UNIWERSYTET MARII CURIE–SKŁODOWSKIEJ W LUBLINIE

Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki

Indeksy topologiczne w teorii grafów

Topological indices in the graph theory

Katarzyna Broniszewska

Rozprawa doktorska napisana
pod kierunkiem dr hab. Haliny Bielak
profesor nadzwyczajny UMCS

Lublin 2020

Serdeczne podziękowania pragnę złożyć
Pani dr hab. Halinie Bielak
profesor nadzwyczajny UMCS
za współpracę oraz pomoc udzieloną mi
w trakcie prowadzenia badań.

Streszczenie

Niniejsza praca doktorska została poświęcona indeksom topologicznym w teorii grafów. Opisano w niej indeks Wienera, indeksy pochodzące od indeksu Wienera, między innymi: zmodyfikowany indeks Wienera, biegunowy indeks Wienera, indeks hyper–Wiener oraz indeksy związane z acentrycznością, w szczególności indeks AEDS (z ang. adjacent eccentric distance sum index) oraz indeks EDS (z ang. eccentric distance sum index). Indeksy te mają bardzo szerokie zastosowanie w różnych dziedzinach nauki, między innymi w chemii oraz genetyce. Wielu autorów zajmowało się tematem indeksów topologicznych i jest on ciągle rozwijany poprzez kolejne, liczne i bardzo interesujące publikacje.

Praca zawiera trzy rozdziały. W rozdziale pierwszym zostały wprowadzone oznaczenia, symbole oraz definicje, które będą później wykorzystywane do prowadzenia rozważań.

Pierwsza część rozdziału drugiego prezentuje indeks Wienera oraz indeksy pochodzące od indeksu Wienera wraz z ich definicjami. Wprowadzono również najbardziej interesujące, dotychczasowe osiągnięcia w tej tematyce. Dalsza część rozdziału drugiego dotyczy uogólnionego biegunowego indeksu Wienera, dla którego opisano przypadek ogólny jego wartości maksymalnych dla dwudrzew ze specjalnymi założeniami. Podano również przykłady dwudrzew maksymalnych.

Uogólnionym biegunowym indeksem Wienera dla grafu $G = (V(G), E(G))$ nazywamy liczbę nieuporządkowanych par wierzchołków $\{u, v\}$ grafu G takich, że odległość pomiędzy u oraz v jest równa k.

Rozdział trzeci dotyczy indeksów związanych z acentrycznością. W szczególności opisano tutaj indeks AEDS oraz indeks EDS.

Indeks AEDS jest definiowany następująco:

$$\xi^{sv}(G) = \sum_{v \in V(G)} \frac{\varepsilon(v) D(v)}{\deg(v)}.$$

We fragmencie dotyczącym tego indeksu, zostały udowodnione twierdzenia pokazujące jego górne i dolne ograniczenia. Przywołano również część dotychczasowych wyników,

opisujących wartości indeksu w zależności od różnych parametrów. Ostatni podrozdział dotyczy transformacji grafowych oraz ich wpływu na wartości indeksu.

Fragment dotyczący indeksu EDS to twierdzenia pokazujące dolne ograniczenie dla tego indeksu. Zaprezentowano własności dla kaktusów oraz innych klas grafów. Indeks EDS jest definiowany następująco:

$$\xi^d(G) = \sum_{v \in V(G)} D(v)\varepsilon(v)$$

Wszystkie wyniki zostały dodatkowo zilustrowane przykładami oraz rysunkami, które ułatwią czytelnikowi zrozumienie tematu.

Abstract

This paper is dedicated to topological indices in the graph theory. Author describes Wiener index, indices originated from the Wiener index (modified Wiener index, Wiener polarity index, hyper-Wiener index) and indices related to eccentricity, in particular adjacent eccentric distance sum index and eccentric distance sum index. Those indices have a wide application in different fields of science, for example chemistry and genetics. There are a lot of very interesting papers in the literature concerning topological indices, as many authors were interested in this subject.

This disseration is divided into three chapters. In the first chapter there are introduced the necessary markings and definitions.

The second chapter concerns Wiener index and indices originated from the Wiener index. All indices have been defined and there were described some interesting results in this field. The further part of this chapter concerns generalized Wiener polarity index for which there is described a general case of its maximal values for 2-trees with some special assumptions. There were also given some examples of maximal 2-trees.

The generalized Wiener polarity index of a graph $G = (V(G), E(G))$ is a number of unordered pairs of vertices u, v of G such that the distance between u and v is equal to k.

The third chapter concerns indices related to eccentricity. In particular the are described: adjacent eccentric distance sum index and eccentric distance sum index.

Adjacent eccentric distance sum index is defined as below

$$\xi^{sv}(G) = \sum_{v \in V(G)} \frac{\varepsilon(v) D(v)}{\deg(v)}.$$

In the section concerning this index there are some theorems proved that shows upper and lower bounds. Moreover, there are some results given for the index value depending on different parameters. There are also graph transformations described and their influence on the index values.

Section concerning eccentric distance sum index is showing a lower bound for this index. There are properties for cactus shown and also for some other class of graphs. Eccentric distance sum index is defined as

$$\xi^d(G) = \sum_{v \in V(G)} D(v)\varepsilon(v)$$

All results are ilustrated with some examples and pictures which are here to facilitate the understanding of the subject.

Spis treści

Wstęp

Teoria grafów to szczególna dziedzina nauki, która łączy zarówno pojęcia matematyczne, jak i rozwiązania stosowane w innych dziedzinach nauki. Graf jest podstawowym obiektem rozważań teorii grafów. Służy on do przedstawiania i badania relacji pomiędzy obiektami. Za pierwszego badacza grafów uważa się matematyka i fizyka Leonharda Eulera, który zajmował się i ostatecznie rozstrzygnął zagadnienie mostów królewieckich. Pierwsze użycie określenia „graf" przypisywane jest angielskiemu matematykowi Jamesowi Josephowi Sylvesterowi. Wspomniany problem mostów królewieckich, uznaje się za najstarszy przykład zastosowania grafów. Leonhard Euler opublikował wyniki swojej pracy nad tym zagadnieniem w 1736 roku.

Grafy mają bardzo wiele praktycznych zastosowań przy rozwiązywaniu różnorodnych problemów i zadań z życia codziennego. Bardzo często są to zagadnienia na pozór niezwiązane z grafami. Dzięki nim można, na przykład, opisać sieć dróg z wierzchołkami reprezentującymi skrzyżowania i krawędziami reprezentującymi ulice lub sieć pomieszczeń i korytarzy w budynkach. Umożliwia to, na przykład, znajdowanie najlepszej drogi ze swojego położenia do ustalonego celu. Algorytmy grafowe są dziś bardzo istotne w programach obsługujących urządzenia GPS. W dużych korporacjach możemy wykorzystać grafy do opisania przepływu zadań zlecanych przez klientów - dzięki temu firma ma szansę na zwiększenie wydajności swoich pracowników. W informatyce teoria grafów jest wykorzystywana do tworzenia struktury stron internetowych. W neurologii może ona pomóc w przedstawieniu funkcjonowania całego układu nerwowego.

Szczególna klasa grafów, nazywana drzewami, jest wykorzystywana do opisu różnego rodzaju hierarchii. Drzewa binarne można wykorzystać do opisu drzewa genealogicznego czy mistrzostw sportowych. Za pomocą innych, związanych z grafami pojęć można opisać też, między innymi, rysunki obwodów, schematy blokowe i wiele, wiele innych. W ostatnich dziesięcioleciach zaczęto wykorzystywać grafy również w dziedzinach takich jak chemia, biologia, farmacja, informatyka, lingwistyka, geografia, architektura i inne.

Zagadnienie, które będzie poruszone w tej pracy to indeksy topologiczne w teorii grafów. W dziedzinach chemii, farmacji czy topologii molekularnej indeksy topologiczne (znane również jako indeksy/wskaźniki połączeń) są typem deskryptora molekularnego, który oblicza się bazując na grafie molekularnym danego związku chemicznego. Indeksy topologiczne są wartościami liczbowymi, które w pewien sposób charakteryzują topologię grafu. Są one wykorzystywane między innymi do badania zależności aktywności od struktury, gdzie aktywność biologiczna lub inne właściwości cząsteczek są skorelowane z ich strukturą chemiczną.

Indeksy topologiczne w teorii grafów to bardzo szerokie zagadnienie, stąd też w pracy opisane będą tylko niektóre z nich. Za najstarszy indeks topologiczny uważa się indeks Wienera. Indeks ten został przedstawiony w 1947 roku przez Harry'ego Wienera, a następnie nazwany jego nazwiskiem. W swojej pracy [90] Wiener opisał, że istnieje korelacja pomiędzy temperaturami wrzenia parafin a ich strukturą molekularną. Inni matematycy zajmują się indeksem Wienera od lat siedemdziesiątych dwudziestego wieku [29].

Indeksy topologiczne możemy podzielić na trzy klasy. Pierwsza klasa to indeksy oparte na rzędach grafów. Do tej klasy zaliczamy, między innymi: indeks zagrzebski oraz ogólny indeks Randića. Druga klasa obejmuje indeksy związane z odległością, na przykład: indeks Wienera, biegunowy indeks Wienera, indeks Szeged, indeks Balabana oraz indeks Harary'ego. Ostatnia, trzecia klasa to indeksy oparte na spektrum i są to, między innymi: energia Randića, energia grafu, energia incydencji, indeks HOMO–LUMO czy indeks Kirchhoffa. Ostatnio powstała jeszcze jedna, dodatkowa klasa indeksów topologicznych i są to indeksy oparte na acentryczności. W tej grupie znajdziemy na przykład: indeks ECI (z ang. eccentric connectivity index), AEDS (z ang. adjacent eccentric distance sum index), CEI (z ang. connective eccentricity index) oraz indeks EDS (z ang. eccentric distance sum index).

Rozprawa została podzielona na trzy rozdziały. Rozdział pierwszy zawiera podstawowe definicje, pojęcia i oznaczenia wykorzystywane w niniejszej pracy. Dodatkowo, są one zilustrowane wieloma przykładami, które ułatwią czytelnikowi zrozumienie danego zagadnienia.

W rozdziale drugim poruszone zostało zagadnienie indeksów pochodzących od indeksu Wienera, takich jak: zmodyfikowany indeks Wienera, indeks zmiennej Wienera, biegunowy indeks Wienera czy indeks hyper–Wiener. Oprócz podstawowych definicji, opisano również własności tych indeksów w postaci twierdzeń z dotychczasowych osiągnięć w tej dziedzinie. Jeden z podrozdziałów poświęcony jest biegunowemu indeksowi Wienera. Korzystając z tego indeksu I. Lukovits oraz W. Linert [72] wykazali pewne zależności dla węglowodoworów, a H. Hosoya [46] odnalazł jego interpretację fizyko–chemiczną. Wielu innych matematyków i chemików posługiwało się indeksami typu Wienera do opisania różnych prawidłowości zachodzących w przyrodzie. Korzystano również z różnych parametrów grafowych, na przykład: średnica, liczba wierzchołków stopnia 1 czy maksymalny stopień.

Głównym wynikiem rozdziału drugiego jest opisanie przypadku ogólnego dla wartości maksymalnych uogólnionego biegunowego indeksu Wienera dla dwudrzew ze specjalnymi założeniami. Przypadek ten w formie twierdzenia został przedstawiony w pracy autorstwa H. Bielak, K. Dąbrowskiej oraz K. Wolskiej (obecnie K. Broniszewskiej) [7]. Ponadto, opisano przykłady dwudrzew maksymalnych, które obrazują przedstawione rozważania.

Rozdział trzeci dotyczy indeksów związanych z acentrycznością. Jeden z podrozdziałów poświęcony jest indeksowi AEDS (z ang. adjacent eccentric distance sum index). Oprócz podstawowych definicji, opisano również własności tego indeksu oraz ograniczenia górne i dolne dla jego wartości. Ograniczenie górne jest ściśle związane z indeksem Wienera, którego definicja również została tam przedstawiona. W rozdziale zawarto ponadto, rezultaty uogólnione dla danych ograniczeń w postaci twierdzeń autorstwa H. Bielak oraz K. Wolskiej (obecnie K. Broniszewskiej) [8]. Twierdzenia te zostały dodatkowo udoskonalone i zapisane w formie kolejnych twierdzeń tych samych autorów. Co więcej, podano kilka przykładów klas grafów, dla których osiągane są dane ograniczenia.

Dalsze fragmenty pierwszego podrozdziału to przegląd oszacowań indeksu AEDS w zależności od znanych parametrów grafowych. Przedstawiono tutaj nieco uproszczony dowód twierdzenia 3.1.17 podanego przez H. Qu, S. Cao w 2015 roku.

Kolejna sekcja to analiza wpływu transformacji grafowych na wartości indeksu AEDS. Przedstawiono tutaj twierdzenie 3.1.23 współautorstwa H. Bielak oraz K. Broniszewskiej [6]. Pokazuje ono zachowanie indeksu AEDS w przypadku transformacji ściągania krawędzi.

Drugi podrozdział rozdziału trzeciego dotyczy indeksu EDS (z ang. eccentric distance sum index). Poza podstawowymi definicjami, opisano również własności tego indeksu dla różnych klas grafów, między innymi dla kaktusów. Indeks ten został przedstawiony w 2002 roku przez S. Guptę, M. Singh'a oraz A. K. Madana [33], którzy odkryli, że EDS, podobnie jak indeks Wienera, jest bardzo dobrym wskaźnikiem w sensie badań nad HIV oraz może dostarczyć cennych informacji do opracowania bezpiecznej i skutecznej metody leczenia tej choroby. Dalsze porównania tych dwóch indeksów, indeksu Wienera oraz indeksu EDS, pokazały, że ten drugi znacznie lepiej opisuje właściwości fizyczne, aniżeli chemiczne.

Głównymi wynikami drugiego podrozdziału są twierdzenia 3.2.10 oraz 3.2.11 współautorstwa H. Bielak oraz K. Broniszewskiej [5]. Pokazują one dolne ograniczenia indeksu EDS dla uogólnionych kaktusów oraz pewnej szczególnej klasy grafów opisanej w tej pracy.

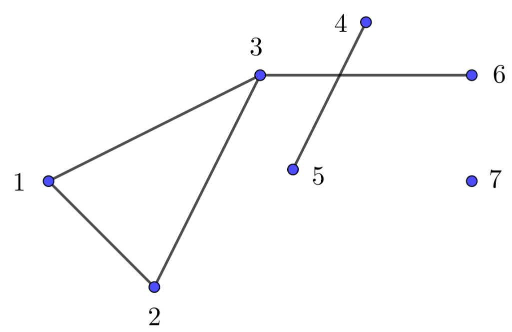
Większość z przedstawionych w tej rozprawie definicji i twierdzeń została zilustrowana licznymi rysunkami, które ułatwią zrozumienie opisywanego zagadnienia.

Rozdział 1

Wprowadzenie

W tym rozdziale zajmiemy się przypomnieniem podstawowych pojęć, definicji i oznaczeń z teorii grafów. Przedstawmy na początek definicję formalną grafu.

Grafem (grafem prostym) nazywamy parę $G = (V(G), E(G)) = (V, E)$. Elementy zbioru $V(G)$ nazywamy wierzchołkami, natomiast $E(G)$ jest zbiorem dwuelementowych podzbiorów zbioru $V(G)$, które nazywamy krawędziami. Krawędź $\{x, y\}$ będziemy zazwyczaj oznaczać przez xy. Przykład grafu G widzimy na rysunku 1.1.



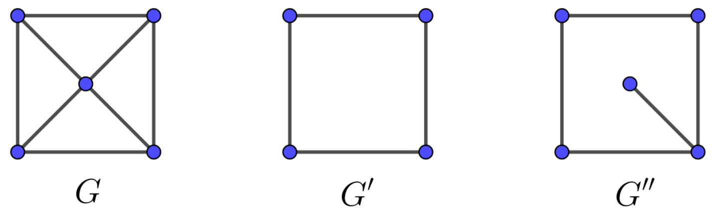
Rysunek 1.1: Graf G ze zbiorem wierzchołków $V(G) = \{1, ..., 7\}$ oraz zbiorem krawędzi $E(G) = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{3, 6\}, \{4, 5\}\}$.

Moc zbioru wierzchołków grafu G to jego **rząd**. Moc zbioru krawędzi, nazywamy **rozmiarem** grafu.

Niech $G = (V, E)$ oraz $G' = (V', E')$ będą grafami. Mówimy, że G' jest **podgrafem** grafu G, jeśli jest grafem oraz $V' \subseteq V$ i $E' \subseteq E$. Przykład widzimy na rysunku 1.2.

Ścieżką nazywamy niepusty graf $P = (V, E)$, taki, że

$$V = \{x_0, ..., x_k\}, E = \{x_0x_1, x_1x_2, ..., x_{k-1}x_k\},$$



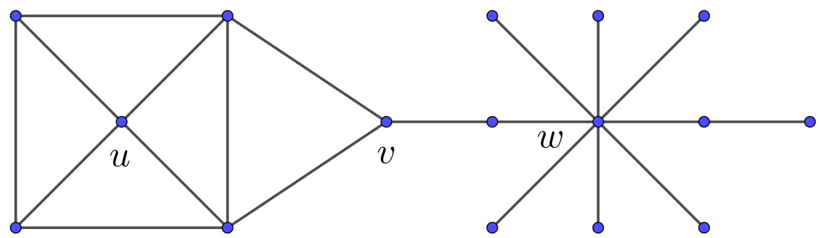
Rysunek 1.2: Graf G oraz jego podgrafy G' i G''.

gdzie wszystkie x_i są różnymi wierzchołkami. Poprzez P_n będziemy oznaczać ścieżkę o n wierzchołkach. **Długością ścieżki** nazywamy liczbę jej krawędzi. **Grafem spójnym** nazywamy graf, w którym dla każdej pary wierzchołków istnieje ścieżka, która je łączy.

