ki je enaka

$$\sum_{i=1}^{n-1} \frac{n-i}{i} + \frac{m-n+1}{2} \leq H \leq \frac{n(n-1)}{4} + \frac{m}{2}.$$

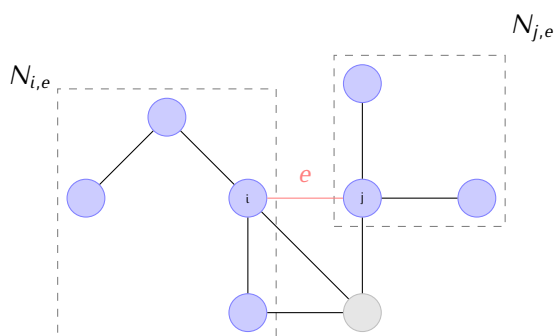
Poglavje 7

Szegedov indeks

Leta 1995 je bil prvič objavljen članek o Szegedovem indeksu [15]. Szegedov in hiper-Szegedov index predstavljata razširitev Wienerjevega in hiper-Wienerjevega indeksa na grafe, ki vsebujejo tudi cikle.

Definicija 7.1 (Vrednost $N_{i,e}$) Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo $e \in E$ povezava, ki ima za krajišči točki $i, j \in V$. Če odstranimo povezavo e iz grafa G , potem z $N_{i,e}$ označimo moč množice točk, ki so bližje točki i kot točki j in z $N_{j,e}$ označimo moč množice točk, ki so bližje točki j kot točki i . Točk, ki so enako oddaljene od točke i in točke j ne upoštevamo.

Primer 7.1 Kot primer vzemimo graf na sliki 7.1, kjer izberemo poljubno povezavo e . Tako je moč množice točk, ki so bližje točki i enaka $N_{i,e} = 4$, in moč množice točk, ki so bližje točki j je enaka $N_{j,e} = 3$. Pri tem nismo upoštevali ene točke, ki je enako oddaljena od krajišč povezave e in smo jo označili s sivo barvo.



Slika 7.1: $N_{i,e} = 4$ in $N_{j,e} = 3$.

Definicija 7.2 (Szegedov indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo $e \in E$ in naj bosta $i, j \in V$ krajišči povezave e . Potem je Szegedov indeks enak

$$Sz_e = \sum_{e \in E} (N_{i,e} \cdot N_{j,e}).$$

Trditev 7.1 Naj bo $G = (V, E)$ drevo in naj bo Sz_e Szegedov indeks in W_e Wienerjev indeks grafa G . Potem velja

$$Sz_e = W_e.$$

Dokaz. Ker je G drevo, med poljubnima točkama obstaja samo ena enolično določena pot. V tem primeru je vrednost $N_{i,e}$ po definiciji 7.1 enaka vrednosti $N_{i,e}$ po definiciji 4.1. ■

Definicija 7.3 (Szegedova matrika) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo $e \in E$ povezava in naj bosta $i, j \in V$ krajišči povezave e . Potem so elementi Szegedove matrike M_{Sz_e} velikosti $n \times n$ enaki

$$[M_{Sz_e}]_{ij} = \begin{cases} N_{i,e} \cdot N_{j,e}, & \text{če sta točki } i \text{ in } j \text{ sosedni in } i \neq j, \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Tako lahko Szegedov indeks Sz_e izračunamo tudi s pomočjo Szegedove matrike M_{Sz_e} in sicer kot

$$Sz_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{Sz_e}]_{ij}, \quad (7.1)$$

kjer je n število točk v grafu.

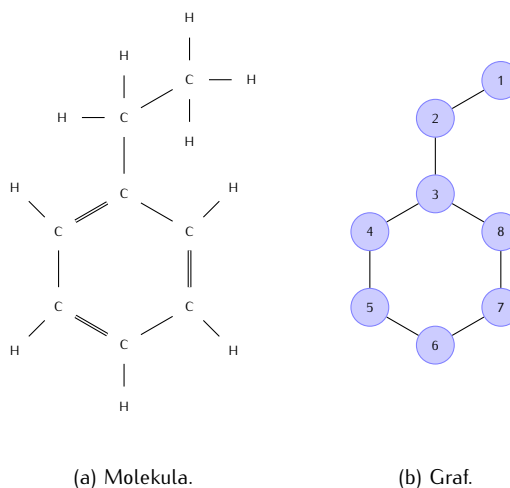
Primer 7.2 Vzemimo kot primer graf na sliki 7.2. Matrika M_{Sz_e} je v tem primeru enaka

$$M_{Sz_e} = \begin{bmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 0 & 15 & 0 & 0 & 0 & 15 \\ 0 & 0 & 15 & 0 & 15 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 15 & 0 & 15 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 & 15 \\ 0 & 0 & 15 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 \end{bmatrix}$$

in Szegedov indeks je enak

$$Sz_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^8 \sum_{j=1}^8 [M_{Sz_e}]_{ij} = \frac{1}{2} \cdot 218 = 109.$$

--

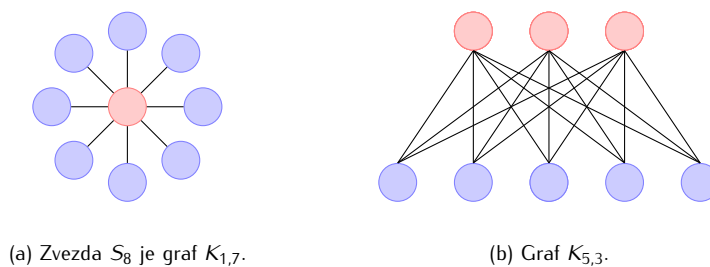


Slika 7.2: Molekula etilbenzena in njen graf.

Za dokaz spodnje in zgornje meje potrebujemo sledeče definicije.