Dwa wierzchołki x, y, należące do zbioru wierzchołków grafu G są **przyległe** (sąsiadujące), jeśli xy jest krawędzią w grafie G. Dwie krawędzie $e, f \in E(G)$ są przyległe, jeśli $|e \cap f| = 1$. Jeśli dwa wierzchołki (dwie krawędzie) nie są przyległe, to mówimy, że są **niezależne**.

Będziemy rozważać grafy proste i spójne. Niech $G = (V(G), E(G)) = (V, E)$ będzie grafem prostym i spójnym. Poprzez $\overline{G}$ będziemy rozumieć dopełnienie grafu G, czyli graf, którego zbiorem wierzchołków jest $V(G)$ i w którym dwa wierzchołki są sąsiednie wtedy i tylko wtedy, gdy nie są sąsiednie w grafie G.

Stopniem wierzchołka $v \in V(G)$ w grafie G (oznaczamy $\deg(v)$) nazywamy liczbę krawędzi zawierających wierzchołek v. Na rysunku 1.3 widzimy przykład grafu G, którego wierzchołki u, v oraz w mają stopnie $\deg(u) = 4$, $\deg(v) = 3$, $\deg(w) = 8$.



Rysunek 1.3: Przykład grafu G.

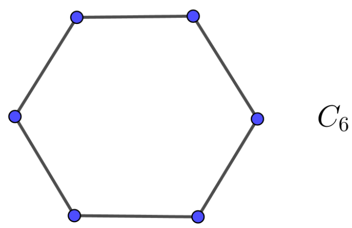
Symbolami $\delta(G), \Delta(G)$ będziemy oznaczać odpowiednio minimalny oraz maksymalny stopień w grafie G. Mówimy, że graf jest r–**regularny**, jeśli wszystkie jego wierzchołki są stopnia r. Graf jest $(\Delta(G), r)$–**regularny**, jeśli wszystkie jego wierzchołki są stopnia r lub $\Delta(G)$, $r \neq \Delta(G)$.

Przypomnijmy teraz definicję odległości pomiędzy wierzchołkami w grafie. **Odległość** $d(u, v)$ pomiędzy dwoma wierzchołkami w grafie G dla $u, v \in V(G)$ definiujemy jako długość najkrótszej ścieżki pomiędzy u oraz v. Ponadto, przez $D(v)$ rozumiemy **sumę wszystkich odległości** z wierzchołka $v \in V(G)$ do pozostałych wierzchołków w grafie G. Odległość pomiędzy wierzchołkami u oraz v na rysunku 1.3 wynosi $d(u, v) = 2$, natomiast pomiędzy wierzchołkami u oraz w wynosi $d(u, w) = 4$.

Acentrycznością wierzchołka v w grafie G nazywamy największą odległość pomiędzy danym wierzchołkiem v, a wszystkimi innymi wierzchołkami. Acentryczność oznaczamy jako $\varepsilon(v)$, $v \in V(G)$. Na rysunku 1.3 widzimy, że $\varepsilon(v) = 4$.

Najmniejszą acentryczność dla wszystkich wierzchołków w grafie oznaczamy przez $\mathrm{rad}(G)$ i nazywamy **promieniem grafu** G, natomiast największa acentryczność jest oznaczana przez $\mathrm{diam}(G)$ i nazywana **średnicą grafu** G.

Jeśli $P = x_0 ... x_{k-1}$ jest ścieżką oraz $k \geq 3$, to graf C, w którym do ścieżki P dodajemy dodatkową krawędź $x_{k-1}x_0$ nazywamy **cyklem**. Cykl o n wierzchołkach będziemy oznaczać poprzez C_n.



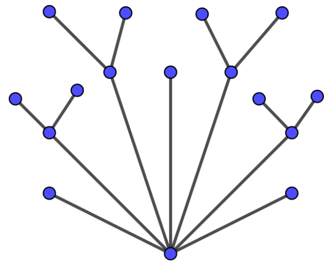
Rysunek 1.4: Przykład cyklu C_6.

Drzewem nazywamy graf, który jest acykliczny (nie zawiera cykli) i spójny. Drzewa o n wierzchołkach będziemy oznaczać poprzez T_n.

Długość najkrótszego cyklu w spójnym grafie G nazywamy **talią** grafu i oznaczamy przez $g(G)$.

Spójną składową grafu G nazywamy spójny podgraf grafu G, który nie jest zawarty w większym podgrafie spójnym grafu G.

Wierzchołek grafu G jest nazywany **punktem przecięcia** (wierzchołkiem rozcinającym), gdy po jego usunięciu wzrasta liczba spójnych składowych grafu.

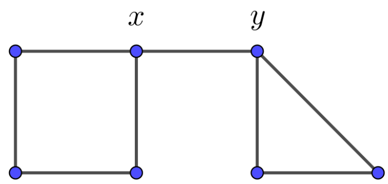


Rysunek 1.5: Przykład drzewa T_{16}.

Graf, który jest spójny, nietrywialny i nie ma żadnych punktów przecięcia jest nazywany **grafem nieseparowalnym**.

Blokiem nazywamy maksymalny podgraf grafu G, który nie posiada wierzchołków rozcinających.

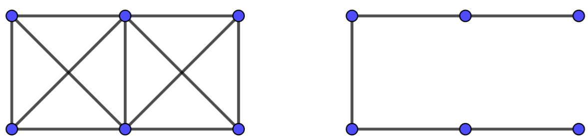
Mostem w grafie spójnym nazywamy krawędź, której usunięcie rozspójnia graf. Przykład widoczny jest na rysunku 1.6.



G

Rysunek 1.6: Przykład mostu xy w grafie G.

Drzewem rozpinającym spójnego grafu G nazywamy drzewo, które zawiera wszystkie wierzchołki grafu G, zaś zbiór krawędzi drzewa jest podzbiorem zbioru krawędzi grafu G. Na rysunku 1.7 widzimy graf G oraz przykład jego drzewa rozpinającego H.



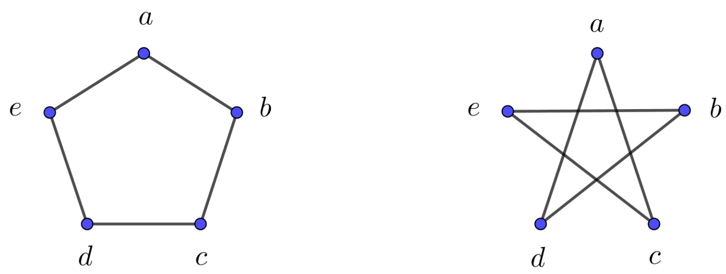
G H

Rysunek 1.7: Graf G oraz jego drzewo rozpinające H.

Kolorowanie wierzchołków grafu polega na przyporządkowaniu wierzchołkom kolorów w taki sposób, aby każda krawędź miała końce różnych kolorów (takie kolorowanie wierzchołkowe jest właściwe). **Optymalnym kolorowaniem** danego grafu jest kolorowanie właściwe zawierające najmniejszą możliwą liczbę kolorów.

Liczba chromatyczna to najmniejsza liczba k taka, że możliwe jest kolorowanie wierzchołków grafu k kolorami. Oznacza się ją symbolem $\chi(G)$.

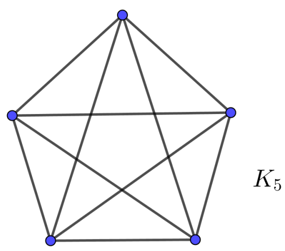
Niech $G = (V, E)$ oraz $G' = (V', E')$ będą grafami. Mówimy, że G oraz G' są **izomorficzne**, $G \cong G'$, jeśli istnieje bijekcja $f : V \to V'$ oraz $xy \in E$ wtedy i tylko wtedy, gdy $f(x)f(y) \in E'$ dla wszystkich $x, y \in V$. Przekształcenie f nazywamy izomorfizmem. Jeśli $G = G'$, to nazywamy je **automorfizmem**. Przykład grafów, które są izomorficzne widoczny jest na rysunku 1.8.



Rysunek 1.8: Przykład grafów izomorficznych.

Graf G jest **wierzchołkowo–przechodni**, jeśli dla dowolnych dwóch wierzchołków u oraz v, istnieje automorfizm f grafu G taki, że $f(u) = f(v)$. Graf, który jest wierzchołkowo-przechodni, jest regularny i $rad(G) = \varepsilon(w)$ dla każdego $w \in V(G)$.

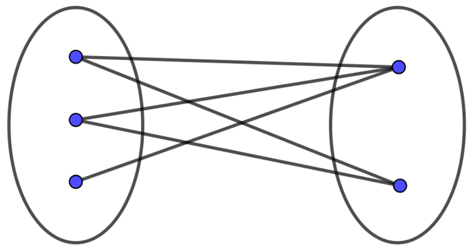
Graf pełny to graf, w którym dla każdej pary wierzchołków istnieje krawędź, która je łączy. Grafy pełne o n wierzchołkach będziemy oznaczać poprzez K_n.



Rysunek 1.9: Przykład grafu pełnego K_5.

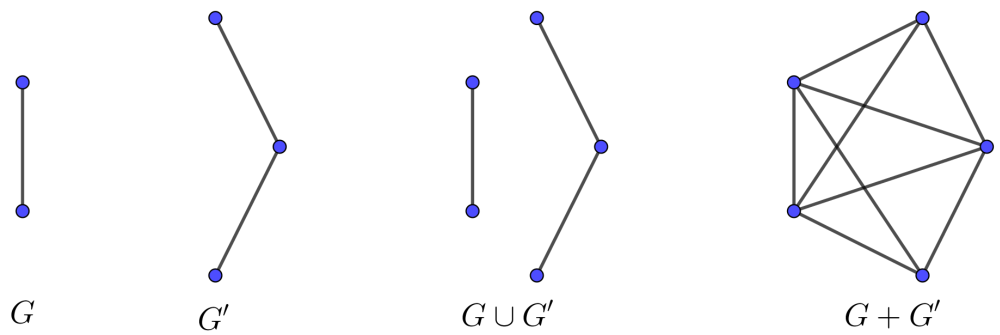
Niech n oraz k będą liczbami całkowitymi dodatnimi. **Graf Turána**, oznaczany przez $T_{n,k}$, jest grafem prostym rzędu n z maksymalną liczbą krawędzi, niezawierającym grafu pełnego K_{k+1}.

Graf G, którego zbiór wierzchołków można podzielić na dwa rozłączne zbiory V_1, V_2 tak, że krawędzie nie łączą wierzchołków tego samego zbioru nazywamy **grafem dwudzielnym**. Równoważnie, mówimy, że graf jest dwudzielny, jeśli nie zawiera cykli nieparzystej długości. Jeśli $|V_1| = r$, $|V_2| = s$, to graf pełny dwudzielny oznaczamy przez $K_{r,s}$. Graf $K_{1,n-1}$ nazywamy gwiazdą i będziemy go oznaczać przez S_n. Przykład grafu dwudzielnego widoczny jest na rysunku 1.10.



Rysunek 1.10: Przykład grafu dwudzielnego.

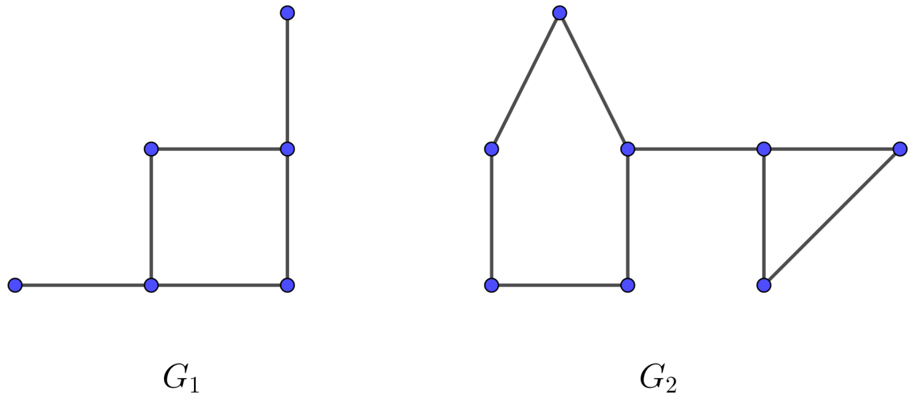
Niech $G = (V, E)$ oraz $G' = (V', E')$ będą grafami, gdzie $V \cap V' = \emptyset$. **Rozłączną sumą grafów** G oraz G' nazywamy graf $H = G \cup G'$, w którym $V(H) = V \cup V'$ oraz $E(H) = E \cup E'$. **Złączeniem** $G+G'$ **grafów** G oraz G' nazywamy ich rozłączną sumę wraz z krawędziami łączącymi wierzchołki ze zbioru V z wierzchołkami ze zbioru V', czyli $E(G + G') = E(G \cup G') \cup \{xy : x \in V, y \in V'\}$ Przykład widzimy na rysunku 1.11.



Rysunek 1.11: Przykład obrazujący rozłączną sumę grafów oraz ich złączenie.

Niech $G = (V, E)$ oraz $S \subseteq E(G)$. Wówczas $G - S$ oznacza, graf dla którego $V(G - S) = V(G)$, $E(G - S) = E(G) \backslash S$.

Kaktusem będziemy nazywać spójny graf, którego bloki są izomorficzne z cyklem lub ścieżką rzędu 2. Przykłady kaktusów zaprezentowane są na rysunku 1.12.



Rysunek 1.12: Kaktusy G_1 oraz G_2.

Wszystkie definicje, których nie podano w tej pracy, można znaleźć w podręczniku R. Diestel'a [21].

Rozdział 2

Indeksy typu Wienera

Indeks Wienera został po raz pierwszy przedstawiony w 1947 roku przez Harry'ego Wienera w jego pracy naukowej pod tytułem „Structural determination of paraffin points" [90]. Wiener użył następującej formuły do obliczenia temperatur wrzenia t_B parafin:

$$t_B = aW(G) + bWP(G) + c,$$

gdzie a, b i c są stałymi dla danej grupy izomerycznej (pojęcie chemiczne dotyczące związków chemicznych i ich cząsteczek), $W(G)$ jest równe sumie odległości pomiędzy wszystkimi wierzchołkami grafu G, natomiast $WP(G)$ to liczba nieuporządkowanych par wierzchołków w odległości 3. Ta prosta numeryczna reprezentacja cząsteczki okazała się bardzo użyteczna w zagadnieniu QSAR (z ang. Quantitative Structure – Activity Relationships) dotyczącym projektowania leków [20, 58]. Ponadto, ma również wiele zastosować w dziedzinach komunikacji, kryptologii i innych [23]. Dlatego właśnie $W(G)$ cieszy się taką popularnością i jest nazywany indeksem Wienera; $WP(G)$ natomiast nazywamy biegunowym indeksem Wienera. Od czasu powstania indeksu Wienera, to jest od 1947 roku wielu autorów zajmowało się tym indeksem oraz wprowadzało różne jego modyfikacje. Teraz nazywamy je indeksami „typu Wienera". Kilka z nich zostanie przedstawionych w tym rozdziale.

2.1 Indeksy pochodzące od indeksu Wienera

Zacznijmy od właściwych definicji indeksu Wienera i biegunowego indeksu Wienera. Warto tutaj zauważyć, że definicja indeksu Wienera w terminach odległości pomiędzy wierzchołkami grafu, była po raz pierwszy podana przez H. Hosoya'ę [45].

Indeksem Wienera nazywamy sumę odległości pomiędzy wszystkimi wierzchołkami w grafie G.

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u,v) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} D(v).$$

Poniżej przedstawione zostały znane już wartości indeksu Wienera dla ścieżki, gwiazdy i cykli. Grafy te były rozważane w latach: 1977 [9] oraz 1989 [76].

1. $W(P_n) = \binom{n+1}{3} = \frac{1}{6}n(n^2-1)$
2. $W(S_n) = (n-1)^2$
3. $W(C_{2n+1}) = (2n+1)\binom{n+1}{2}$
4. $W(C_{2n}) = n^3$

Biegunowym indeksem Wienera dla grafu $G = (V(G), E(G))$ nazywamy liczbę nieuporządkowanych par wierzchołków $\{u, v\}$ w grafie G takich, że $d(u, v) = 3$. Zapisujemy to następująco:

$$WP(G) = |\{\{u,v\} : d(u,v) = 3; u, v \in V(G)\}|.$$

Niech G będzie dowolnym grafem (niekoniecznie spójnym) ze zbiorem wierzchołków $V(G)$. Niech $e = \{x, y\}$ będzie krawędzią G łączącą wierzchołki x oraz y. Definiujemy zbiory:

$$\mathcal{N}_x(e) = \{u | u \in V(G), d(u,x) < d(u,y)\},$$
$$\mathcal{N}_y(e) = \{u | u \in V(G), d(u,x) > d(u,y)\}.$$

Niech $n_x(e) = |\mathcal{N}_x(e)|$, $n_y(e) = |\mathcal{N}_y(e)|$ będą odpowiednio wielkościami powyższych zbiorów. W innych słowach, $n_x(e)$ zlicza wszystkie wierzchołki G, które leżą bliżej krawędzi x. Analogicznie dla $n_y(e)$.

Lemat 2.1.1. *(H. Wiener 1947 [90]) Jeśli $G = (V(G), E(G))$ jest drzewem rzędu n, to dla każdej krawędzi $e = \{x, y\}$, $e \in E(G)$ zachodzi:*

$$n_x(e) + n_y(e) = n.$$

Wiener w swoim artykule [90] odkrył następujący rezultat i pokazał, że jego indeks może być liczony jak w twierdzeniu poniżej:

Twierdzenie 2.1.2. *(H. Wiener 1947 [90]) Jeśli T jest drzewem to dla indeksu Wienera zachodzi następująca równość:*

$$W(T) = \sum_{e \in E(T)} n_x(e) n_y(e).$$

Więcej szczegółów na temat twierdzenia 2.1.2 można znaleźć czytając, na przykład [23] z literatury.