Definicija 7.4 (Poln bipartiten graf) Naj bo $G = (V_1 + V_2, E)$ graf z n točkami za katerega velja $V_1 \cap V_2 = \emptyset$. Naj bo a moč množice V_1 in naj bo b moč množice V_2 . Graf G je poln bipartiten graf $K_{a,b}$, če je vsaka točka iz V_1 povezana z vsako točko iz V_2 in pri tem nobena točka ni povezana s katero drugo točko iz iste množice.

Primer 7.3 Primer dveh polnih bipartitnih grafov lahko vidimo na sliki 7.3.



Slika 7.3: Polna bipartitna grafa.

--

Trditev 7.2 Naj bo $K_{a,b}$ poln bipartiten graf z $a + b = n$ točkami. Szegedov indeks Sz_e grafa $K_{a,b}$ je

$$Sz_e = a^2 \cdot b^2.$$

Dokaz. Za vsako povezavo $e \in E$ s krajiščema i in j je zmnožek

$$N_{i,e} \cdot N_{j,e} = a \cdot b.$$

Ker je v grafu $m = a \cdot b$ povezav, je Szegedov indeks enak

$$Sz_e = \sum_{e \in E} a \cdot b = m(a \cdot b) = (a \cdot b) \cdot (a \cdot b) = (ab)^2.$$

■

Trditev 7.3 Naj bo $K_n = (V, E)$ poln graf z n točkami in naj bo Sz_e Szegedov indeks grafa K . Szegedov indeks polnega grafa je

$$Sz_e = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Dokaz. Ker so od poljubnih sosednih točk i in j (povezanih s povezavo e) vse preostale točke enako oddaljene, je zmnožek vedno enak $N_{i,e} \cdot N_{j,e} = 1$. Sledi, da je Szegedova matrika polnega grafa K_n enaka

$$M_{Sz_e(K_n)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \dots & \dots & 1 \\ 1 & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & \dots & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

in Szegedov indeks za poln graf K_n je enak

$$Sz_e(K_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{Sz_e}]_{ij} = \frac{1}{2} (n^2 - n).$$

■

Klavžar [17] je ugotovil, da je Wienerjev indeks W_e grafa G manjši ali enak od Szegedovega indeksa Sz_e istega grafa (torej $W_e \leq Sz_e$).

Trditev 7.4 (Spodnja in zgornja meja) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo Sz_e Szegedov indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$\frac{n(n-1)}{2} \leq Sz_e \leq \begin{cases} \frac{p^4}{16}, & n \text{ je sod,} \\ \frac{(p^2-1)^2}{16}, & n \text{ je lih.} \end{cases}$$

Dokaz. Najprej dokažimo spodnjo mejo. Naj bo W_e Wienerjev indeks grafa G . Ker velja $Sz_e \geq W_e$ in $W_e \geq \frac{n(n-1)}{2}$, potem je

$$Sz_e \geq W_e \geq \frac{n(n-1)}{2} = Sz_e(K_n).$$

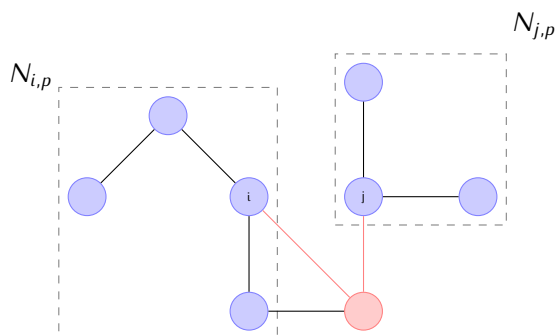
Dokaz za zgornjo mejo je preobsežen in si ga bralec lahko prebere v članku [11].

Torej velja $Sz_e(K_n) \leq Sz_e \leq Sz_e(K_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor)$. ■

Poleg Szegedovega indeksa obstaja tudi hiper-Szegedov indeks.

Definicija 7.5 (Vrednost $N_{i,p}$) Naj bo $G = (V, E)$ graf in naj bo p najkrajša pot v grafu G , ki ima za krajišči točki $i, j \in V$. Odstranimo pot p iz grafa G tako, da odstranimo vse točke poti p razen krajišč ter povezave, ki so povezane z odstranjenimi točkami. Potem z $N_{i,p}$ označimo moč množice točk, ki so bližje točki i kot točki j , in z $N_{j,p}$ označimo moč množice točk, ki so bližje točki j kot točki i . Točk, ki so enako oddaljene od točke i in točke j ne upoštevamo.

Primer 7.4 Kot primer vzemimo graf na sliki 7.4, kjer izberemo poljubno pot p . Tako je moč množice točk, ki so bližje točki i enaka $N_{i,p} = 3$, in moč množice točk, ki so bližje točki j enaka $N_{j,p} = 3$. V tem primeru ni nobenih točk, ki bi bile enako oddaljene od krajišč poti p .



Slika 7.4: $N_{i,p} = 4$ in $N_{j,p} = 3$.

--

Definicija 7.6 (Hiper-Szegedov indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo p najkrajša pot v

grafu G in $i, j \in V$ krajišči poti p . Potem je hiper-Szegedov indeks enak

$$Sz_p = \sum_{p \in G} (N_{i,p} \cdot N_{j,p}).$$

Definicija 7.7 (Hiper-Szegedova matrika) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo p najkrajša pot in $i, j \in V$ krajišči poti p . Potem so elementi hiper-Szegedove matrike M_{Sz_p} velikosti $n \times n$ enaki

$$[M_{Sz_p}]_{ij} = \begin{cases} N_{i,p} \cdot N_{j,p}, & \text{če obstaja pot med točko } i \text{ in točko } j \text{ ter } i \neq j, \\ 0, & \text{sicer} \end{cases}$$

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

Tako lahko hiper-Szegedov indeks Sz_p izračunamo tudi s pomočjo hiper-Szegedove matrike M_{Sz_p} in sicer kot

$$Sz_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{Sz_p}]_{ij}, \quad (7.2)$$

kjer je n število točk v grafu.