W 1994 roku I. Gutman, Y.-N. Yeh i J. C. Chen [40] rozważali problem odwrotny do problemu indeksu Wienera. Autorzy próbowali ustalić, które liczby mogą być reprezentowane jako indeks Wienera dla grafu. Ostatecznie pokazali oni, że tylko dwie liczby nie mogą nimi być i są to 2 oraz 5. Dla grafów, które są dwudzielne rezultat był bardzo podobny z tym, że liczba wyjątków była większa. Żadna z liczb ze zbioru

$$\{2, 3, 5, 6, 7, 11, 12, 13, 15, 17, 19, 33, 37, 39\}$$

nie może reprezentować indeksu Wienera dla grafu dwudzielnego. Twierdzenie to zostało udowodnione w 1995 roku przez I. Gutmana oraz Y.-N. Yeh'a [39]. Przypuszczali oni również, ale nie byli w stanie udowodnić bardzo podobnego stwierdzenia dla drzew, gdzie jest aż 49 wyjątków. Stwierdzenie to udowodnili S. G. Wagner, H. Wang i G. Yu w 2006 roku [87,88].

W literaturze matematyczno–chemicznej można znaleźć wiele propozycji modyfikacji indeksu Wienera, na przykład [22, 71]. W 2001 roku S. Nikolić, N. Trijnastić i M. Randić [75] przedstawili **zmodyfikowany indeks Wienera**. Zdefiniowali go jak poniżej:

$$^{m}W(T) = \sum_{e \in E(T)} (n_x(e) n_y(e))^{-1}.$$

W tym samym artykule zilustrowali również kilka przykładów, aby pokazać, że ta modyfikacja prowadzi do ulepszenia modelu QSPR (z ang. Quantitative Structure-Property Relationship). Model ten, podobnie jak QSAR, dotyczy projektowania leków.

W 2004 roku I. Gutman, D. Vukicević i J. Žerownik [38] rozszerzyli definicję indeksu Wienera i zmodyfikowanego indeksu Wienera do

$$^{m}W_{\lambda}(T) = \sum_{e \in E(T)} (n_x(e) n_y(e))^{\lambda}.$$

W swoim artykule autorzy nazywają indeks $^{m}W_{\lambda}(T)$ **indeksem zmiennej Wienera**. Parametr λ może przyjmować wartości rzeczywiste. Oczywiście dla $\lambda = 1$ wartość $^{m}W_{\lambda}(T)$ jest równa standardowemu indeksowi Wienera, a dla $\lambda = -1$ jest to zmodyfikowany indeks Wienera wprowadzony przez S. Nikolića, N. Trijnastića i M. Randića.

Zauważmy, że jeśli $G = (V(G), E(G))$ jest spójnym jednocyklicznym grafem rzędu n z parzystym cyklem, to dla każdej krawędzi $e = \{x, y\}$, $e \in E(G)$, zachodzi zależność jak w lemacie 2.1.1, czyli $n_x(e) + n_y(e) = n$. Ciekawym zagadnieniem byłoby zbadanie indeksów pochodzących od indeksu Wienera z wykorzystaniem tej zależności. Może to być wstęp do dalszych badań w tym temacie.

Kolejną bardzo ważną modyfikacją indeksu Wienera jest **indeks hyper–Wiener**. Został on przedstawiony w 1993 roku przez M. Randića w [80] w sposób następujący:

$$WW(G) = \frac{1}{2} \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} (d(u,v) + d^2(u,v)) = \frac{1}{2} W(G) + \frac{1}{2} \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d^2(u,v).$$

Indeks hyper–Wiener bardzo gwałtownie zyskał popularność. Jego własności oraz kolejne rozszerzenia są opisane między innymi w [34, 35, 97].

Indeks Wienera i wszelkie jego modyfikacje mają bardzo ważne zastosowanie w chemii. Przykładem mogą być badania nad relacją pomiędzy indeksami typu Wienera i wewnętrzną energią molekularną przedstawione w [37]. Wiele innych prac zostało poświęconych tym tematom. Bardziej obszerne informacje można znaleźć w [37, 41, 70].

2.2 Indeksy Wienera jako indeksy stopnia rozgałęzienia

Bardzo ważną własnością indeksu Wienera jest poniższa nierówność udowodniona przez R. C. Entringera, D. E. Jacksona i D. A. Snydera w [29] pozycji z literatury:

$$W(P_n) > W(T) > W(S_n), \tag{2.1}$$

gdzie P_n, S_n, T odpowiednio oznaczają ścieżkę, gwiazdę oraz drzewo (różne od P_n i S_n) o $n > 4$ wierzchołkach. Warto tutaj zauważyć, że pośród wszystkich drzew, ścieżka P_n jest drzewem najmniej rozgałęzionym, natomiast gwiazda S_n jest drzewem najbardziej rozgałęzionym. Dzięki tej relacji indeks Wienera możemy nazwać indeksem stopnia rozgałęzienia, czyli indeksem przystosowanym do pomiaru stopnia rozgałęzienia cząsteczek szkieletu atomu węgla oraz przystosowanym do porządkowania izomerów w zależności od stopnia rozgałęzienia. Więcej szczegółów na temat problemu pomiaru rozgałęzienia można znaleźć w [42] pozycji z literatury.

I. Gutman i J. Žerovnik [42] w swojej pracy zademonstrowali, że również zmodyfikowany indeks Wienera ma wspomnianą wyżej własność, a co za tym idzie, jest indeksem rozgałęzienia i spełnia nierówność analogiczną do nierówności (2.1):

$$^{m}W(P_n) < {}^{m}W(T) < {}^{m}W(S_n).$$

Zmotywowani tymi wynikami I. Gutman, D. Vukičević i J. Žerovnik [38] w 2004 roku udowodnili następujące twierdzenie dla indeksu zmiennej Wienera.

Twierdzenie 2.2.1. *(I. Gutman, D. Vukičević, J. Žerovnik 2004 [38]) Jeśli T jest drzewem o n wierzchołkach, różnym od P_n i S_n, to dla każdego $n \geq 5$ i $\lambda < 0$ zachodzi następująca nierówność*

$$^{m}W_\lambda(P_n) < {}^{m}W_\lambda(T) < {}^{m}W_\lambda(S_n),$$

natomiast dla $\lambda > 0$

$$^{m}W_\lambda(P_n) > {}^{m}W_\lambda(T) > {}^{m}W_\lambda(S_n).$$

Szczegółowy dowód twierdzenia 2.2.1 można znaleźć w [38].

Potęgę k grafu G oznaczamy jako G^k i definiujemy jako graf z tym samym zbiorem wierzchołków co G, taki, że dwa wierzchołki są sąsiednie w G^k wtedy i tylko wtedy, gdy ich odległość wynosi w G co najwyżej k. Jeśli $k = 1$, to $G^k = G$.

W 2008 roku A. Xinhui i W. Baoyindureng [91] udowodnili następujące twierdzenie dla k-tej potęgi grafu G:

Twierdzenie 2.2.2. *(A. Xinhui, W. Baoyindureng 2008 [91]) Dla każdego drzewa rzędu n zachodzi*

$$W(S_n^k) \leq W(T^k) \leq W(P_n^k).$$

Podsumowując, zarówno indeks Wienera, jak i zmodyfikowany indeks Wienera oraz indeks zmiennej Wienera są indeksami stopia rozgałęzienia i mają szerokie zastosowanie w chemii.

2.3 Indeksy Wienera w transformacjach

Transformacje grafowe to zagadnienie, które jest bardzo często wykorzystywane w teorii grafów. Różne typy transformacji, mają różne znaczenie praktyczne w takich dziedzinach jak, na przykład informatyka czy chemia. Wykorzystuje się wiele technik do przekształcania grafów, aby pogrupować wierzchołki lub uprościć wygląd grafu. W sekcjach 2.3 oraz 2.4 opisano kilka transformacji oraz własności indeksów Wienera po danym przekształceniu.

Niech graf G będzie grafem o przynajmniej dwóch wierzchołkach lub wierzchołkiem odizolowanym. Dla nieujemnych liczb całkowitych p oraz q, niech $G(p, q)$ oznacza graf utworzony z grafu G, poprzez dołączenie do wierzchołka $w \in V(G)$ dwóch niezależnych ścieżek $P = wv_1v_2...v_p$ i $Q = wu_1u_2...u_q$ o długościach p oraz q, odpowiednio, gdzie wierzchołki $v_1, v_2, ..., v_p$ oraz $u_1, u_2, ..., u_q$ są nowymi wierzchołkami i są różne.

Wykorzystując opisane powyżej przekształcenie, I. Gutman, D. Vukičević i J. Žerovnik udowodnili pewną zależność dla indeksu zmiennej Wienera. Jest ona zapisana w twierdzeniu 2.3.1.

Twierdzenie 2.3.1. *(I. Gutman, D. Vukičević, J. Žerovnik 2004 [38]) Niech G będzie drzewem. Jeśli $p \geq q \geq 1$, to dla $\lambda > 0$*

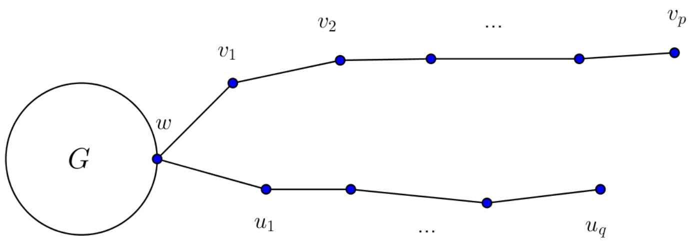
$${}^mW_\lambda(G(p, q)) \leq {}^mW_\lambda(G(p + 1, q - 1))$$

oraz dla $\lambda < 0$

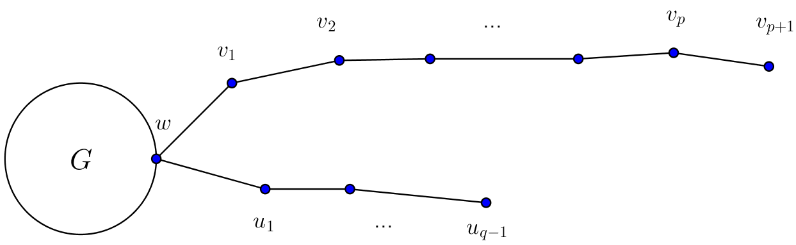
$${}^mW_\lambda(G(p, q)) \geq {}^mW_\lambda(G(p + 1, q - 1)),$$

gdzie obie równości zachodzą wtedy i tylko wtedy, gdy G jest odizolowanym wierzchołkiem.

Grafy $G(p,q)$ oraz $G(p+1,q-1)$ przedstawione są na rysunkach 2.1 oraz 2.2. Warto zwrócić uwagę, iż grafy różnią się długościami ścieżek, które są dołączane do wierzchołka $w \in V(G)$.



Rysunek 2.1: Graf $G(p,q)$.



Rysunek 2.2: Graf $G(p+1,q-1)$.

M. Liu i B. Liu zaprezentowali podobny wynik dla indeksu hyper–Wiener. Jest on przedstawiony w twierdzeniu 2.3.2.

Twierdzenie 2.3.2. *(M. Liu, B. Liu 2010 [69]) Jeśli $p \geq q \geq 1$, to*

$$WW(G(p,q)) \leq WW(G(p+1,q-1)),$$

gdzie równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy G jest odizolowanym wierzchołkiem.

Biegunowe indeksy Wienera zostaną zaprezentowane w transformacjach w kolejnej sekcji.

2.4 Biegunowe indeksy Wienera

W tej sekcji zajmiemy się przedstawieniem i kilkoma własnościami biegunowego indeksu Wienera oraz uogólnionego biegunowego indeksu Wienera.

2.4.1 Biegunowy indeks Wienera

Biegunowy indeks Wienera $WP(G)$ dla grafu, został wspomniany na początku tego rozdziału na stronie 15 i tam przedstawiono jego definicję. Autorzy [18, 19, 26, 65] zajmowali się tym indeksem dla drzew z różnymi parametrami takimi jak: liczba wierzchołków stopnia 1, średnica czy też maksymalny stopień. Zastosowania opisano między innymi w [12, 16] oraz [43, 46].

Przedstawimy teraz lemat podany przez W. Du, X. Li, Y. Shi [26] pokazujący sposób obliczania biegunowego indeksu Wienera dla drzew.

Lemat 2.4.1. *(W. Du, X. Li, Y. Shi 2009 [26]) Jeśli* $T = (V(T), E(T))$ *jest drzewem, to*

$$WP(T) = \sum_{uv \in E(T)} (\deg(u) - 1)(\deg(v) - 1).$$

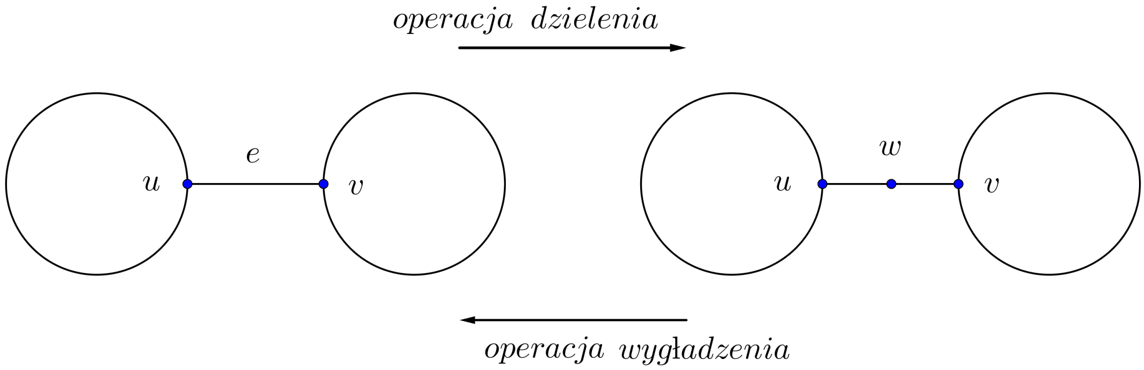
Korzystając z tego lematu można udowodnić ciekawe własności biegunowego indeksu Wienera dla pewnej transformacji. Zacznijmy od jej przedstawienia.

Niech $\mathcal{T}_n$ będzie zbiorem drzew rzędu n oraz niech $\mathcal{T}_{n,k}$, $n \geq 3$, będzie zbiorem drzew rzędu n z wierzchołkami stopnia 1 w ilości k, $2 \leq k \leq n-1$. Mówimy, że krawędź $e = uv$ jest krawędzią podzieloną, gdy jest usunięta z grafu i zastąpiona przez ścieżkę długości 2 łączącą wierzchołki u oraz v. Wewnętrzny wierzchołek tej ścieżki jest nowym wierzchołkiem i nazywamy go w. Operacją przeciwną do dzielenia krawędzi jest operacja wygładzenia wierzchołka w stopnia 2. Operacje nazywamy również transformacjami. Zostały one zilustrowane na rysunku 2.3.

Kolejne twierdzenia 2.4.2 oraz 2.4.3, choć bardzo podobne, to zostały przedstawione osobno, aby ułatwić czytelnikowi zrozumienie. Twierdzenie 2.4.2 dotyczy transformacji dzielenia, natomiast twierdzenie 2.4.3 dotyczy transformacji wygładzenia.

Twierdzenie 2.4.2. *(H. Deng, H. Xiao 2010 [17]) Niech* $T \in \mathcal{T}_n$. *Niech* $e = uv$ *będzie krawędzią drzewa* T *taką, że* $\deg(u) \leq \deg(v)$. *Niech* T' *będzie drzewem uzyskanym poprzez transformację dzielenia. Wtedy*

$$WP(T') - WP(T) = \begin{cases} \deg(v) - 1 & , \textit{gdy } \deg(u) = 1 \\ 1 & , \textit{gdy } \deg(u) = 2 \\ 3 - \deg(v) & , \textit{gdy } \deg(u) = 3 \end{cases}$$



Rysunek 2.3: Operacja dzielenia oraz operacja wygładzenia.

oraz dla $\deg(u) \geq 4$

$$WP(T') - WP(T) < 0.$$

Twierdzenie 2.4.3. *(H. Deng, H. Xiao 2010 [17]) Niech* $T \in \mathcal{T}_n$*. Niech* w *będzie wierzchołkiem stopnia* 2 *w drzewie* T*, którego sąsiadami są wierzchołki* u *i* v *oraz* $\deg(u) \leq \deg(v)$*. Niech* T' *będzie drzewem uzyskanym poprzez transformację wygładzenia* w*. Wtedy*

$$WP(T') - WP(T) = \begin{cases} 1 - \deg(v) & , \textit{gdy } \deg(u) = 1 \\ -1 & , \textit{gdy } \deg(u) = 2 \\ \deg(v) - 3 & , \textit{gdy } \deg(u) = 3 \end{cases}$$

oraz dla $\deg(u) \geq 4$

$$WP(T') - WP(T) > 0.$$

Dowody twierdzeń 2.4.2 oraz 2.4.3 zostały oparte na lemacie 2.4.1. Przedstawimy teraz twierdzenia zaprezentowane przez B. Liu, H. Hou i Y. Huang [65] w 2010 roku.

Niech $\mathcal{T}(n, \Delta)$, $n \geq 3$ będzie zbiorem wszystkich drzew z ilością wierzchołków n oraz maksymalnym stopniem Δ, $2 \leq \Delta \leq n - 1$.