Primer 7.5 Vzemimo kot primer še enkrat graf na sliki 7.2. Hiper-Szegedova matrika je

$$M_{Sz_p} = \begin{bmatrix} 0 & 7 & 6 & 12 & 8 & 15 & 8 & 12 \\ 7 & 0 & 12 & 6 & 16 & 9 & 16 & 6 \\ 6 & 12 & 0 & 15 & 8 & 15 & 8 & 15 \\ 12 & 6 & 15 & 0 & 15 & 8 & 15 & 4 \\ 8 & 16 & 8 & 15 & 0 & 15 & 4 & 15 \\ 15 & 9 & 15 & 8 & 15 & 0 & 15 & 8 \\ 8 & 16 & 8 & 15 & 4 & 15 & 0 & 15 \\ 12 & 6 & 15 & 4 & 15 & 8 & 15 & 0 \end{bmatrix}.$$

Sledi, da je hiper-Szegedov indeks enak

$$Sz_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^8 \sum_{j=1}^8 [M_{Sz_p}]_{ij} = \frac{1}{2} \cdot 616 = 308.$$

--

Tako kot obstaja relacija med Sz_e in W_e obstaja tudi relacija med Sz_p in W_p

Trditev 7.5 Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo. Naj bo Sz_p hiper-Szegedov indeks grafa G in W_p hiper-

Wienerjev indeks grafa G . Potem velja

$$Sz_p = W_p.$$

Dokaz. Ker drevo ne vsebuje nobenih ciklov obstaja samo ena pot med i in j . Iz tega sledi, da sta vrednosti $N_{i,p}$ in $N_{j,p}$ po definiciji 7.5 in 4.4 enaki. Posledično sta Wienerjeva in Szegedova matrika enaki, prav tako pa tudi indeksa. ■

Obstaja tudi relacija med M_{Sz_e} in M_{Sz_p} .

Trditev 7.6 Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo A matrika sosednosti grafa G . Naj bosta M_{Sz_e} Szegedova matrika in M_{Sz_p} hiper-Szegedova matrika grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$[M_{Sz_e}]_{ij} = [A]_{ij} \cdot [M_{Sz_p}]_{ij}$$

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

Dokaz. Naj bosta $i, j \in V$. Če je $[A]_{ij} = 0$, potem točka i ni sosedna točki j in ustreza definiciji Szegedove matrike. Če je vrednost $[A]_{ij} = 1$, potem je razdalja $d_{ij} = 1$ in takrat je vrednost $N_{i,p} = N_{i,e}$ in $N_{j,p} = N_{j,e}$. ■

Poglavje 8

Clujev indeks

M. Diudea je v člankih [7, 8] predstavil Clujev indeks.

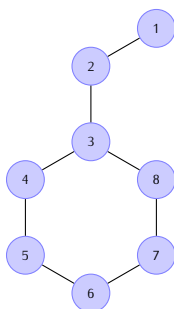
Definicija 8.1 (Nesimetrična Clujeva matrika) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo p_{ij} najkrajša pot med točko i in j v grafu G . Z G' označimo graf, ki ga dobimo tako, da iz grafa G odstranimo vse točke poti p_{ij} razen krajišč i in j . Naj bo $N_{i,p_{ij}}$ število točk, ki so bližje točki i kot točki j v grafu G' . Potem so elementi Clujeve matrike M_{UCI} enaki

$$[M_{UCI}]_{ij} = \max N_{i,p_{ij}}$$

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

Ne smemo pozabiti, da je med točko i in j lahko več različnih najkrajših poti.

Primer 8.1 Vzemimo še enkrat kot primer graf molekule etilbenzena na sliki 8.1. V tem primeru je



Slika 8.1: Graf etilbenzena.

nesimetrična Clujeva matrika enaka

$$M_{UCJ} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 7 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 6 & 6 & 0 & 5 & 4 & 4 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 3 & 0 & 5 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 2 & 3 & 0 & 5 & 2 & 2 \\ 3 & 2 & 2 & 2 & 3 & 0 & 3 & 2 \\ 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 5 & 0 & 3 \\ 4 & 3 & 3 & 2 & 4 & 4 & 5 & 0 \end{bmatrix}.$$

--

Definicija 8.2 (Simetrična Clujeva matrika za povezave) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo M_{UCJ} nesimetrična Clujeva matrika grafa G . Naj bo A matrika sosednosti grafa G . Potem so elementi simetrične Clujeve matrike M_{SCJ_e} definirani kot

$$[M_{SCJ_e}]_{ij} = [A]_{ij} \cdot [M_{UCJ}]_{ij} \cdot [M_{UCJ}]_{ji}$$

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

V simetrični Clujevi matriki za povezave so tako neničelni elementi samo tisti elementi, kjer obstaja povezava med tistima dvema točkama, ki ju element predstavlja.

Primer 8.2 V primeru 8.1 smo pokazali nesimetrično Clujevo matriko grafa prikazanega na sliki 8.1. Iz tega sledi, da je simetrična Clujeva matrika za povezave enaka

$$M_{SCJ_e} = \begin{bmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 0 & 15 & 0 & 0 & 0 & 15 \\ 0 & 0 & 15 & 0 & 15 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 15 & 0 & 15 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 & 15 \\ 0 & 0 & 15 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 \end{bmatrix}.$$

--

Definicija 8.3 (Clujev indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo M_{SCl_e} simetrična Clujeva matrika za povezave grafa G . Potem je Clujev indeks definiran kot

$$CJ_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{SCl_e}]_{ij}.$$

Primer 8.3 Če nadaljujemo primer 8.2, je Clujev indeks za graf G enak

$$CJ_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^8 \sum_{j=1}^8 [M_{SCl_e}]_{ij} = \frac{218}{2} = 109.$$

--

Trditev 8.1 Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bosta CJ_e Clujev indeks in Sz_e Szegedov indeks grafa G . Potem velja

$$CJ_e = Sz_e.$$

Dokaz. Torej moramo dokazati, da je $M_{SCl_e} = M_{Sz_e}$. Če točki $i, j \in V$ nista sosedni, potem sta elementa $[M_{SCl_e}]_{ij}$ in $[M_{Sz_e}]_{ij}$ enaka 0. V primeru, da sta i in j sosedna, potem obstaja natanko ena najkrajša pot med i in j dolžine 1. Sledi, da je

$$\begin{aligned} [M_{SCl_e}]_{ij} &= [M_{Sz_e}]_{ij} \\ \max N_{i,p_{ij}} \cdot \max N_{j,p_{ij}} &= N_{i,e} \cdot N_{j,e} \\ N_{i,e} \cdot N_{j,e} &= N_{i,e} \cdot N_{j,e}. \end{aligned}$$

Sledi, da so elementi v obeh matrikah enaki in zaradi tega velja $CJ_e = Sz_e$. ■

Trditev 8.2 (Spodnja in zgornja meja) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo CJ_e Clujev indeks grafa G . Potem velja sledeča relacija

$$\frac{n(n-1)}{2} \leq CJ_e \leq \begin{cases} \frac{p^4}{16}, & n \text{ je sod,} \\ \frac{(p^2-1)^2}{16}, & n \text{ je lih.} \end{cases}$$

Dokaz. Dokaz sledi direktno iz trditve 8.1 in trditve 7.4. ■

Definicija 8.4 (Simetrična Clujeva matrika za poti) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo M_{UCI} nesimetrična Clujeva matrika grafa G . Potem so elementi simetrične Clujeve matrike za poti M_{SCl_p} definirani kot

$$[M_{SCl_p}]_{ij} = [M_{UCI}]_{ij} \cdot [M_{UCI}]_{ji}$$

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

Primer 8.4 V primeru 8.1 smo izračunali nesimetrično Clujevo matriko za graf na sliki 8.1. Sledi, da je simetrična Clujeva matrika za poti enaka

$$M_{SCl_p} = \begin{bmatrix} 0 & 7 & 6 & 4 & 3 & 3 & 3 & 4 \\ 7 & 0 & 12 & 8 & 6 & 4 & 6 & 6 \\ 6 & 12 & 0 & 15 & 8 & 8 & 8 & 15 \\ 4 & 8 & 15 & 0 & 15 & 8 & 8 & 4 \\ 3 & 6 & 8 & 15 & 0 & 15 & 4 & 8 \\ 3 & 4 & 8 & 8 & 15 & 0 & 15 & 8 \\ 3 & 6 & 8 & 8 & 4 & 15 & 0 & 15 \\ 4 & 6 & 15 & 4 & 8 & 8 & 15 & 0 \end{bmatrix}.$$

--

Definicija 8.5 (Hiper-Clujev indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo M_{SCl_e} simetrična Clujeva matrika za poti grafa G . Potem je hiper-Clujev indeks enak

$$CJ_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{SCl_p}]_{ij}.$$

Primer 8.5 Če nadaljujemo primer 8.4, je hiper-Clujev indeks za graf G enak

$$CJ_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{SCl_p}]_{ij} = \frac{452}{2} = 226.$$

--

Trditev 8.3 Naj bo $T = (V, E)$ drevo. Naj bodo CJ_e Clujev indeks, Sz_e Szegedov indeks, W_e Wienerjev indeks grafa T in naj bosta CJ_e hiper-Clujev indeks, W_e hiper-Wienerjev indeks grafa T . Potem veljata sledeči relaciji

$$CJ_e = Sz_e = W_e \quad \text{in} \quad CJ_p = W_p.$$

Dokaz. Relacije $CJ_e = Sz_e = W_e$ izhajajo iz trditve 8.1 in trditve 7.1. Relacija $CJ_p = W_p$ izhaja iz dejstva, da med poljubnima točkama iz V obstaja natanko ena pot. Zato sta matriki M_{SCl_p} in M_{W_p} enaki in posledično tudi CJ_p in W_p . ■

Poglavje 9

Število sprehodov: Wienerjevi tipi indeksov višjega reda

Diudea je v članku [6, 10] predstavil Wienerjeve tipe indeksov višjega reda.

Definicija 9.1 (Utežena stopnja sprehoda) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo P matrika velikosti $n \times n$, v kateri je skozi uteži povezav je opisana neka lastnost grafa G . Utežena stopnja sprehoda ${}^k W_{P,i}$ je definirana kot

$${}^k W_{P,i} = \sum_{j=1}^n [P^k]_{ij}.$$

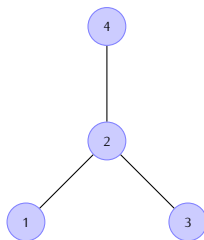
Torej lahko rečemo, da je utežena stopnja sprehoda enaka vsoti uteži vseh sprehodov dolžine k , ki se začnejo v i -ti točki.

Definicija 9.2 (Diagonalna matrika sprehodov) Naj bo $G = (V, E)$ z n točkami. Naj bo P matrika velikosti $n \times n$, v kateri je skozi uteži povezav opisana neka lastnost grafa G . Diagonalna matrika sprehoda M_{k, W_P} reda $k \in \mathbb{N}$ je matrika v kateri so elementi enak

$$[M_{k, W_P}]_{ij} = \begin{cases} {}^k W_{P,i}, & i = j, \\ 0, & \text{sicer,} \end{cases}$$

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

Primer 9.1 Vzemimo kot primer graf G na sliki 9.1 in kot matriko P uporabimo kar matriko sosednosti,



Slika 9.1: Graf molekule 2-metilpropan.

torej $P = A$. Matrika sosednosti grafa G je enaka

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

Diagonalna matrika sprehoda $M_{k_{W_P}}$ za $P = A$ in reda $k = 1$ je

$$M_{k_{W_P}} = M_{1_{W_A}} = \begin{bmatrix} {}^1W_{A,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & {}^1W_{A,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & {}^1W_{A,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & {}^1W_{A,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Za izračun diagonalnih matrik sprehodov reda $k = 2$ in $k = 3$ moramo najprej izračunati vrednosti A^2 in A^3 , torej