Niech p będzie dodatnią liczbą całkowitą, natomiast n_1, n_2 liczbami całkowitymi nieujemnymi. Niech ponadto $S^{(p)}_{n_1,n_2}$ będzie drzewem powstałym ze ścieżki $v_1, v_2, ..., v_p$ poprzez dołączenie n_1 i n_2 wierzchołków odpowiednio do v_1 i v_p.

Wspomniane twierdzenia zostały przedstawione osobno, aby ułatwić ich zrozumienie i poprawić czytelność.

Twierdzenie 2.4.4. *(B. Liu, H. Hou, Y. Huang 2010 [65]) Biegunowy indeks Wienera przyjmuje następujące wartości:*

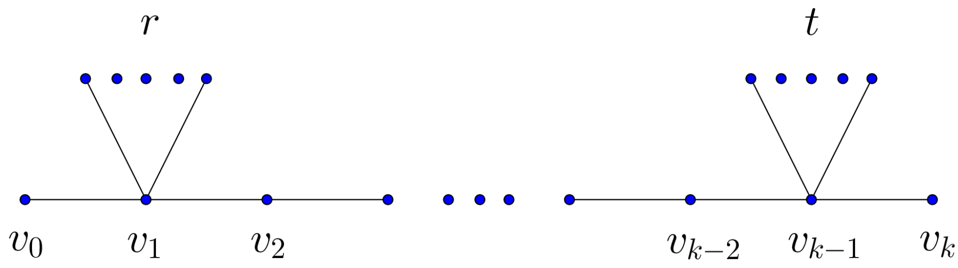
1. $\mathcal{T}(n, 2) = \{P_n\}$ *i* $WP(P_n) = n - 3$
2. $\mathcal{T}(n, n-1) = \{S_n\}$ *i* $WP(S_n) = 0$
3. $\mathcal{T}(n, n-2) = \{S^{(2)}_{n-3,1}\}$ *i* $WP(S^{(2)}_{n-3,1}) = n - 3$.

Twierdzenie 2.4.5. *(B. Liu, H. Hou, Y. Huang 2010 [65]) Biegunowy indeks Wienera przyjmuje następujące wartości:*

1. $\mathcal{T}_{n,2} = \{P_n\}$ *i* $WP(P_n) = n - 3$
2. $\mathcal{T}_{n,n-1} = \{S_n\}$ *i* $WP(S_n) = 0$
3. $\mathcal{T}_{n,n-2} = \{S^{(2)}_{n_1,n_2} | n_1 + n_2 = n - 2, n_1 \geq n_2 > 0\}$. *Wtedy dla* $T \in \mathcal{T}_{n,n-2}$ *zachodzi*
$$n - 3 \leq WP(T) \leq \left\lceil \frac{n-2}{2} \right\rceil \left\lfloor \frac{n-2}{2} \right\rfloor .$$
Pierwsza równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy $T \cong S^{(2)}_{n-3,1}$*, natomiast druga zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy* $T \cong S^{(2)}_{\lceil \frac{n-2}{2} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor}$.

W kolejnym lemacie 2.4.6 H. Deng, H. Xioa i F. Tang [19] pokazali, że biegunowy indeks Wienera dla drzew ze średnicą $k \geq 3$ wzrasta co najmniej o 1, gdy do T dodajemy nowy wierzchołek. Treść lematu znajduje się poniżej:

Lemat 2.4.6. *(H. Deng, H. Xiao, F. Tang 2010 [19]) Niech* T *będzie drzewem rzędu* n *ze średnicą* $k > 3$. T' *jest drzewem rzędu* $n + 1$ *utworzonym poprzez dodanie nowej krawędzi* xy *do* T *w taki sposób, że średnica* T' *jest nadal równa* k*, natomiast* $x \in V(T)$ *i* $y \notin V(T)$. *Wtedy*
$$WP(T') \geq WP(T) + 1$$
z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy jeden z wierzchołków przyległych do x *w* T *ma stopień równy* 2*, a pozostałe są stopnia* 1.



Rysunek 2.4: Drzewo $T(r, t)$.

Niech $T(r, t)$ będzie drzewem rzędu n o średnicy $k \geq 3$, jak na rysunku 2.4, gdzie $r \geq t \geq 0$ oraz $r+t = n-k-1$. Jest ono utworzone ze ścieżki $P_{k+1} = v_0v_1...v_k$ długości k, poprzez dodanie r krawędzi do wierzchołka v_1 oraz t krawędzi do wierzchołka v_{k-1}. Jeśli $k > 3$, to $\deg(v_2) = 2$, czyli z lematu 2.4.6 mamy:

$$WP(T(r,t)) = WP(P_{k+1}) + r + t = k - 2 + n - k - 1 = n - 3.$$

Warto tutaj zwrócić uwagę, iż każde drzewo T (różne od ścieżki P_{k+1}) rzędu n o średnicy k może zostać skonstruowane poprzez dodawanie krawędzi, dla których jeden z wierzchołków jest stopnia 1, krok po kroku.

Kolejne twierdzenie autorów H. Deng, H. Xioa i F. Tang [19] wskazuje ograniczenie dolne dla biegunowego indeksu Wienera dla drzew ze średnicą k.

Twierdzenie 2.4.7. *(H. Deng, H. Xiao, F. Tang 2010 [19]) Niech T będzie drzewem rzędu n ze średnicą k. Wtedy*

$$WP(T) \geq n - 3$$

z równością wtedy i tylko wtedy, gdy $T = T(r, t)$ dla $k > 3$ i $T(n-4, 0)$ dla $k = 3$.

Autorzy H. Deng, H. Xiao i F. Tang [19], podają w swojej pracy jeszcze inne, ciekawe rezultaty dotyczące, między innymi, maksymalnego biegunowego indeksu Wienera dla drzew rzędu n o średnicy k.

Bardzo ciekawe rezultaty są zaprezentowane również w [68] pozycji z literatury. Autorzy M. Liu oraz B. Liu prezentują bowiem relację pomiędzy biegunowym indeksem Wienera, a pierwszym i drugim indeksem zagrzebskim, indeksem Wienera oraz indeksem hyper–Wiener. Zanim jednak przejdziemy do samych relacji, zdefiniujemy uprzednio indeksy zagrzebskie.

Indeksy: **pierwszy indeks zagrzebski** $M_1(G)$ i **drugi indeks zagrzebski** $M_2(G)$ zostały po raz pierwszy zdefiniowane przez I. Gutmana i N. Trijnastića w ich artykule [36] w sposób następujący:

$$M_1(G) = \sum_{v \in V(G)} \deg^2(v),$$

$$M_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} \deg(u)\deg(v).$$

Bardziej szczegółowe informacje o tych indeksach można znaleźć w pracy [56] autorstwa A. Ilić'a oraz D. Stevanović'a .

Uogólnienie indeksów zagrzebskich dla $k \geq 3$ przedstawia wzór:

$$M_k(T) = \sum_{\substack{u,v \in V(G) \\ d(u,v)=k-1}} \deg(u)\deg(v).$$

Zaprezentujemy teraz twierdzenia pokazujące zależność pomiędzy biegunowym indeksem Wienera, a indeksami zagrzebskimi, indeksem Wienera oraz indeksem hyper-Wiener. Twierdzenie 2.4.8 wskazuje ograniczenie górne biegunowego indeksu Wienera, w zależności od pierwszego i drugiego indeksu zagrzebskiego.

Twierdzenie 2.4.8. *(M. Liu, B. Liu 2011 [68]) Jeśli $G = (V(G), E(G))$ jest grafem spójnym, takim, że $|V(G)| = n$, $|E(G)| = m$, to*

$$WP(G) \leq M_2(G) - M_1(G) + m,$$

gdzie równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy G jest drzewem lub $g(G) \geq 7$.

Kolejne twierdzenie 2.4.9 wskazuje ograniczenie dolne dla biegunowego indeksu Wienera, w zależności od pierwszego indeksu zagrzebskiego oraz indeksu Wienera.

Twierdzenie 2.4.9. *(M. Liu, B. Liu 2011 [68]) Jeśli $G = (V(G), E(G))$ jest grafem spójnym niezawierającym trójkątów ani czworokątów, takim, że $|V(G)| = n$, $|E(G)| = m$, to*

$$WP(G) \geq 2n(n-1) - m - M_1(G) - W(G),$$

gdzie równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy $\mathrm{diam}(G) \leq 4$.

Ostatnie z twierdzeń autorów M. Liu oraz B. Liu, które zostanie zaprezentowane w tej pracy, dotyczy biegunowego indeksu Wienera i jego dolnego ograniczenia w zależności od pierwszego indeksu zagrzebskiego oraz indeksu hyper-Wiener.

Twierdzenie 2.4.10. *(M. Liu, B. Liu 2011 [68]) Jeśli* $G = (V(G), E(G))$ *jest grafem spójnym niezawierającym trójkątów ani czworokątów, takim, że* $|V(G)| = n$, $|E(G)| = m$, *to*

$$WP(G) \geq \frac{5}{4}n(n-1) - \frac{1}{2}m - \frac{7}{8}M_1(G) - \frac{1}{4}WW(G),$$

gdzie równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy $\mathrm{diam}(G) \leq 4$.

Szczegółowe dowody powyższych twierdzeń oraz wiele innych, równie ciekawych zagadnień, można znaleźć w [68].

Przejdźmy teraz do uogólnienia rozważanego w tej sekcji biegunowego indeksu Wienera.

2.4.2 Uogólniony biegunowy indeks Wienera

Uogólniony biegunowy indeks Wienera został wprowadzony przez A. Ilić'a i M. Ilić'a [55] w 2013 roku. Zacznijmy od przedstawienia definicji.

Uogólnionym biegunowym indeksem Wienera dla grafu $G = (V(G), E(G))$ nazywamy liczbę nieuporządkowanych par wierzchołków $\{u, v\}$ grafu G takich, że odległość pomiędzy u oraz v jest równa k. Możemy zapisać to następująco:

$$W_k(G) = |\{\{u, v\} : d(u, v) = k; u, v \in V(G)\}|.$$

Warto zauważyć, iż istnieje prosta relacja pomiędzy indeksem Wienera, a uogólnionym biegunowym indeksem Wienera:

$$W(G) = \sum_{k=1}^{\mathrm{diam}(G)} kW_k(G).$$

Warto, ponadto, zwrócić uwagę na określenie **wielomianu Hosoya** (wielomianu Wienera) grafu G w x. Jest on zdefiniowany następująco:

$$W(G,x) = \sum_{u,v \in V(G)} x^{d(u,v)} = \sum_{k=1}^{\mathrm{diam}(G)} W_k(G) \cdot x^k.$$

Więcej informacji na temat wielomianu Hosoya można znaleźć w [43] pozycji z literatury.

Uogólniony biegunowy indeks Wienera dla drzew

W przypadku uogólnionego biegunowego indeksu Wienera dla drzew, niektóre wyniki są już znane. Zaprezentowano je w [55]. Warto tutaj wspomnieć, iż w tej pracy opisano również algorytmy do obliczania $W_k(T)$ dla drzew.

Niech T będzie drzewem rzędu n o rozmiarze m. Jeśli $k = 1$, to $W_1(T) = m$. Oczywiście $W_1(T) = m = n - 1$. Jeśli $k = 2$, to

$$\begin{aligned} W_2(T) &= \sum_{v \in V(T)} \binom{\deg(v)}{2} = \frac{\sum_{v \in V(T)} \deg^2(v)}{2} - m \\ &= \frac{M_1(T)}{2} - m, \end{aligned}$$

gdzie $M_1(T)$ jest pierwszym indeksem zagrzebskim.
Jeśli $k = 3$ mamy

$$\begin{aligned} W_3(T) &= \sum_{uv \in E(T)} (\deg(v) - 1)(\deg(u) - 1) \\ &= \sum_{uv \in E(T)} \deg(u)\deg(v) - \sum_{v \in V(T)} \deg^2(v) + m \\ &= M_2(T) - M_1(T) + m, \end{aligned}$$

gdzie $M_2(T)$ jest drugim indeksem zagrzebskim dla grafu T. Powyższą wartość otrzymujemy również z twierdzenia 2.4.8 jako prosty wniosek.

Przyjmijmy teraz, że $k \geq 3$. W sytuacji, gdy średnica grafu T jest mniejsza niż k, mamy $W_k(T) = 0$. Ten wynik jest osiągnięty dla wszystkich grafów, dla których $\mathrm{diam}(G) < k$.

Przy określaniu wartości $W_k(T)$ dla drzew, można zastosować indeksy zagrzebskie. Autorzy H. Lei, T. Li, Y. Shi oraz H. Wang pokazali w 2017 roku, w swojej pracy [64], relację, która została wskazana w następującym twierdzeniu 2.4.11.

Twierdzenie 2.4.11. *(H. Lei, T. Li, Y. Shi, H. Wang 2017 [64]) Niech T będzie drzewem oraz niech $k \geq 3$ będzie liczbą całkowitą. Wtedy zachodzi:*

$$W_k(T) = (-1)^k \left(\frac{k-1}{2} M_1(T) + \sum_{i=2}^{k-1} (-1)^{i+1}(k-i)M_i(T) - (n-1) \right).$$

Przytoczone w tej pracy własności i twierdzenia, dotyczące indeksu Wienera oraz indeksów od niego pochodzących, to tylko krótki wstęp do tematyki i zagadnień, które są ciągle rozwijane. Każdego roku publikowane są nowe prace z ciekawymi rezultatami. W 2018 roku rozpatrywano, między innymi, uogólniony biegunowy indeks Wienera dla drzew z określonymi warunkami [94]. W latach wcześniejszych, na przykład w roku 2016, powstały prace dotyczące biegunowego indeksu Wienera [48, 95]. We wspomnianej pracy J. Yue, H. Lei, Y. Shi [94], pokazują ograniczenie dolne dla uogólnionego biegunowego indeksu Wienera dla drzew z daną średnicą. Treść tego twierdzenia przeczytamy poniżej:

Twierdzenie 2.4.12. *(J. Yue, H. Lei, Y. Shi 2018 [94]) Niech T będzie drzewem rzędu n ze średnicą* $\mathrm{diam}(T)$.

1. *Jeśli* $\mathrm{diam}(T) \geq 2k-3$, *to* $W_k(T) \geq n-k$.

2. *Jeśli* $k \leq \mathrm{diam}(T) \leq 2k-4$, *to* $W_k(T) \geq \mathrm{diam}(T) + 1 - k$.

Równości w powyższym twierdzeniu 2.4.12 zachodzą dla drzew należących do pewnych rodzin grafów, które zdefiniowano w [94].

Z twierdzenia 2.4.12 dla $k = 3$, otrzymujemy następujący rezultat w postaci lematu 2.4.13:

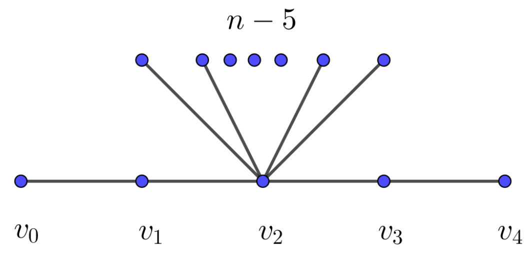
Lemat 2.4.13. *(H. Deng, H. Xiao, F. Tang 2010 [19]) Niech T będzie drzewem rzędu n ze średnicą* $\mathrm{diam}(T)$. *Wtedy*

$$W_3(T) \geq n-3$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $T = T(r,t)$ dla $\mathrm{diam}(T) > 3$ *oraz $T(n-4,0)$ dla* $\mathrm{diam}(T) = 3$.

Ponadto, J. Yue, H. Lei, Y. Shi podają w swojej pracy ograniczenie dolne dla uogólnionego biegunowego indeksu Wienera dla drzew ze średnicą równą 4.

Niech T^* będzie grafem otrzymywanym ze ścieżki $P_5 = v_0v_1...v_4$ poprzez dodanie $n-5$ wierzchołków stopnia 1 do v_2, tak jak na rysunku 2.5.



Rysunek 2.5: Graf T^*.

Lemat 2.4.14. *(J. Yue, H. Lei, Y. Shi 2018 [94]) Niech T będzie drzewem rzędu n ze średnicą 4. Wtedy*

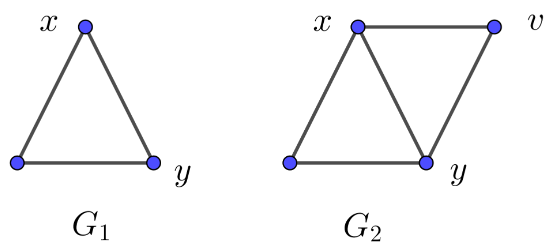
$$W_4(T) \geq 1$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $T = T^*$.

Przejdziemy teraz do rozważań dotyczących uogólnionego biegunowego indeksu Wienera dla dwudrzew. W tej części zaprezentowane będą rozważania prowadzące do znajdowania dwudrzew maksymalnych.

Uogólniony biegunowy indeks Wienera dla dwudrzew

Najmniejszym dwudrzewem jest graf pełny K_3 rzędu $n = 3$. Dwudrzewo rzędu n jest generowane z dwudrzewa G rzędu $n-1$ poprzez dołączenie nowego wierzchołka v i dwóch krawędzi $\{vx, vy\}$ w taki sposób, że $\{x, y\} \in E(G)$.