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

Iz tega sledi, da sta $M_{2_{W_A}}$ in $M_{3_{W_A}}$ enaka

$$M_{2_{W_A}} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad M_{3_{W_A}} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

Definicija 9.3 (Utežena številka sprehoda) Naj bo $G = (V, E)$ z n točkmi. Naj bo P matrika velikosti $n \times n$ v kateri je skozi uteži povezav opisana neka lastnost grafa G . Naj bo $M_{k_{W_P}}$ diagonalna matrika sprehoda reda k za matriko P . Utežena številka sprehoda ${}^k W_P$ reda k je definirana kot

$${}^k W_P = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [M_{k_{W_P}}]_{ij}.$$

Utežena številka sprehoda je v tesni povezavi s številom atomskih sprehodov in številom molekularnih sprehodov [13].

Definicija 9.4 (Število atomskih sprehodov) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo ${}^k W_{P,i}$ utežena stopnja sprehoda za $i \in V$. Naj bo A matrika sosednosti grafa G in naj velja, da je $P = A$. Potem je število atomskih sprehodov $\text{awc}_{k,i}$ reda k enako

$$\text{awc}_{k,i} = {}^k W_{A,i} = \sum_{j=1}^n [A^k]_{ij}.$$

Hitro lahko tudi sestavimo uteženo matriko sprehodov za $\text{awc}_{k,i}$ in sicer kot

$$M_{k_{W_A}} = \begin{bmatrix} \text{awc}_{k,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \text{awc}_{k,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \text{awc}_{k,n} \end{bmatrix}$$

in jo povežemo s številom molekularnih sprehodov.

Definicija 9.5 (Število molekularnih sprehodov) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo $\text{awc}_{k,i}$ število atomskih sprehodov reda k za $i \in V$. Potem je število molekularnih sprehodov mwc_k reda k enako

$$\text{mwc}_k = \sum_{i=1}^n \text{awc}_{k,i}.$$

Število molekularnih sprehodov ustreza vsoti diagonalnih elementov utežene matrike sprehodov $M_{k_{W_A}}$, oziroma

$$\text{mwc}_k = \sum_{i=1}^n [M_{k_{W_A}}]_{ii}.$$

Omeniti moramo še relacijo s sklenjeno potjo dolžine k .

Definicija 9.6 (Število sklenjenih poti) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo A matrika sose-

dnosti grafa G . Naj bo A^k število vseh poti dolžine k . Število sklenjenih poti reda k za točko $i \in V$ je enako

$$\text{swc}_{k,i} = [A^k]_{ii}$$

in število sklenjenih poti reda k za graf G je

$$\text{swc}_k = \sum_{i=1}^n [A^k]_{ii}$$

za $j = 1, \dots, n$.

Že od samega začetka pa so tudi znane povezave med lastnimi vrednostmi in lastnimi vektorji ter številom atomskih sprehodov, številom molekularnih sprehodov in številom sklenjenih poti [13].

Trditev 9.1 Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo A matrika sosednosti grafa G . Z λ_i in x_i , $i = 1, \dots, n$, označimo lastne vrednosti matrike A in pripadajoče lastne ortonormirane vektorje. Naj bo A^k sprehod reda k . Potem veljajo sledeče relacije

$$\begin{aligned} [A^k]_{ij} &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k [x_l]_i [x_l]_j, \\ \text{awc}_{k,i} &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k s_l [x_l]_i, \\ \text{swc}_{k,i} &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k [x_l]_i^2, \\ \text{swc}_k &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k = \text{tr } A^k, \\ \text{mwc}_k &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k s_l^2, \end{aligned}$$

kjer je $s_i = \sum_{j=1}^n [x_i]_j$, oziroma vsota elementov i -tega lastnega vektorja.

Dokaz. Ker je A simetrična matrika in so njeni elementi cela števila, potem lahko naredimo dekompozicijo s pomočjo lastnih vrednosti in lastnih vektorjev. Tako lahko zapišemo A v obliki

$$A = Q\Lambda Q^{-1},$$

kjer je Q matrika oblike

$$Q = [x_1 \cdots x_n]$$

in je Λ diagonalna matrika oblike

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix}.$$

Tako lahko hitro izračunamo A^k kot

$$\begin{aligned} A^k &= (Q\Lambda Q^{-1})^k \\ &= (Q\Lambda Q^{-1})(Q\Lambda Q^{-1}) \cdots (Q\Lambda Q^{-1})(Q\Lambda Q^{-1}) \\ &= Q\Lambda(Q^{-1}Q)\Lambda(Q^{-1}Q) \cdots (Q^{-1}Q)\Lambda(Q^{-1}Q)\Lambda Q^{-1} \\ &= Q\Lambda\Lambda\cdots\Lambda\Lambda Q^{-1} \\ &= Q\Lambda^k Q^{-1}, \end{aligned}$$

kjer je Λ^k oblike

$$\Lambda^k = \begin{bmatrix} \lambda_1^k & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n^k \end{bmatrix}.$$

Prvo relacijo, $[A^k]_{ij} = \sum_{l=1}^n \lambda_l^k [x_l]_i [x_l]_j$, dobimo direktno z množenjem $Q\Lambda^k Q^{-1}$. Iz tega sledi, da lahko izračunamo število molekularnih sprehodov $awc_{k,i}$ kot vsoto elementov i -te vrstice matrike A^k , torej kot

$$\begin{aligned} awc_{k,i} &= \sum_{j=1}^n [A^k]_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \lambda_l^k [x_l]_i [x_l]_j \\ &= \sum_{l=1}^n \left(\lambda_l^k [x_l]_i \sum_{j=1}^n [x_l]_j \right) \\ &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k s_l [x_l]_i. \end{aligned}$$

Od tod sledi, da je

$$\begin{aligned} mwc_k &= \sum_{i=1}^n awc_{k,i} \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^n \lambda_l^k s_l [x_l]_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{l=1}^n \left(\lambda_l^k s_l \sum_{i=1}^n [x_l]_i \right) \\ &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k s_l^2. \end{aligned}$$

Podobno velja tudi za število sklenjenih poti. Tako je število sklenjenih poti reda k za i -to točko enako

$$\begin{aligned} \text{swc}_{k,i} &= [A^k]_{ii} \\ &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k [x_l]_i [x_l]_i \\ &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k [x_l]_i^2 \end{aligned}$$

in število vseh sklenjenih poti reda k enako

$$\begin{aligned} \text{swc}_k &= \sum_{i=1}^n \text{swc}_{k,i} \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^n \lambda_l^k [x_l]_i^2 \\ &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k \left(\sum_{i=1}^n [x_l]_i^2 \right) \\ &= \sum_{l=1}^n \lambda_l^k \\ &= \text{tr } \lambda^k = \text{tr } A^k. \end{aligned}$$



Poglavje 10

Schultzov indeks

H. Schultz je v članku [29] predstavil indeks, ki ga je poimenoval molekularni topološki indeks.

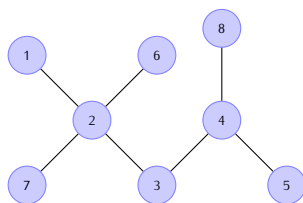
Definicija 10.1 (Schultzov indeks) Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami. Naj bo A matrika sosednosti, D matrika razdalj in S vektor stopenj grafa G . Z M_{MTI} označimo vsoto

$$M_{\text{MTI}} = (A + D) \cdot S.$$

Potem je molekularni topološki indeks oziroma Schultzov indeks enak

$$\text{MTI} = \sum_{i=1}^n [M_{\text{MTI}}]_i.$$

Primer 10.1 Vzemimo kot primer graf na sliki 10.1. Potem so matrika sosednosti A , matrika razdalj D



Slika 10.1: Graf molekule 2,2,4-trimetilpentana oziroma izooktana.

in vektor stopenj S enaki

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 2 & 2 & 4 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 1 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 3 & 3 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & 4 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 4 & 0 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 4 & 2 & 0 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 2 & 4 & 4 & 0 \end{bmatrix}, S = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \\ 3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Če z M_{MTI} označimo $(A + D) \cdot S$, potem ima M_{MTI} vrednost

$$\begin{aligned} M_{MTI} &= (A + D) \cdot S \\ &= \left(\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 2 & 2 & 4 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 1 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 3 & 3 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & 4 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 4 & 0 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 4 & 2 & 0 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 2 & 4 & 4 & 0 \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \\ 3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 2 & 2 & 3 & 4 & 2 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & 2 & 2 & 3 & 2 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 3 & 2 & 2 & 0 & 2 & 3 & 3 & 2 \\ 4 & 3 & 2 & 2 & 0 & 4 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 3 & 4 & 0 & 2 & 4 \\ 2 & 2 & 2 & 3 & 4 & 2 & 0 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 2 & 2 & 4 & 4 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \\ 3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 33 \\ 22 \\ 24 \\ 25 \\ 36 \\ 33 \\ 33 \\ 36 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Iz tega sledi, da je MTI indeks enak

$$MTI = \sum_{i=1}^8 [M_{MTI}]_i = 33 + 22 + 24 + 25 + 36 + 33 + 33 + 36 = 242.$$

--

V člankih [19, 25] je prikazana relacija med Schultzovim MTI in Wienerjevim W_e indeksom.

Trditev 10.1 Naj bo graf $G = (V, E)$ drevo z n točkami, S vektor stopenj grafa G , W_e Wienerjev indeks in MTI Schultzov indeks grafa G . Potem velja sledeče

$$MTI = 4 \cdot W_e + \sum_{i=1}^n [S]_i^2 - n(n-1).$$

Dokaz. MTI lahko zapišemo tudi v obliki $MTI = \sum_{j=1}^n e_j$, kjer je $e_j = \sum_{i=1}^n [S]_i ([A]_{ij} + [D]_{ij})$. Podobno lahko zapišemo W_e in sicer v obliki $W_e = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n W_{e_i}$, kjer je $W_{e_i} = \sum_{j=1}^n [D]_{ij}$ in je D matrika najkrajših razdalj grafa G .

Za par točk $i, j \in V$ definiramo U_{ji} kot vsoto vseh D_{ki} , tako da je k bolj oddaljen od i kot je j . Hitro se vidi, da je $U_{ii} = v_i$, ko je $i = j$. V primeru $i \neq j$ potem obstaja enolična pot dolžine $[D]_{ji}$ od točke i do točke j , ki ji sledi $v_j - 1$ različnih poti do preostalih sosednjih točk. Sledi, da je

$$U_{ji} = (v_j - 1)([D]_{ji} + 1) + \delta_{ij}, \tag{10.1}$$

kjer je δ_{ij} Kroneckerjev delta. Po drugi strani je vsota $\sum_{j=1}^n [U]_{ji}$ enaka

$$\sum_{j=1}^n [U]_{ji} = \sum_{k=1}^n [D]_{ki} = W_{e_i}.$$

Če v vsoto namesto $[U]_{ji}$ vstavimo vrednost (10.1), potem dobimo

$$\begin{aligned} W_{e_i} &= \sum_{j=1}^n [U]_{ji} \\ &= \sum_{j=1}^n ((v_j - 1)([D]_{ji} + 1) + \delta_{ij}) \\ &= \sum_{j=1}^n v_j [D]_{ji} - \sum_{j=1}^n [D]_{ji} + \sum_{j=1}^n (v_j - 1) + \sum_{j=1}^n \delta_{ij}. \end{aligned}$$