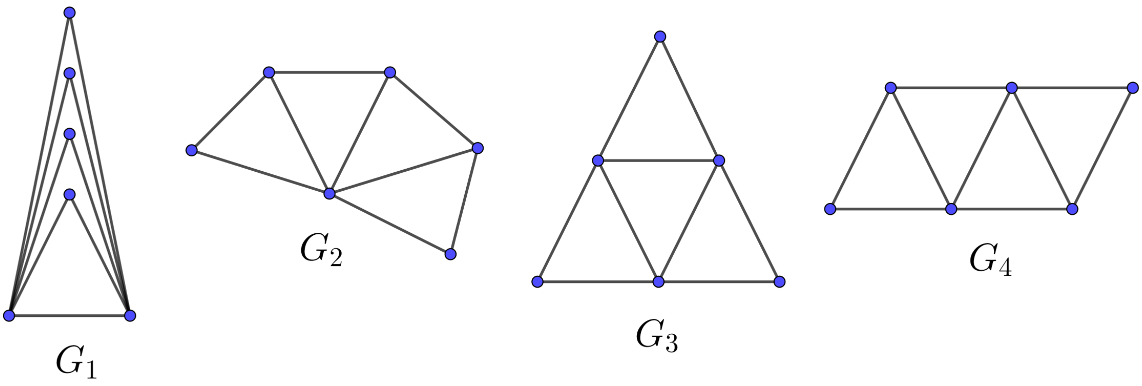


Rysunek 2.6: Dwudrzewa $G_1 = K_3$ oraz G_2.

Na rysunku 2.6 widzimy graf $G_1 = K_3$, czyli najmniejsze dwudrzewo oraz dwudrzewo G_2 rzędu 4 wygenerowane z G_1.

Niech G będzie dwudrzewem rzędu n o rozmiarze m. Z definicji dwudrzewa wynika, że $m = 2n - 3$. Wierzchołek danego dwudrzewa nazywamy wolnym, gdy ma stopień równy 2.

Dla $k = 1$ wartość $W_1(G)$ wynosi $W_1(G) = m = 2n - 3$. Dla $k = 2$ oraz $k = 3$ problem jest bardziej złożony i pozostaje kwestią otwartą. Porównując, na przykład, grafy na rysunku 2.7, które mają tę samą ilość krawędzi, widzimy, że $W_2(G_1) = W_2(G_2) = W_2(G_3) = 6$, natomiast $W_2(G_4) = 5$. Podobnie dla $k = 3$ otrzymujemy, że $W_3(G_1) = W_3(G_2) = W_3(G_3) = 0$ oraz $W_3(G_4) = 1$.



Rysunek 2.7: Przykłady dwudrzew.

Zajmiemy się teraz rozważaniem maksymalnych wartości $W_k(G)$, gdzie G jest dwudrzewem i $\mathrm{diam}(G) = k$ dla $k > 3$. Wszystkie wolne wierzchołki w grafie G dzielimy na grupy. Każda grupa będzie miała następującą własność:

$$A_i = \{v \in V(G) : \deg(v) = 2 \wedge \exists_{e_i=\{u_i,w_i\}}; vu_i, vw_i \in E(G)\}$$

dla $i = 1, 2, ...$ Odległość pomiędzy różnymi wierzchołkami w każdej grupie jest równa 2. Przyjmijmy, że mamy p grup wolnych wierzchołków o rozmiarach: $a_1, a_2, ..., a_p$ oraz $a_1 + a_2 + ... + a_p = q$. Mamy wtedy $n - 2(k-1) \geq q \geq 2$. Przyjmujemy, że odległość pomiędzy każdą parą wolnych wierzchołków nie z tej samej grupy jest równa k i żaden inny wierzchołek nie ma acentryczności równej k. Dlatego

$$W_k(G) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p} a_i(q - a_i) = \frac{1}{2}\left(q^2 - \sum_{i=1}^{p} a_i^2\right). \tag{2.2}$$

W przypadku, gdy odległość pomiędzy grupą A_i oraz A_j dla $i \neq j$ jest mniejsza niż k, uogólniony biegunowy indeks Wienera jest mniejszy, niż ten zaprezentowany powyżej.

Rozpatrzmy teraz przypadek, gdy $p = 2$. Wtedy mamy $W_k(G) = a_1 \cdot a_2$, przy założeniu, że tylko wierzchołki wolne mają acentryczność równą k i żaden inny wierzchołek nie ma takiej acentryczności. Ta wartość jest maksymalna dla $a_1 + a_2 = n - 2(k-1)$, czyli dla $a_1 = \left\lfloor \frac{n-2(k-1)}{2} \right\rfloor$ oraz $a_2 = \left\lceil \frac{n-2(k-1)}{2} \right\rceil$. Przy tych założeniach otrzymujemy

$$
\begin{aligned}
W_k(G) &= \left\lfloor \frac{n-2(k-1)}{2} \right\rfloor \left\lceil \frac{n-2(k-1)}{2} \right\rceil = \left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor - (k-1) \right) \left(\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - (k-1) \right) \\
&= \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - (k-1) \left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor + \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil \right) + (k-1)^2,
\end{aligned}
$$

zatem

$$
W_k(G) = \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil - (k-1)(n-(k-1)). \tag{2.3}
$$

Przejdźmy teraz do przypadku, gdy $p > 2$ i $k > 2$. Rozważamy najpierw parzyste k.

Mamy $q = \sum_{i=1}^{p} a_i$ oraz

$$
n \geq 2 + 2p\left(\frac{k}{2} - 1\right) + \sum_{i=1}^{p} a_i = 2 + p(k-2) + \sum_{i=1}^{p} a_i,
$$

a z tego wynika, że

$$
n \geq 2 + p(k-2) + q. \tag{2.4}
$$

Z nierówności (2.4) oraz $2 < p \leq q$ wnioskujemy, iż $p \leq \frac{n-2-q}{k-2}$, zatem $p \leq \frac{n-2-p}{k-2}$. Po przemnożeniu obu stron przez $k-2$, otrzymujemy, że liczba grup

$$
p \leq \frac{n-2}{k-1}. \tag{2.5}
$$

Z nierówności Cauchy - Schwarz'a wynika, że

$$
\left(\sum_{i=1}^{p} a_i \right)^2 \leq p \sum_{i=1}^{p} a_i^2, \quad \text{czyli} \quad \sum_{i=1}^{p} a_i^2 \geq \frac{q^2}{p}.
$$

Zastosujemy nierówność Cauchy - Schwarz'a do wyrażenia (2.2):

$$
W_k(G) = \frac{1}{2}\left(q^2 - \sum_{i=1}^{p} a_i^2 \right) \leq \frac{1}{2}\left(q^2 - \frac{q^2}{p} \right) = \frac{1}{2} q^2 \left(1 - \frac{1}{p} \right). \tag{2.6}
$$

Dalej, po wykorzystaniu zależności $q \leq n - 2 - p(k-2)$ ze wzoru (2.4) mamy:

$$W_k(G) \leq \frac{1}{2}(n - 2 - p(k-2))^2 \left(1 - \frac{1}{p}\right) \tag{2.7}$$

Zatem

$$W_k(G) \leq \frac{1}{2} f(p), \tag{2.8}$$

gdzie

$$f(p) = (n - 2 - p(k-2))^2 \left(1 - \frac{1}{p}\right). \tag{2.9}$$

Należy tutaj zwrócić uwagę, iż maksymalny uogólniony biegunowy indeks Wienera $W_k(G)$ jest otrzymywany w przypadku, gdy zachodzą równości w (2.6) oraz w (2.4). Zajmiemy się teraz tym przypadkiem, pamiętając o założeniu, że tylko wierzchołki należące do grup mają acentryczność równą k, a inne wierzchołki mają acentryczność mniejszą niż k.

Aby wyznaczyć wartości maksymalne, korzystamy z pierwszej pochodnej funkcji $f(p)$. Pochodna ta jest równa:

$$f'(p) = (n - 2 - p(k-2))h(p),$$

gdzie

$$\begin{aligned} h(p) &= 2(2-k)\left(1 - \frac{1}{p}\right) + \frac{n - 2 - p(k-2)}{p^2} \\ &= \frac{2(2-k)(p-1)p + n - 2 - p(k-2)}{p^2}. \end{aligned}$$

Otrzymujemy, że $f'(p) = 0$, gdy $h(p) = 0$ lub $n - 2 - p(k-2) = 0$. Drugi przypadek jednak odrzucamy, ponieważ $p = \frac{n-2}{k-2}$ jest poza zakresem wyznaczonym przez wzór (2.5). Zatem $f'(p) = 0$, wtedy i tylko wtedy, gdy $h(p) = 0$. Podobnie, $f'(p) > 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $h(p) > 0$, czyli równoważnie

$$\frac{h(p) \cdot p^2}{k-2} > 0.$$

Z definicji $h(p)$ otrzymujemy

$$-2(p-1)p - p + \frac{n-2}{k-2} > 0,$$

zatem

$$2(p-1)p + p - \frac{n-2}{k-2} < 0.$$

Oznaczamy

$$g(p) = 2p^2 - p - \frac{n-2}{k-2}.$$

Zatem $f'(p) > 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $g(p) < 0$ oraz $f'(p) = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $g(p) = 0$. Obliczamy pierwiastki trójmianu kwadratowego $g(p)$ i otrzymujemy:

$$p_1 = \frac{1}{4}\left(1 - \sqrt{\frac{8(n-2)}{k-2} + 1}\right) \quad \text{oraz} \quad p_2 = \frac{1}{4}\left(1 + \sqrt{\frac{8(n-2)}{k-2} + 1}\right).$$

Pierwiastek p_1 ma wartość ujemną, a zatem do naszych obliczeń wybieramy p_2 i oznaczamy przez $\hat{p}$.

$$\hat{p} = \frac{1}{4}\left(1 + \sqrt{\frac{8(n-2)}{k-2} + 1}\right) \tag{2.10}$$

Wnioskujemy, iż $f'(p) = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $p = \hat{p}$. Ponadto, $g(p) < 0$, równoważnie $f'(p) > 0$, wtedy i tylko wtedy, gdy $p < \hat{p}$ oraz $g(p) > 0$, równoważnie $f'(p) < 0$, gdy $p \in (\hat{p}, \frac{n-2}{k-1})$ (ze wzoru (2.5)). Zatem funkcja f jest malejąca w przedziale $p \in (\hat{p}, \frac{n-2}{k-1})$. Liczba grup wolnych wierzchołków p jest całkowita, stąd też w przypadku, gdy $\hat{p}$ nie jest liczbą całkowitą, będziemy rozważali $p = \lceil \hat{p} \rceil$ lub $p = \lfloor \hat{p} \rfloor$ w zależności od tego, która z wartości: $f(\lceil \hat{p} \rceil)$ czy $f(\lfloor \hat{p} \rfloor)$ jest większa. Dążymy do tego, aby zachodziła równość w (2.8), czyli

$$W_k(G) = \frac{1}{2}\max\{f(\lfloor \hat{p} \rfloor), f(\lceil \hat{p} \rceil)\}. \tag{2.11}$$

Mamy zatem dwa przypadki.

Przypadek 1. Jeśli $f(\lceil \hat{p} \rceil) < f(\lfloor \hat{p} \rfloor)$, to będziemy rozpatrywać sytuację, gdy $p = \lfloor \hat{p} \rfloor$. Wtedy

$$p \leq \hat{p} < p + 1.$$

Podstawiamy teraz wartość $\hat{p}$ ze wzoru (2.10)

$$p \leq \frac{1}{4}\left(1 + \sqrt{\frac{8(n-2)}{k-2} + 1}\right) < p + 1,$$

a następnie wykonujemy obliczenia i otrzymujemy przedział, w którym mieszczą się wartości n:

$$p(2p-1)(k-2) + 2 \leq \mathbf{n} < p(2p-1)(k-2) + 2 + (4p+1)(k-2). \tag{2.12}$$

Przypadek 2. Jeśli $f(\lceil \hat{p} \rceil) \geq f(\lfloor \hat{p} \rfloor)$, to będziemy rozpatrywać sytuację, gdy $p = \lceil \hat{p} \rceil$. Mamy wtedy

$$p - 1 < \hat{p} \leq p.$$

Po wykonaniu obliczeń dostajemy:

$$p(2p-1)(k-2)+2-(4p-3)(k-2)<\mathbf{n}\leq p(2p-1)(k-2)+2. \tag{2.13}$$

Przykład

Zaprezentujemy teraz przykład pokazujący dwudrzewa maksymalne dla szczególnego przypadku. Rozpatrujemy dwudrzewa o średnicy k, $\text{diam}(G)=k$, w których są co najmniej trzy grupy wolnych wierzchołków $p\geq 3$ oraz tylko wierzchołki należące do grup mają acentryczność równą k.

Załóżmy, że $k=2b+2$ dla dowolnej liczby naturalnej $b\geq 1$ oraz $n=bt^2+2$ dla pewnej naturalnej liczby t. Z (2.10) dla parzystego t mamy wówczas:

$$\hat{p}=\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}.$$

Wyznaczymy teraz $\lfloor\hat{p}\rfloor$ oraz $\lceil\hat{p}\rceil$, aby później porównać $f(\lfloor\hat{p}\rfloor)$ oraz $f(\lceil\hat{p}\rceil)$. Mamy

$$\lfloor\hat{p}\rfloor=\left\lfloor\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}\right\rfloor. \tag{2.14}$$

Pokażemy, że $\left\lfloor\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}\right\rfloor=\frac{t}{2}$. W tym celu sprawdzimy, czy prawdziwe są nierówności: $\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}<\frac{t}{2}+1$ oraz $\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}\geq\frac{t}{2}$. Z pierwszej nierówności otrzymujemy:

$$\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}<\frac{t}{2}+1$$

$$4t^2+1<4t^2+12t+9,$$

co jest oczywiście prawdą. Z drugiej nierówności mamy

$$\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}\geq\frac{t}{2}$$

$$4t^2+1\geq 4t^2-4t+1,$$

co również jest prawdą. Możemy zatem napisać, iż dla parzystego t zachodzi:

$$\lfloor\hat{p}\rfloor=\left\lfloor\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{4t^2+1}\right\rfloor=\frac{t}{2}. \tag{2.15}$$

Podobnie, korzystając z powyższych obliczeń możemy wyznaczyć, iż

$$\lceil \hat{p} \rceil = \frac{t}{2} + 1.$$

Z formuły (2.9) obliczamy $f(\lfloor \hat{p} \rfloor)$ oraz $f(\lceil \hat{p} \rceil)$ i otrzymujemy:

$$f(\lfloor \hat{p} \rfloor) = b^2 t(t-2)(t-1)^2, \tag{2.16}$$

$$f(\lceil \hat{p} \rceil) = b^2 \left(t^2 - t - 2\right)^2 \frac{t}{t+2}.$$

Porównując powyższe wartości widzimy, że $f(\lceil \hat{p} \rceil) \leq f(\lfloor \hat{p} \rfloor)$, dla $t \geq 2$. Będziemy rozpatrywać tę, która jest większa, czyli $f(\lfloor \hat{p} \rfloor)$. Wartość $f(\lfloor \hat{p} \rfloor)$ jest liczbą parzystą.

Zakładamy, że wszystkie grupy są równoliczne, a ich liczebność wynosi $a \geq 1$. Wtedy $q = p \cdot a$. W naszym przypadku liczba grup $p = \lfloor \hat{p} \rfloor$, czyli

$$q = \frac{t}{2} \cdot a.$$

Obliczamy wartość $W_k(G)$ korzystając z (2.6):

$$W_k(G) = \frac{1}{2}\left(q^2 - \sum_{i=1}^{p} a_i^2\right) = \frac{1}{2}\left(\left(\frac{t}{2}a\right)^2 - \frac{t}{2}a^2\right) = \frac{a^2 t(t-2)}{8}. \tag{2.17}$$

Maksymalny uogólniony biegunowy indeks Wienera otrzymamy w przypadku równości jak poniżej:

$$W_k(G) = \frac{1}{2} f(\lfloor \hat{p} \rfloor).$$

Podstawiamy zatem wartości z (2.17) oraz (2.16) i otrzymujemy:

$$\frac{a^2 t(t-2)}{8} = \frac{1}{2} b^2 t(t-2)(t-1)^2.$$

Z tej równości wnioskujemy, że

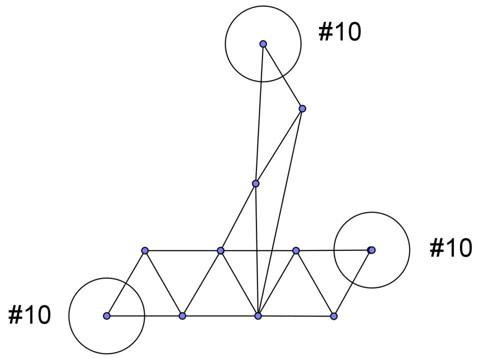
$$a = 2b(t-1).$$

Korzystając z (2.12) wyznaczamy przedział na wartości n:

$$t(t-1)b + 2 \leq n < t(t-1)b + 2 + (2t+1)2b. \tag{2.18}$$

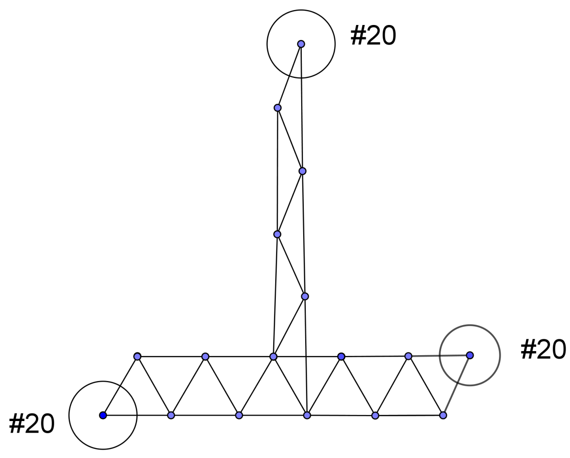
Biorąc teraz dowolną parzystą liczbę t oraz b ze zbioru liczb naturalnych i podstawiając je do wyznaczonych wzorów, otrzymamy wartości pozwalające skonstruować dwudrzewo z maksymalnym uogólnionym biegunowym indeksem Wienera.

Weźmy, na przykład, $b = 1$ oraz $t = 6$. Wtedy $n = 6^2 + 2 = 38$ (przedział z (2.18) to $32 \leq n < 58$), $k = 4$, $\lfloor \hat{p} \rfloor = 3$ oraz $a = 10$. Otrzymaliśmy maksymalną wartość uogólnionego biegunowego indeksu Wienera $W_4(G) = 3 \cdot 10^2$ dla dwudrzewa G z parametrami $n = 38$, $k = 4$, $p = 3$ i $a = |A_i| = 10$, $i = 1, 2, 3$. Jest ono zaprezentowane na rysunku 2.8.



Rysunek 2.8: Przykład dwudrzewa G rzędu $n = 38$ z $k = 4$ oraz trzema grupami A_i, gdzie $|A_i| = 10$ dla $i = 1, 2, 3$.

Załóżmy teraz, że $b = 2$ oraz $t = 6$. Wtedy $k = 6$, $n = 2 \cdot 6^2 + 2 = 74$ (przedział otrzymywany w (2.18) to $62 \leq n < 114$), $\lfloor \hat{p} \rfloor = 3$ oraz $a = 20$. Otrzymujemy zatem maksymalną wartość uogólnionego biegunowego indeksu Wienera $W_6(G) = 3 \cdot 20^2$ dla dwudrzewa G z parametrami $n = 74$, $k = 6$, $p = 3$ oraz $a = |A_i| = 20$ dla $i = 1, 2, 3$. Jest ono zaprezentowane na rysunku 2.9.



Rysunek 2.9: Dwudrzewo rzędu $n = 74$ z $k = 6$ oraz trzema grupami A_i, gdzie $|A_i| = 20$ dla $i = 1, 2, 3$.

Przypadek ogólny

Niech n oraz k będą liczbami całkowitymi. Niech $k \geq 4$ będzie liczbą parzystą. Opiszemy teraz przypadek ogólny dla konstruowania dwudrzew z maksymalnym uogólnionym biegunowym indeksem Wienera $W_k(G)$, przy założeniu, że tylko wierzchołki należące do grup wolnych wierzchołków mają acentryczność równą k i żaden inny wierzchołek nie ma takiej acentryczności. Przypadek ten, w formie twierdzenia, został opisany w pracy autorstwa H. Bielak, K. Dąbrowskiej oraz K. Wolskiej (obecnie K. Broniszewskiej) w 2015 [7].

Korzystając z wcześniejszych rozważań przedstawionych w rozdziale 2.4.2 wiemy, że

$$\lfloor \hat{p} \rfloor \leq \hat{p} \leq \lceil \hat{p} \rceil,$$

gdzie $\hat{p}$ jest zdefiniowane w (2.10).

Maksymalny uogólniony biegunowy indeks Wienera jest otrzymywany w przypadku, gdy zachodzi równość:

$$W_k(G) = \frac{1}{2} f(p) = \frac{1}{2} \max\{f(\lfloor \hat{p} \rfloor), f(\lceil \hat{p} \rceil)\},$$

gdzie

$$f(p) = (n - 2 - p(k-2))^2 \left(1 - \frac{1}{p}\right).$$

Obliczymy teraz wartość $W_k(G)$ przy założeniu, że wszystkie grupy wolnych wierzchołków są równoliczne i mają liczebność a.

$$W_k(G) = \frac{1}{2}(p^2 a^2 - p a^2) = \frac{1}{2} a^2 p(p-1).$$

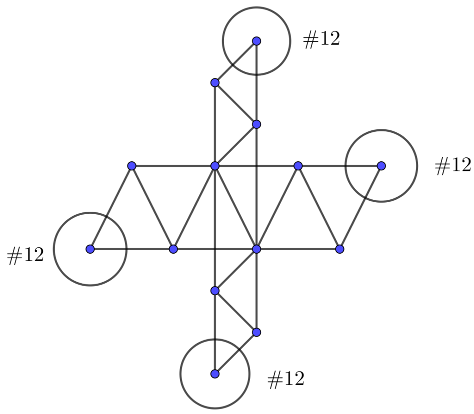
Otrzymujemy zatem

$$\frac{1}{2} a^2 p(p-1) = \frac{1}{2} f(p).$$

Przyjmując teraz $a = (k-2)(2p-2)$ oraz $n = 2 + p(k-2+a)$ (czyli równość w (2.4)), gdzie $q = p \cdot a$, otrzymamy, że $\hat{p}$ z (2.10) będzie liczbą całkowitą p.

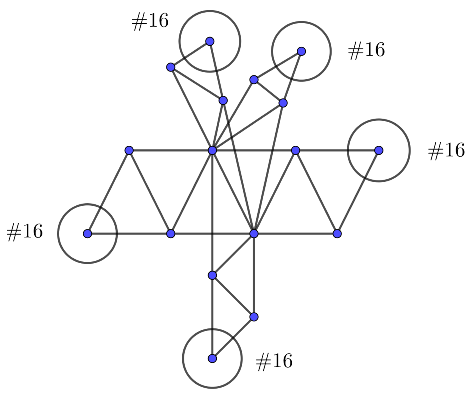
Możemy teraz skonstruować dwudrzewo G rzędu $n = 2+p(k-2+a)$ z $p \geq 3$ grupami wolnych wierzchołków o liczebności $a = |A_i|$, $i = 1, ..., p$, gdzie $p = \lfloor \hat{p} \rfloor = \lceil \hat{p} \rceil$ oraz pamiętając o założeniu, że tylko wierzchołki należące do grup wolnych wierzchołków mają acentryczność równą k i żaden inny wierzchołek nie ma acentryczności równej k.

Weźmy, na przykład, $k = 4$, $p = 4$. Obliczamy: $a = 12$, $n = 58$. Dwudrzewo zaprezentowane jest na rysunku 2.10.



Rysunek 2.10: Dwudrzewo rzędu $n = 58$ z $k = 4$ oraz czterema grupami A_i, gdzie $|A_i| = 12$ dla $i = 1, 2, 3, 4$.

Podobnie, dla $k = 4$, $p = 5$ obliczamy, że $a = 16$ oraz $n = 92$ i otrzymujemy dwudrzewo jak na rysunku 2.11.



Rysunek 2.11: Dwudrzewo rzędu $n = 92$ z $k = 4$ oraz pięcioma grupami A_i, gdzie $|A_i| = 16$ dla $i = 1, 2, 3, 4, 5$.

Podczas konstruowania dwudrzew z maksymalnym uogólnionym biegunowym indeksem Wienera, korzystaliśmy z założenia, że tylko wierzchołki należące do grup wolnych wierzchołków mają acentryczność równą k i żaden inny wierzchołek nie ma takiej acentryczności. Ciekawym zagadnieniem byłoby zbadanie możliwości skonstruowania dwudrzewa bez tego założenia, gdyż może to podnieść wartość indeksu.

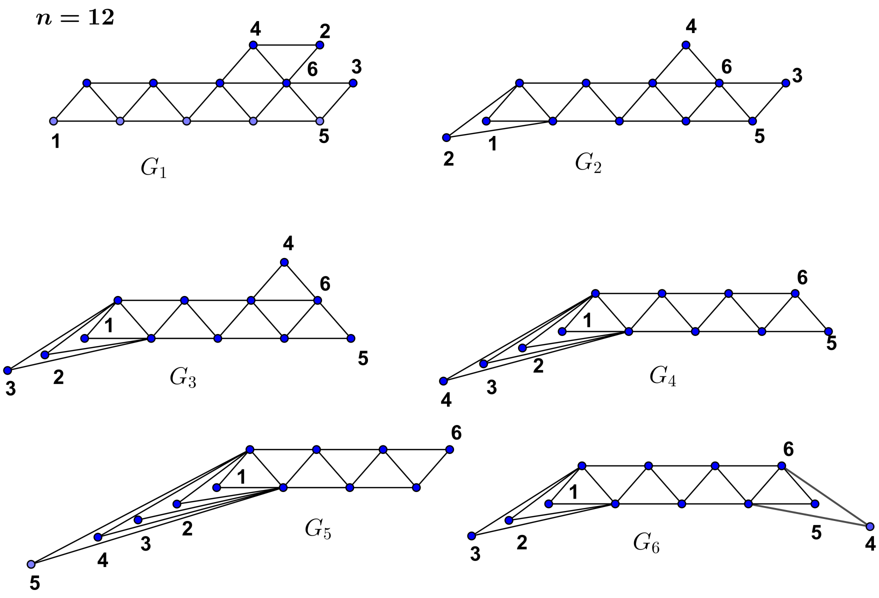
Weźmy, na przykład, dwudrzewo G oraz $k > 3$ i wykonajmy transformację polegającą na przesuwaniu grup wolnych wierzchołków. Rozważmy przypadek, gdy istnieją przynajmniej dwie grupy wolnych wierzchołków. Przyjmijmy, że odległość pomiędzy dwoma dowolnymi wolnymi wierzchołkami nie jest równa k. Niech p_1 i p_2 będą liczbą wierzchołków w odległości k od dowolnego wolnego wierzchołka z A_1 i A_2, odpowiednio. Bez straty ogólności możemy przyjąć, że $p_1 \geq p_2$. Po usunięciu wszystkich wolnych wierzchołków z A_2 i dodaniu ich do A_1 dostajemy przetransformowane dwudrzewo G'. Jeśli mamy dwie grupy to:

$$\begin{aligned} W_k(G') - W_k(G) &\geq (|A_1|p_1 + |A_2|p_1) - (|A_1|p_1 + |A_2|p_2) = \\ &= |A_2|(p_1 - p_2) \geq 0. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Jeśli grup jest więcej, nierówność (2.19) może nie zachodzić. Poprzez powtarzanie transformacji jak powyżej dla p grup wolnych wierzchołków, dostaniemy nowe dwudrzewo. Średnica tego dwudrzewa po każdej transformacji będzie mniejsza lub zostanie taka sama jak dla G. Jeśli do transformacji wybierzemy najbardziej odległe od siebie grupy wolnych wierzchołków, to dostaniemy dwudrzewo ze średnicą większą lub równą k. Jeśli przy wykonywaniu transformacji, zostaną wolne wierzchołki o acentryczności mniejszej niż k, to wykonujemy ją dalej i wierzchołki dodajemy do innej grupy wolnych wierzchołków. Cały proces wykonujemy skończoną ilość razy, aż do momentu, w którym wszystkie wolne wierzchołki mają acentryczność równą k. Istnieje możliwość, że nie tylko wierzchołki wolne będą miały taką acentryczność. Przykład przesuwania grup wolnych wierzchołków $G_1 \to G_2 \to G_3$ widzimy na rysunku 2.12. Warto zwrócić uwagę, iż wierzchołek oznaczony cyfrą 6 w grafie G_3 ma acentryczność równą $k = 4$, ale nie należy on do żadnej grupy wolnych wierzchołków.

Warto również zwrócić uwagę na to, iż jeśli proces przesuwania wierzchołków będziemy wykonywać do momentu, w którym tylko wolne wierzchołki mają acentryczność równą k, to wartość indeksu $W_k(G)$ może się zmniejszyć. Jest to widoczne w transformacji $G_1 \to G_2 \to G_3 \to G_4 \to G_5$ na rysunku 2.12.

Ponadto, w grafie G_3 mamy sytuację, gdy nie wszystkie grupy wolnych wierzchołków są w odległości k (grupy z wierzchołkami oznaczonymi cyframi 4 oraz 5). Zauważmy, że wykonanie transformacji pomiędzy tymi grupami $G_3 \to G_6$ zwiększa wartość indeksu $W_k(G)$.



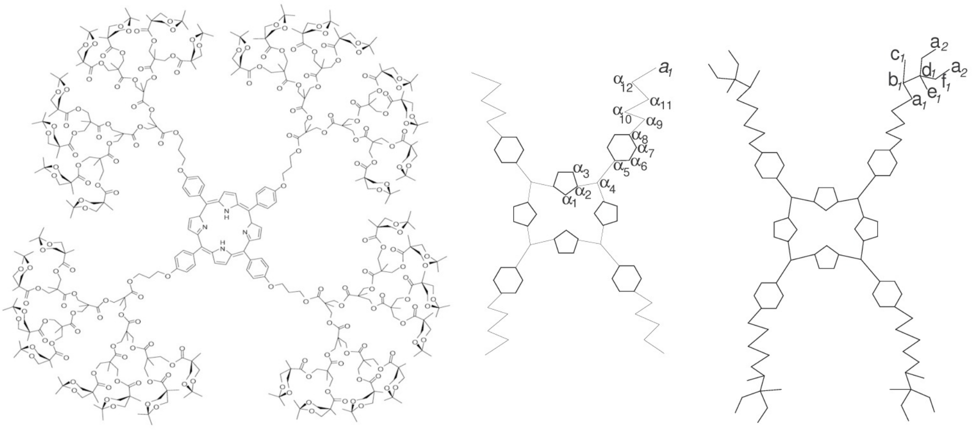
Rysunek 2.12: Proces przesuwania wierzchołków: $G_1 \to G_2 \to G_3 \to G_4 \to G_5$ oraz $G_3 \to G_6$. $W_4(G_1) = 8$, $W_4(G_2) = 9$, $W_4(G_3) = 10$, $W_4(G_4) = 9$, $W_4(G_5) = 5$, $W_4(G_6) = 11$.

Podsumowując, problem konstruowania dwudrzew z maksymalnym uogólnionym biegunowym indeksem Wienera bez żadnych specjalnych założeń pozostaje nadal otwarty i może stanowić przedmiot dalszych badań nad tym indeksem.

Rozdział 3

Indeksy związane z acentrycznością

Zajmiemy się teraz, zgodnie z tytułem, indeksami związanymi z acentrycznością. Spośród wszystkich indeksów topologicznych, te związane z acentrycznością są szczególnie istotne i szeroko stosowane w rozwiązywaniu zagadnień chemicznych. Bardzo szybki rozwój medycyny, sprzyja również rozwojowi tego obszaru teorii grafów. Na rysunku 3.1 przedstawione zostały struktury chemiczne, które modelowano za pomocą grafów. Ponadto, do ich opisania stosowano różnego rodzaju indeksy związane z acentrycznością. Rysunki zostały zaczerpnięte ze źródeł internetowych [98], [99].



Rysunek 3.1: Struktury chemiczne.

Rozdział trzeci został w szczególności poświęcony indeksom AEDS oraz EDS, oraz ich własnościom.

3.1 Indeks AEDS

Ujęcie ilościowe struktur chemicznych to podstawowy problem zagadnienia QSAR wspomnianego wcześniej. Jest to bardzo ważne narzędzie do odkrywania coraz bezpieczniejszych i silniejszych leków. Cała procedura obejmuje „przetłumaczenie” struktury chemicznej na deskryptory numeryczne (indeksy topologiczne), a co za tym idzie, dostarczenie nam informacji na temat korelacji pomiędzy ilościową aktywnością biologiczną, a ilościową strukturą chemiczną. Opierając się na tym, S. Sardana i A. K. Madan [82] w 2002 roku przedstawili indeks topologiczny nazywany dzisiaj AEDS (z ang. adjacent eccentric distance sum index). W tym rozdziale zajmiemy się jego własnościami. Przedstawmy na początek definicję.

Indeksem AEDS nazywamy następującą sumę:

$$\xi^{sv}(G) = \sum_{v \in V(G)} \frac{\varepsilon(v)D(v)}{\deg(v)}.$$

Zaczniemy od górnych i dolnych ograniczeń indeksu AEDS, które zostaną zaprezentowane w kolejnej sekcji.

Należy zwrócić uwagę na to, że w prezentowanych twierdzeniach może wystąpić sumowanie po zbiorze, który jest pusty. Takie sumowanie daje wartośc zero, a domnażanie przez dodatkowy czynnik obowiązuje tylko w przypadku, gdy zbiór nie jest pusty.

3.1.1 Ograniczenia górne i dolne dla indeksu AEDS

Przejdziemy teraz do ograniczeń dolnych indeksu AEDS w twierdzeniach H. Hua oraz G. Yu [51]. Poprzez n_1, n_2 będziemy oznaczać liczbę wierzchołków danego grafu z acentrycznością równą odpowiednio 1 lub 2. Graf $K_n - kK_2$ jest grafem utworzonym z K_n poprzez usunięcie k niezależnych krawędzi dla $0 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. Pierwsze z twierdzeń zaprezentowane jest poniżej:

Twierdzenie 3.1.1. *(H. Hua, G. Yu 2002 [51]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu $n \geq 3$. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq n_1 + \frac{2n(n-n_1)}{n-2},$$

gdzie równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_n - \frac{n-n_1}{2}K_2$, $n - n_1$ jest parzyste.

Wprowadzimy teraz definicję acentryczności całkowitej, dla której zachodzi zależność z indeksem AEDS.

Acentrycznością całkowitą dla grafu G, nazywamy sumę acentryczności dla wszystkich wierzchołków w grafie G:

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

Poniższe twierdzenie 3.1.2 pokazuje, iż ograniczeniem dolnym dla indeksu AEDS jest wartość acentryczności całkowitej.

Twierdzenie 3.1.2. *(H. Hua, G. Yu 2002 [51]) Niech G będzie grafem spójnym o $n \geq 3$ wierzchołkach. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq \zeta(G),$$

gdzie równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_n$.

Przejdziemy teraz do kolejnego twierdzenia, które pokaże nam górne ograniczenie dla indeksu AEDS. Jest ono ściśle związane z minimalnym stopniem grafu oraz jego indeksem Wienera.