Zadnja vsota je enaka $\sum_{j=1}^n \delta_{ij} = 1$. Tretja vsota je enaka

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n (v_j - 1) &= \sum_{j=1}^n v_j - \sum_{j=1}^n 1 \\ &= \sum_{j=1}^n v_j - n \\ &= 2(n-1) - n = n-2, \end{aligned}$$

kjer smo upoštevali lemo o rokvanju, t.j. $\sum_{j=1}^n v_j = 2(n-1)$. Če vzamemo osnovni definiciji e_i in W_{e_i} , potem dobimo

$$W_{e_i} = e_i - \sum_{j=1}^n v_j [A]_{ij} - W_{e_i} + n - 1.$$

Vsoto lahko zapišemo v bolj priročno obliko

$$\sum_{j=1}^n v_j [A]_{ij} = \sum_{j=1}^n (v_j - 1) [A]_{ij} + \sum_{j=1}^n [A]_{ij} = v'_i + v_i.$$

Če to vstavimo v formulo dobimo

$$W_{e_i} = e_i - (v'_i + v_i) - W_{e_i} + n - 1.$$

Iz enačbe izrazimo e_i in vstavimo v formulo za MTI. Tako dobimo

$$\begin{aligned} \text{MTI} &= \sum_{i=1}^n e_i \\ &= \sum_{i=1}^n (2W_{e_i} + (v_i + v'_i) - N + 1) \\ &= 4W_e + \sum_{i=1}^n (v_i + v'_i) - n(n-1). \end{aligned}$$



Primer 10.2 Kot primer spet vzemimo graf na sliki 10.1. V primeru 10.1 smo pokazali, da je matrika razdalj D enaka

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 2 & 2 & 4 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 1 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 3 & 3 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & 4 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 4 & 0 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 4 & 2 & 0 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 2 & 4 & 4 & 0 \end{bmatrix}.$$

Wienerjev indeks tega grafa je enak $W_e = 66$. Sledi, da je MTI enak

$$\begin{aligned} \text{MTI} &= 4 \cdot W_e + \sum_{i=1}^n [S]_i^2 - n(n-1) \\ &= 4 \cdot 66 + (1^2 + 4^2 + 2^2 + 3^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2) - 8(8-1) \\ &= 264 + 34 - 56 \\ &= 242. \end{aligned}$$

--

Klavžar in Gutman sta v članku [16] izpostavila tudi zanimivo povezavo med Wienerjevim indeksom in molekularnim topološkim indeksom.

Trditev 10.2 Naj bo $G = (V, E)$ graf z n točkami in naj bo W_e Wienerjev indeks grafa G . Z δ označimo najmanjšo stopnjo točke in z Δ največjo stopnjo točke v grafu G . Potem velja sledeča relacija

$$2\delta W_e < \text{MTI} \leq 4\Delta W_e.$$

Enakost velja samo v primeru, ko je G polni graf.

Dokaz. Naj bo D matrika najkrajših razdalj in S vektor stopenj grafa G . Z $[D]_i$ označimo vsoto $\sum_{j=1}^n [D]_{ij}$. Kot smo že v dokazu trditve 10.1 nakazali, lahko MTI zapišemo kot

$$\text{MTI} = \sum_{i=1}^n [S]_i^2 + \sum_{i=1}^n [S]_i [D]_i.$$

Če poznamo δ in Δ , potem lahko rečemo, da je MTI med

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \delta^2 + \sum_{i=1}^n \delta [D]_i &\leq \text{MTI} \leq \sum_{i=1}^n \Delta^2 + \sum_{i=1}^n \Delta [D]_i \\ \delta^2 n + 2\delta W_e &\leq \text{MTI} \leq \Delta^2 n + 2\Delta W_e \\ \left(2 + \frac{\delta n}{W_e}\right) \delta W_e &\leq \text{MTI} \leq \left(2 + \frac{\Delta n}{W_e}\right) \Delta W_e \end{aligned}$$

Če upoštevamo, da za W_e velja

$$\frac{n(n-1)}{2} \leq W_e \leq \frac{n(n^2-1)}{6},$$

potem je

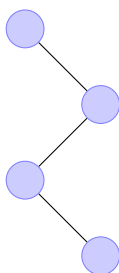
$$\begin{aligned} \left(2 + \frac{\delta n}{W_e}\right) \delta W_e &\leq \text{MTI} \leq \left(2 + \frac{\Delta n}{W_e}\right) \Delta W_e, \\ \left(2 + \frac{\delta n}{\frac{n(n^2-1)}{6}}\right) \delta W_e &\leq \text{MTI} \leq \left(2 + \frac{\Delta n}{\frac{n(n-1)}{2}}\right) \Delta W_e, \\ 2\left(1 + \frac{3\delta}{n^2-1}\right) \delta W_e &\leq \text{MTI} \leq 2\left(1 + \frac{\Delta}{n-1}\right) \Delta W_e. \end{aligned}$$

Če zanemarimo člen $1 + \frac{3\delta}{n^2-1}$, potem dobimo spodnjo mejo $2\delta W_e < \text{MTI}$.

Največja vrednost, ki jo lahko Δ zavzame je $n-1$. Sledi, da je $\frac{\Delta}{n-1} \leq 1$ in vrednost $1 + \frac{\Delta}{n-1} \leq 2$.