Twierdzenie 3.1.3. *(H. Hua, G. Yu 2002 [51]) Niech G będzie spójnym grafem o $n \geq 3$ wierzchołkach z minimalnym stopniem δ. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \leq \frac{2(n-\delta)}{\delta} W(G),$$

gdzie równość zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_n$, lub $G \cong K_n - \frac{n}{2}K_2$ dla parzystych n.

Dalsza część rozważań, dotyczyć będzie uogólnienia wyników H. Hua oraz G. Yu. Zostaną one przedstawione w kolejnej sekcji.

3.1.2 Wartości uogólnione

Zaprezentujemy teraz bardziej ogólne dolne i górne ograniczenia dla indeksu AEDS. Wprowadźmy najpierw pewne oznaczenia.

Niech S_i będzie zbiorem wierzchołków o acentryczności równej i w grafie G oraz niech $n_i = |S_i|$, gdzie $1 \leq i \leq \mathrm{diam}(G)$. Niech ponadto:

$$\delta_{\epsilon>2}(G) = \begin{cases} \min\{\deg(y)|y \in V(G)\backslash(S_1 \cup S_2)\} & , S_i \neq \emptyset \textit{ dla } i > 2 \\ 1 & , S_i = \emptyset \textit{ dla } i > 2 \end{cases}$$

$$\Delta_{\epsilon>2}(G) = \begin{cases} \max\{\deg(y)|y \in V(G)\backslash(S_1 \cup S_2)\} & , S_i \neq \emptyset \textit{ dla } i > 2 \\ \Delta(G) & , S_i = \emptyset \textit{ dla } i > 2 \end{cases}$$

$$\Delta_{\epsilon=2}(G) = \begin{cases} \max\{\deg(y)|y \in S_2\} & , S_2 \neq \emptyset \\ \Delta(G) & , S_2 = \emptyset \end{cases}$$

Pierwsze z twierdzeń, twierdzenie 3.1.4, opisuje dolne ograniczenie indeksu AEDS z wykorzystaniem parametrów wprowadzonych powyżej.

Twierdzenie 3.1.4. *(H. Bielak, K. Wolska 2014 [8]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu $n \geq 3$. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq n_1 - 2n_2 + \frac{4n_2(n-1)}{n-2} + 3(n - n_1 - n_2)\left(2 + \frac{6}{n-3} - \frac{n-2}{\delta_{\epsilon>2}(G)}\right).$$

Ponadto

$$\xi^{sv}(G) \geq n_1 - 2n_2 + \frac{4n_2(n-1)}{\Delta_{\epsilon=2}(G)} - 3(n - n_1 - n_2)\left(1 - \frac{2n-1}{\Delta_{\epsilon>2}(G)}\right).$$

Dowód. Niech $S_1 = \{v_1, v_2, ..., v_{n_1}\}$ będzie zbiorem wierzchołków o acentryczności równej 1 oraz niech $S_2 = \{u_1, u_2, ..., u_{n_2}\}$ będzie zbiorem wierzchołków o acentryczności równej 2. Niech dla $y \in V(G)$, $N_i(y)$ będzie zbiorem wierzchołków w odległości i od wierzchołka y, gdzie $1 \leq i \leq \varepsilon(y)$. Z definicji indeksu AEDS mamy:

$$\begin{aligned} \xi^{sv}(G) &= \sum_{i=1}^{n_1} \frac{\varepsilon(v_i)D(v_i)}{\deg(v_i)} + \sum_{i=1}^{n_2} \frac{\varepsilon(u_i)D(u_i)}{\deg(u_i)} + \sum_{y \in V(G)\backslash(S_1 \cup S_2)} \frac{\varepsilon(y)D(y)}{\deg(y)} \\ &\geq n_1 + 2\sum_{i=1}^{n_2} \frac{D(u_i)}{\deg(u_i)} + 3 \sum_{y \in V(G)\backslash(S_1 \cup S_2)} \frac{D(y)}{\deg(y)} \\ &= n_1 + 2\sum_{i=1}^{n_2} \frac{\deg(u_i) + 2(n - \deg(u_i) - 1)}{\deg(u_i)} \\ &+ 3 \sum_{y \in V(G)\backslash(S_1 \cup S_2)} \frac{1}{\deg(y)} \sum_{i=1}^{\varepsilon(y)} i \cdot |N_i(y)| \end{aligned}$$

Rozwijając to wyrażenie otrzymujemy:

$$\begin{aligned}
\xi^{sv}(G) &\geq n_1 + 2\sum_{i=1}^{n_2} \frac{-\deg(u_i) + 2n - 2}{\deg(u_i)} \\
&+ 3 \sum_{y \in V(G)\setminus(S_1 \cup S_2)} \frac{\deg(y) + 2|N_2(y)| + 3(n - 1 - \deg(y) - |N_2(y)|)}{\deg(y)} \\
&= n_1 - 2n_2 + 4\sum_{i=1}^{n_2} \frac{n-1}{\deg(u_i)} \\
&+ 3 \sum_{y \in V(G)\setminus(S_1 \cup S_2)} \frac{-|N_2(y)| + 3(n-1) - 2\deg(y)}{\deg(y)} \\
&\geq n_1 - 2n_2 + \frac{4(n-1)n_2}{n-2} - 6(n - n_1 - n_2) \\
&+ \frac{9(n-1)(n-n_1-n_2)}{n-3} - 3 \sum_{y \in V(G)\setminus(S_1 \cup S_2)} \frac{|N_2(y)|}{\deg(y)} \\
&\geq n_1 - 2n_2 + \frac{4n_2(n-1)}{n-2} + 6(n - n_1 - n_2) + \frac{18}{n-3}(n - n_1 - n_2) \\
&- 3(n-2) \sum_{y \in V(G)\setminus(S_1 \cup S_2)} \frac{1}{\deg(y)} \\
&\geq n_1 - 2n_2 + \frac{4n_2(n-1)}{n-2} + 3(n - n_1 - n_2)\left(2 + \frac{6}{n-3} - \frac{n-2}{\delta_{\epsilon>2}(G)}\right).
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Dwie ostatnie nierówności zachodzą z uwagi na to, że $|N_2(y)| \leq n-2-\deg(y)$ oraz z definicji $\delta_{\epsilon>2}(G)$. W taki sposób otrzymujemy powyższy wynik. Ponadto możemy użyć $\Delta_{\epsilon=2}(G)$ oraz $\Delta_{\epsilon>2}(G)$ do wyrażenia z drugiej linii nierówności 3.1:

$$\xi^{sv}(G) \geq n_1 - 2n_2 + 4\sum_{i=1}^{n_2} \frac{n-1}{\deg(u_i)} + 3 \sum_{y \in V(G)\setminus(S_1 \cup S_2)} \frac{-|N_2(y)| + 3(n-1) - 2\deg(y)}{\deg(y)},$$

aby wyznaczyć relację:

$$\xi^{sv}(G) \geq n_1 - 2n_2 + \frac{4n_2(n-1)}{\Delta_{\epsilon=2}(G)} - 3(n - n_1 - n_2)\left(1 - \frac{2n-1}{\Delta_{\epsilon>2}(G)}\right).$$

To kończy dowód. □

Warto zauważyć, że jeśli $n_1 \neq 0$, to $n - n_1 - n_2 = 0$ i poprzez pierwszą nierówność w powyższym twierdzeniu, otrzymujemy rezultat z twierdzenia 3.1.1 autorstwa H. Hua oraz G. Yu prezentowany wcześniej. Druga nierówność prowadzi nas do następującego wniosku:

Wniosek 3.1.5. *(H. Bielak, K. Wolska 2014 [8]) Niech G będzie spójnym grafem o n wierzchołkach z $n_1 \neq 0$. Niech $\Delta(G)$ będzie maksymalnym stopniem wierzchołkowym w*

G oraz $\delta(G)$ będzie minimalnym stopniem wierzchołkowym w G. Wtedy

$$\xi^{sv}(G) \geq 3n_1 - 2n + \frac{4(n-1)(n-n_1)}{\Delta_{\epsilon=2}(G)}.$$

Równość zachodzi dla wszystkich $\Delta(G)$–regularnych grafów G ze średnicą równą 2 i dla wszystkich $(\delta(G), n-1)$–regularnych grafów G, gdzie $\delta(G) < n-1$. W szczególności równość jest spełniona dla $G = K_{n_1} + C_{n-n_1}$ z $n_1 \geq 1$.

Ponadto, zachodzi również:

Wniosek 3.1.6. *(H. Bielak, K. Wolska 2014 [8]) Niech $n_1 = 0$ oraz niech $c(G) = \min\{n-1-\deg(y) - |N_2(y)| : \ y \in V(G)\backslash(S_1 \cup S_2)\}$. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq \frac{4n_2(n-1)}{n-2} - 2n_2 - 3(n-n_2)\left(1 - \frac{2n-1}{\Delta_{\epsilon>2}(G)}\right).$$

Ponadto,

$$\xi^{sv}(G) \geq \frac{4n_2(n-1)}{\Delta_{\epsilon=2}(G)} - 2n_2 - 3(n-n_2)\left(1 - \frac{2(n-1)+c(G)}{\Delta_{\epsilon>2}(G)}\right).$$

Równość zachodzi dla nieskończonej rodziny grafów z $\mathrm{diam}(G) = 3$.

Dowód. Pierwsza nierówność zachodzi natychmiast z twierdzenia 3.1.4. Druga nierówność zachodzi po zastosowaniu definicji $c(G)$ w trzeciej linijce nierówności (3.1). Równość zachodzi dla $G = K_{2t} - B_{t-1,t-1} = \overline{B_{t-1,t-1}}$, gdzie $t \geq 2$ i $B_{t-1,t-1}$ jest drzewem (podwójna gwiazda) rzędu $2t$ z dokładnie dwoma przyległymi wierzchołkami stopnia t (zobacz rysunek 3.2). W tym przypadku $\mathrm{rad}(G) = 2$, $\mathrm{diam}(G) = 3$, $c(G) = 1$ oraz $|S_3| = 2$. □

Rysunek 3.2: Graf $B_{t-1,t-1}$ z $t > 1$.

Zaprezentujemy teraz nowe, górne ograniczenia dla indeksu AEDS, które są uogólnieniem wyników z twierdzenia 3.1.3, wprowadzonych przez H. Hua, G. Yu [51].

Twierdzenie 3.1.7. *(H. Bielak, K. Wolska 2014 [8]) Niech G będzie spójnym grafem rzędu $n \geq 3$ z minimalnym stopniem $\delta = \delta(G)$. Niech M_1 będzie zbiorem wierzchołków z minimalnym stopniem. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \leq 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) - \frac{n}{(\delta+1)\delta}\sum_{v \in V(G)\setminus M_1} D(v).$$

Równoważnie

$$\xi^{sv}(G) \leq \frac{2(n-\delta-1)}{\delta+1}W(G) + \frac{n}{\delta(\delta+1)}\sum_{v \in M_1} D(v).$$

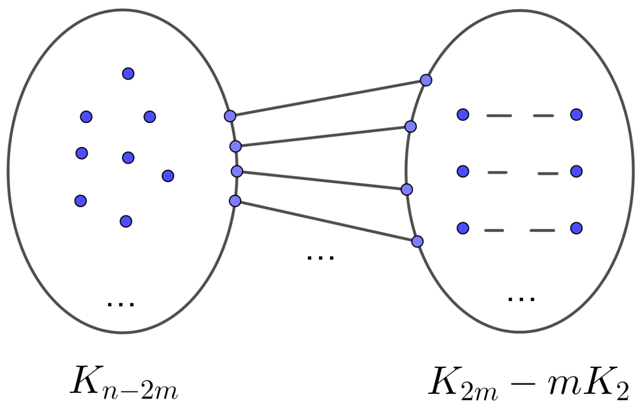
Dowód. Załóżmy, że G jest spójnym grafem rzędu $n \geq 3$. Załóżmy ponadto, że minimalny stopień w grafie G jest równy $\delta = \delta(G)$ oraz M_1 jest zbiorem wierzchołków z minimalnym stopniem. Korzystając z definicji indeksu AEDS oraz z zależności $\varepsilon(v) \leq n - \deg(v)$ otrzymujemy:

$$\begin{aligned}
\xi^{sv}(G) &= \sum_{v \in V(G)} \frac{\varepsilon(v)D(v)}{deg(v)} \\
&\leq \sum_{v \in V(G)} \frac{(n-\deg(v))D(v)}{\deg(v)} \\
&\leq \sum_{v \in M_1} \frac{(n-\delta)D(v)}{\delta} + \sum_{v \in V(G)\setminus M_1} \frac{(n-\delta-1)D(v)}{\delta+1} \\
&= \frac{(n-\delta)(\delta+1)}{\delta(\delta+1)}\sum_{v \in M_1} D(v) + \frac{(n-\delta-1)\delta}{(\delta+1)\delta}\sum_{v \in V(G)\setminus M_1} D(v) \\
&= \frac{n\delta+n-\delta^2-\delta}{\delta(\delta+1)}\sum_{v \in M_1} D(v) + \frac{n\delta-\delta^2-\delta+n}{\delta(\delta+1)}\sum_{v \in V(G)\setminus M_1} D(v) \\
&- \frac{n}{(\delta+1)\delta}\sum_{v \in V(G)\setminus M_1} D(v) \\
&= 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) - \frac{n}{(\delta+1)\delta}\sum_{v \in V(G)\setminus M_1} D(v) \\
&= \frac{2(n-\delta-1)}{\delta+1}W(G) + \frac{n}{\delta(\delta+1)}\sum_{v \in M_1} D(v).
\end{aligned} \tag{3.2}$$

To kończy dowód. □

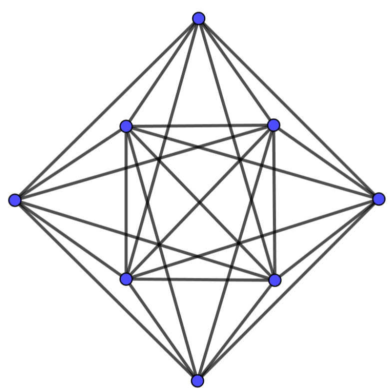
Warto zwrócić uwagę, iż równość w twierdzeniu 3.1.7 zachodzi dla nieskończonej rodziny grafów. Jednym z przykładów jest rodzina grafów pełnych. Ponadto, zauważmy, że $G = 2K_1 + K_{n-2}$ ma $\delta(G) = n-2$. Obliczając z definicji wartość indeksu AEDS dla G otrzymujemy: $\xi^{sv}(G) = \frac{4n}{n-2} + n - 2$. Korzystając natomiast z twierdzenia 3.1.7, otrzymujemy $\xi^{sv}(G) \leq \frac{4}{n-2}W(G) - n$. Wartość indeksu Wienera wynosi: $W(G) = n + \frac{(n-1)(n-2)}{2}$, co prowadzi nas do następującego wyniku: $\xi^{sv}(G) = \frac{4n}{n-2} + n - 2$. Osiągamy zatem ograniczenie górne.

Równość w twierdzeniu 3.1.7 zachodzi również dla bardziej ogólnej klasy grafów $G = K_{n-2m} + (K_{2m} - mK_2) = \overline{\overline{K}_{n-2m} \cup mK_2}$, $n > 2m$, która została symbolicznie przedstawiona na rysunku 3.3.



Rysunek 3.3: Symboliczne przedstawienie grafów z klasy $G = K_{n-2m} + (K_{2m} - mK_2)$.

Grafy z tej klasy osiągają stopień minimalny równy $\delta(G) = n - 2$. Wartość indeksu AEDS z definicji wynosi wówczas $\xi^{sv}(G) = n - 2m + \frac{4nm}{n-2}$, co jest równe wartości otrzymywanej z zależności w twierdzeniu 3.1.7. Ponownie osiągamy ograniczenie górne. Przykład grafu z klasy $G = K_{n-2m} + (K_{2m} - mK_2)$ pokazuje rysunek 3.4 poniżej:



Rysunek 3.4: Graf z klasy $G = K_{n-2m} + (K_{2m} - mK_2)$ dla $n = 8$ i $m = 2$.

Zaprezentujemy teraz kolejne twierdzenie, które jest uogólnieniem twierdzenia 3.1.7 i wskazuje granicę górną indeksu AEDS w zależności od indeksu Wienera. W dalszej części tego rozdziału, oszacowanie to będzie dodatkowo udoskonalone i przedstawione w postaci twierdzenia 3.1.11.