Tako dobimo zgornjo mejo $\text{MTI} \leq 4\Delta W_e$. ■

Primer 10.3 Wienerjev indeks za graf na sliki 10.2 je enak $W_e = \frac{n(n^2-1)}{6} = 4$. Graf vsebuje $n = 4$ točke,



Slika 10.2: Graf molekule butana.

največja in najmanjša stopnja v grafu sta $\Delta = 2$ in $\delta = 1$. Po trditvi 10.2 je MTI med

$$\begin{aligned} 2 \cdot \delta \cdot W_e &< \text{MTI} \leq 4 \cdot \Delta \cdot W_e, \\ 2 \cdot 1 \cdot 4 &< \text{MTI} \leq 4 \cdot 2 \cdot 4, \\ 8 &< \text{MTI} \leq 32. \end{aligned}$$

Običajno, poleg Δ in δ , poznamo tudi število točk v grafu. V tem primeru je boljše, če uporabimo kar

$$2 \left(1 + \frac{3\delta}{n^2-1}\right) \cdot \delta \cdot W_e \leq \text{MTI} \leq 2 \left(1 + \frac{\Delta}{n-1}\right) \cdot \Delta \cdot W_e,$$

$$2 \left(1 + \frac{3 \cdot 1}{4^2-1}\right) \cdot 1 \cdot 4 \leq \text{MTI} \leq 2 \left(1 + \frac{2}{4-1}\right) \cdot 2 \cdot 4,$$

$$\frac{48}{5} \leq \text{MTI} \leq \frac{80}{3},$$

$$9,6 \leq \text{MTI} \leq 26,\bar{3}.$$

--

Literatura

- [1] F. J. Ayres, *Theory and problems of matrices: including 340 solved problems, completely solved in detail (Schaum's outline series)*, McGraw-Hill, New York, 1967.
- [2] A. Bjerhammar, *Application of calculus of matrices to method of least squares with special reference to geodetic calculations*, Elanders, Göteborg, 1951.
- [3] D. M. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, *Spectra of graphs: theory and applications*, Academic Press, New York, 1980.
- [4] K. C. Das, B. Zhou, N. Trinajstić, Bounds on Harary index. *Journal of Mathematical Chemistry* **46** (2009), 1377–1393.
- [5] J. Devillers, A. T. Balaban, *Topological indices and related descriptors in QSAR and QSPAR*, CRC Press, Boca Raton, 2000.
- [6] M. V. Diudea, Walk numbers ${}^e W_m$: Wiener-type numbers of higher rank, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **36** (1996), 535–540.
- [7] M. V. Diudea, Cluj matrix invariants, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **37** (1997), 300–305.
- [8] M. V. Diudea, Cluj matrix, CJ_u : Source of various graph descriptors, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* **35** (1997), 169–183.
- [9] M. V. Diudea, I. Gutman, J. Lorentz, *Molecular topology*, Nova Science Pub Inc, New York, 2001.
- [10] M. V. Diudea, M. Topan, A. Graovac, Molecular topology. 17. layer matrixes of walk degrees, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **34** (1994), 1072–1078.
- [11] A. A. Dobrynin, Graphs having the maximal value of the Szeged index, *Croatica chemica acta* **70** (1997), 819–825.

- [12] G. H. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, 3rd edition, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1996.
- [13] I. Gutman, C. Rücker, G. Rücker, On walks in molecular graphs, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **41** (2001), 739–745.
- [14] O. Ivanciuc, T. S. Balaban, A. T. Balaban, Design of topological indices. Part 4. Reciprocal distance matrix, related local vertex invariants and topological indices, *Journal of Mathematical Chemistry* **12** (1993), 309–318.
- [15] P. V. Khadikar, N. V. Deshpande, P. P. Kale, A. A. Dobrynin, I. Gutman, G. Domotor, The Szeged index and an analogy with the Wiener index, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **35** (1995), 547–550.
- [16] S. Klavžar, I. Gutman, A comparison of the Schultz molecular topological index with the Wiener index, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **36** (1996), 1001–1003.
- [17] S. Klavžar, A. Rajapakse, I. Gutman, The Szeged and the Wiener Index of graphs, *Applied Mathematics Letters* **9** (1996), 45–49.
- [18] D. J. Klein, I. Lukovits, I. Gutman, On the definition of the hyper-Wiener index for cycle-containing structures, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **35** (1995), 50–52.
- [19] D. J. Klein, Z. Mihalić, D. Plavšić, N. Trinajstić, Molecular topological index: A relation with the Wiener index, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **32** (1992), 304–305.
- [20] D. J. Klein, M. Randić, Resistance distance, *Journal of Mathematical Chemistry* **12** (1993), 81–95.
- [21] B. Mohar, D. Babić, N. Trinajstić, A novel definition of the Wiener index for trees, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **33** (1993), 153–154.
- [22] B. Mohar, T. Pisanski, How to compute the wiener index of a graph, *Journal of Mathematical Chemistry* **2** (1988), 267–277.
- [23] E. H. Moore, On the reciprocal of the general algebraic matrix, *Bulletin of the American Mathematical Society* **26** (1920), 394–395.
- [24] R. Penrose, A generalized inverse for matrices, *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **51** (1955), 406–413.

- [25] D. Plavšić, S. Nikolić, D. J. Klein, N. Trinajstić, Relation between the Wiener index and the Schultz index for several classes of chemical graphs, *Croatica chemica acta* **66** (1993), 345–353.
- [26] D. Plavšić, S. Nikolić, N. Trinajstić, Z. Mihalić, On the Harary index for the characterization of chemical graphs, *Journal of Mathematical Chemistry* **12** (1993), 235–250.
- [27] M. Randić, Novel molecular descriptor for structure–property studies, *Chemical Physics Letters* **211** (1993), 478–483.
- [28] D. H. Rouvray, R. B. King, *Topology in chemistry: discrete mathematics of molecules*, Horwood Publishing Ltd, Chichester, 2002.
- [29] H. P. Schultz, Topological organic chemistry. 1. Graph theory and topological indices of alkanes, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **29** (1989), 227–228.
- [30] S. S. Tratch, M. I. Stankevich, N. S. Zefirov, Combinatorial models and algorithms in chemistry. The expanded Wiener number – a novel topological index, *Journal of Computational Chemistry* **11** (1990), 899–908.
- [31] H. Wiener, Structural determination of paraffin boiling points, *Journal of American Chemical Society* **69** (1947), 17–20.
- [32] B. Zhou, X. Cai, N. Trinajstić, On Harary index. *Journal of Mathematical Chemistry* **44** (2008), 611–618.