Twierdzenie 3.1.8. *(H. Bielak, K. Wolska 2014 [8]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu $n \geq 3$ z minimalnym stopniem $\delta = \delta(G)$. Niech ponadto δ_2, δ_3 będą drugim (trzecim) minimalnym stopniem, odpowiednio. Niech M_1 będzie zbiorem wierzchołków ze stopniem równym minimalnemu stopniowi oraz niech M_2 będzie zbiorem wierzchołków ze stopniem równym drugiemu minimalnemu stopniowi. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \leq 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) + \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v) + \frac{n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v).$$

Równoważnie

$$\xi^{sv}(G) \leq \frac{2(n-\delta_2)}{\delta_2}W(G) + \frac{n(\delta_2-\delta_3)}{\delta_2\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v) - \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_1} D(v).$$

Dowód. Załóżmy, że G jest grafem spójnym rzędu $n \geq 3$ z minimalnym stopniem $\delta = \delta(G)$ oraz δ_2, δ_3 są drugim (trzecim) minimalnym stopniem, odpowiednio. Zbiór wierzchołków ze stopniem równym minimalnemu stopniowi oznaczmy poprzez M_1, natomiast poprzez M_2 oznaczmy zbiór wierzchołków ze stopniem równym drugiemu minimalnemu stopniowi. Z definicji indeksu AEDS mamy:

$$\begin{aligned}
\xi^{sv}(G) &= \sum_{v\in V(G)} \frac{\varepsilon(v)D(v)}{\deg(v)} \leq \sum_{v\in V(G)} \frac{(n-\deg(v))D(v)}{\deg(v)} \\
&\leq \sum_{v\in M_1} \frac{(n-\delta)D(v)}{\delta} + \sum_{v\in M_2} \frac{(n-\delta_2)D(v)}{\delta_2} + \sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} \frac{(n-\delta_3)D(v)}{\delta_3} \\
&= \frac{n-\delta}{\delta}\sum_{v\in M_1} D(v) + \frac{n-\delta_2}{\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v) + \frac{n-\delta_3}{\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v) \\
&= \frac{(n-\delta)\delta_2\delta_3}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in M_1} D(v) + \frac{(n-\delta_2)\delta\delta_3}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in M_2} D(v) \\
&+ \frac{(n-\delta_3)\delta\delta_2}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v) \\
&= 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) + \frac{n\delta_3(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in M_2} D(v) + \frac{n\delta_2(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v) \\
&= 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) + \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v) + \frac{n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Otrzymaliśmy w ten sposób pierwsze sformułowanie twierdzenia. Prowadzimy dalsze obliczenia:

$$\begin{aligned}
\xi^{sv}(G) &\leq 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) + \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v) + \frac{n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v)\\
&= 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) + \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v) + \frac{n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\Bigg(2W(G) - \sum_{v\in M_1\cup M_2} D(v)\Bigg)\\
&= W(G)\Bigg(\frac{2(n-\delta)\delta_3}{\delta\delta_3} + \frac{2n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\Bigg) + \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v)\\
&- \frac{n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\sum_{v\in M_1\cup M_2} D(v)\\
&= \frac{2(n-\delta_3)}{\delta_3}W(G) + \frac{n(\delta_3-\delta_2)}{\delta_2\delta_3}\sum_{v\in M_2} D(v) - \frac{n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\sum_{v\in M_1} D(v)
\end{aligned}$$

Jeśli skorzystamy z wyrażenia w czwartej linii nierówności (3.3), to jest:

$$\begin{aligned}
\xi^{sv}(G) \leq{}& \frac{(n-\delta)\delta_2\delta_3}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in M_1} D(v) + \frac{(n-\delta_2)\delta\delta_3}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in M_2} D(v)\\
&+ \frac{(n-\delta_3)\delta\delta_2}{\delta\delta_2\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v),
\end{aligned}$$

to dostaniemy równoważną zależność:

$$\begin{aligned}
\xi^{sv}(G) &\leq \Bigg(\frac{(n-\delta)\delta_2\delta_3}{\delta\delta_2\delta_3} - \frac{(n-\delta_2)\delta\delta_3}{\delta\delta_2\delta_3}\Bigg)\sum_{v\in M_1} D(v) + \frac{(n-\delta_2)}{\delta_2}2W(G)\\
&+ \Bigg(\frac{(n-\delta_3)\delta\delta_2}{\delta\delta_2\delta_3} - \frac{(n-\delta_2)\delta\delta_3}{\delta\delta_2\delta_3}\Bigg)\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v)\\
&= \frac{n(\delta_2-\delta)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_1} D(v) + \frac{(n-\delta_2)}{\delta_2}2W(G) + \frac{n(\delta_2-\delta_3)}{\delta_2\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v)\\
&= \frac{2(n-\delta_2)}{\delta_2}W(G) + \frac{n(\delta_2-\delta_3)}{\delta_2\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v) - \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_1} D(v).
\end{aligned}$$

To kończy dowód. $\square$

Z twierdzenia 3.1.8 otrzymujemy następujący rezultat dla grafów, w których nie występuje trzeci stopień minimalny δ_3, czyli występują tylko: pierwszy stopień minimalny δ i drugi stopnień minimalny δ_2.

Wniosek 3.1.9. *(H. Bielak, K. Wolska 2014 [8]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu $n \geq 3$ z minimalnym stopniem $\delta = \delta(G)$ oraz drugim minimalnym stopniem δ_2. Niech*

M_1 będzie zbiorem wierzchołków ze stopniem równym minimalnemu stopniowi oraz niech M_2 będzie zbiorem wierzchołków ze stopniem równym drugiemu minimalnemu stopniowi. Jeśli $V(G)\backslash(M_1 \cup M_2) = \emptyset$, to

$$\xi^{sv}(G) \leq 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) + \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v)$$

lub równoważnie

$$\xi^{sv}(G) \leq \frac{2(n-\delta_2)}{\delta_2}W(G) - \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_1} D(v).$$

Należy zwrócić uwagę, iż równość w twierdzeniu 3.1.8 zachodzi dla nieskończonej rodziny grafów. Takim przykładem jest graf K_n dla którego $\delta = n-1$. Ponadto równość jest osiągana dla wszystkich grafów izomorficznych z $G = K_{n-2m}+(K_{2m}-mK_2)$. Grafy z tej klasy mają tylko dwa rodzaje stopni: $\delta = n-2$ oraz $\delta_2 = n-1$. Poszukujemy takiego grafu G, który ma w swojej strukturze trzy lub więcej różnych stopni.

Załóżmy teraz, że w danym grafie G stopień minimalny jest równy 1, $\delta(G) = 1$. W takiej sytuacji, przykładami spełniającymi równość w twierdzeniu 3.1.8 są ścieżki: P_2, P_3, P_4, które mają dwa rodzaje stopni: $\delta = 1$ oraz $\delta_2 = 2$.

Niech teraz $2 \leq \delta(G) \leq n-2$. Jeśli w danym grafie G, mamy wierzchołek $v \in V(G)$, którego stopień jest równy $\deg(v)$ i jest to stopień minimalny w grafie G, $\delta(G) = \deg(v)$, to do osiągnięcia równości w pierwszej linii nierówności 3.3, konieczny jest warunek $\varepsilon(v) = n - \deg(v) = n - \delta$. Jest on osiągany dla grafów C_3 oraz C_4 z $\delta(G) = 2$. Poza tymi przykładami nie jest to możliwe, gdyż jeśli zachodzi taka zależność, to wierzchołek peryferyjny do v ma stopień równy 1, co jest sprzeczne z tym, że $\delta(G) \geq 2$.

W poszukiwaniu lepszego oszacowania dla $\xi^{sv}(G)$, przeanalizujemy strukturę grafu G. Wprowadzamy definicję **zbioru wierzchołków peryferyjnych** względem wierzchołka $v \in V(G)$:

$$P(v) = \{x \in V(G) : d(v,x) = \varepsilon(v)\}.$$

Niech, ponadto, $N(v) = \{x \in V(G) : d(x,v) = 1\}$ oznacza **otwarte sąsiedztwo wierzchołka** $v \in G$ oraz niech $N[v] = N(v) \cup \{v\}$ oznacza **domknięte sąsiedztwo wierzchołka** $v \in G$. Niech $1 \leq \delta(G) \leq n-2$ oraz niech $\tilde{v} \in P(v)$. Ścieżka łącząca v oraz $\tilde{v}$ przechodzi przez jednego z sąsiadów v oraz jednego z sąsiadów $\tilde{v}$. Pozostali sąsiedzi v oraz $\tilde{v}$ nie leżą na tej ścieżce. Na ścieżce nie leżą ponadto inne wierzchołki $\tilde{v}_i$

realizujące acentryczność wierzchołka v, czyli peryferyjne względem v. Jeśli $\varepsilon(v) \geq 3$, to ilość wierzchołków, które leżą na ścieżce jest niewiększa niż wartość:

$$n - (\deg(v) - 1) - \max_{\tilde{v} \in P(v)} \{(\deg(\tilde{v}) - 1) + |P(v) \backslash N[\tilde{v}]|\},$$

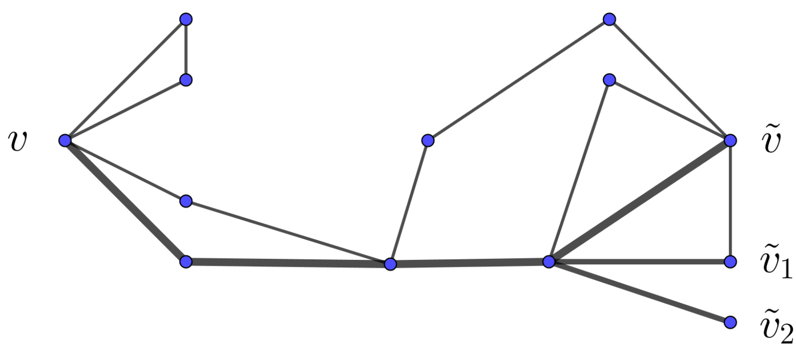
co w odniesieniu do acentryczności wierzchołka v, daje nam ograniczenie górne:

$$\varepsilon(v) \leq n - (\deg(v) - 1) - \max_{\tilde{v} \in P(v)} \{(\deg(\tilde{v}) - 1) + |P(v) \backslash N[\tilde{v}]|\} - 1,$$

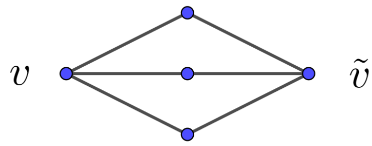
czyli

$$\varepsilon(v) \leq n - \deg(v) - \max_{\tilde{v} \in P(v)} \{(\deg(\tilde{v}) - 1) + |P(v) \backslash N[\tilde{v}]|\}. \tag{3.4}$$

Ścieżkę łączącą v oraz $\tilde{v}$ pokazuje rysunek 3.5.



Rysunek 3.5: Graf G ze ścieżką realizującą acentryczność wierzchołka v, zaznaczoną pogrubioną linią.



Rysunek 3.6: Graf G z wierzchołkiem v o acentryczności $\varepsilon(v) = 2$.

Jeśli $\varepsilon(v) = 2$, to powyższa nierówność (3.4) wymaga korekty. Wierzchołki v oraz $\tilde{v}$ mają wspólnych sąsiadów (jak na rysunku 3.6) i, według powyższego wzoru, są oni podwójnie usuwani z grafu (poprzez stopień wierzchołka v oraz stopień wierzchołka $\tilde{v}$ usuwamy te same wierzchołki). Aby temu zapobiec, wprowadzamy parametr β:

$$\beta = \begin{cases} 0, & \varepsilon(v) \geq 3 \\ 1, & \varepsilon(v) = 2. \end{cases} \tag{3.5}$$

i korygujemy nierówność, aby otrzymać ogólne ograniczenie acentryczności wierzchołka v dla $\varepsilon(v) \geq 2$:

$$\varepsilon(v) \leq n - \deg(v) - \max_{\tilde{v} \in P(v)} \{(\deg(\tilde{v}) - 1) + |P(v) \backslash N[\tilde{v}]| - (|N(v) \cap N(\tilde{v})| - 1)\beta\}. \tag{3.6}$$

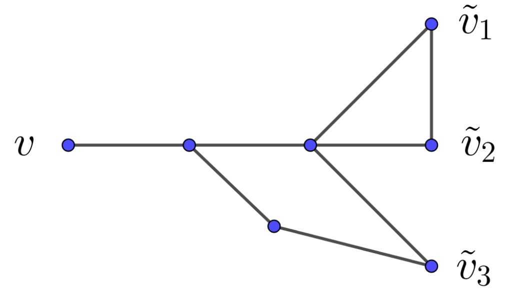
Wprowadzenie maksimum w tym wzorze jest istotne ze względu na grafy o strukturze jak na rysunku 3.7. W zależności od wyboru wierzchołka peryferyjnego otrzymujemy różne wartości, jak poniżej:

$$\deg(\tilde{v}) - 1 + |P(v) \backslash N[\tilde{v}]| - (|N(v) \cap N(\tilde{v})| - 1)\beta = \begin{cases} 2, & \text{gdy } \tilde{v} = \tilde{v}_1, \tilde{v}_2 \\ 3, & \text{gdy } \tilde{v} = \tilde{v}_3 \end{cases}$$

Wtedy, zgodnie ze wzorem (3.6), mamy

$$n - \deg(v) - \max_{\tilde{v} \in P(v)} \{2, 2, 3\} = 7 - 1 - 3 = 3,$$

co jest, w tym przypadku, równe acentryczności wierzchołka v.



Rysunek 3.7: Graf G z trzema wierzchołkami peryferyjnymi względem wierzchołka v, gdzie $n - \deg(v) - \max_{\tilde{v} \in P(v)}\{2, 2, 3\} = 3 = \varepsilon(v)$.

Korzystając z definicji oraz z wprowadzonego ograniczenia (3.6) na acentryczność wierzchołka $v \in G$, możemy oszacować indeks AEDS w sposób następujący:

Twierdzenie 3.1.10. *(H. Bielak, K. Broniszewska 2020) Niech G będzie grafem spójnym rzędu $n \geq 3$. Niech, ponadto, $P(v)$ będzie zbiorem wierzchołków peryferyjnych* *względem v oraz $N(v)$, $N[v]$ będą, odpowiednio, otwartym i domkniętym sąsiedztwem wierzchołka v. Jeśli promień grafu G $rad(G) \geq 2$, to*

$$\xi^{sv}(G) = \sum_{v \in V(G)} \frac{\varepsilon(v)D(v)}{\deg(v)} \leq \sum_{v \in V(G)} \frac{(n - \deg(v))D(v)}{\deg(v)}$$
$$- \sum_{v \in V(G)} \frac{(\max_{\tilde{v} \in P(v)}\{(\deg(\tilde{v}) - 1) + |P(v) \backslash N[\tilde{v}]| - (|N(v) \cap N(\tilde{v})| - 1)\beta\})D(v)}{\deg(v)},$$

gdzie β jest zdefiniowane jak we wzorze (3.5).

Przykład nieskończonej rodziny grafów, dla której osiągnięta jest równość w twierdzeniu 3.1.10 jest zaprezentowany na rysunku 3.8, $n \geq 4$. Zbiór wierzchołków oraz zbiór krawędzi dla grafów z tej rodziny jest definiowany następująco:

$$V(G) = \{x, y, w\} \cup \bigcup_{i=1}^{n-3} t_i,$$
$$E(G) = \{wy\} \cup \bigcup_{i=1}^{n-3} xt_i \cup \bigcup_{i=1}^{n-3} yt_i.$$

Grafy te mają cztery różne wartości stopnia dla $n \geq 6$ i są to: $\delta = 1 = \deg(w)$, $\delta_2 = 2 = \deg(t_i)$ dla $i = 1, ..., n-3$, $\delta_3 = n - 3 = \deg(x)$, $\delta_4 = n - 2 = \deg(y)$. Gdy $n = 5$, to graf ma trzy wartości stopnia minimalnego oraz gdy $n = 4$, to mamy tylko dwa rodzaje stopnia minimalnego (graf jest ścieżką P_3).

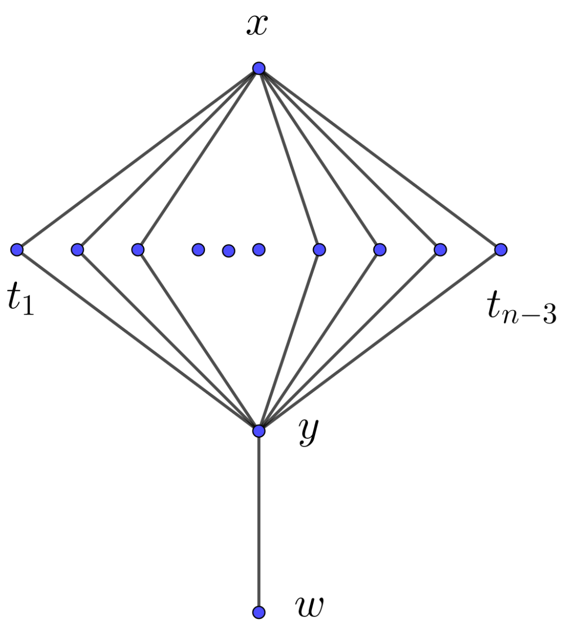
Zgodnie ze wzorem (3.6) mamy:

$$\varepsilon(v) \leq \begin{cases} n - (n-4) - 1 = 3, & \text{gdy } v \in \{x, w\}, \\ n - (n-3) - \{n - 4 - (n-4)\} - 1 = 2, & \text{gdy } v = y, \\ n - 1 - (n-4) - 1 = 2, & \text{gdy } v = t_i \text{ dla } i = 1, ..., n-3. \end{cases}$$

W każdym z powyższych przypadków, otrzymujemy równość z rzeczywistą wartością acentryczności danego wierzchołka, a zatem otrzymujemy też równość w twierdzeniu 3.1.10.

Zaprezentujemy teraz twierdzenie, które pokazuje lepsze, niż w twierdzeniu 3.1.8, oszacowanie dla indeksu AEDS w odniesieniu do indeksu Wienera.

Twierdzenie 3.1.11. *(H. Bielak, K. Broniszewska 2020) Niech G będzie grafem spójnym rzędu $n \geq 3$. Niech, ponadto, $P(v)$ będzie zbiorem wierzchołków peryferyjnych*



Rysunek 3.8: Grafy z czterema różnymi wartościami stopnia dla $n \geq 6$.

względem v oraz $N(v)$, $N[v]$ będą, odpowiednio, otwartym i domkniętym sąsiedztwem wierzchołka v. Jeśli $rad(G) \geq 2$, to

$$\xi^{sv}(G) \leq 2\frac{n-\delta}{\delta}W(G) + \frac{n(\delta-\delta_2)}{\delta\delta_2}\sum_{v\in M_2} D(v) + \frac{n(\delta-\delta_3)}{\delta\delta_3}\sum_{v\in V(G)\setminus(M_1\cup M_2)} D(v)$$
$$- \sum_{v\in V(G)} \frac{(\max_{\tilde{v}\in P(v)}\{(\deg(\tilde{v})-1) + |P(v)\setminus N[\tilde{v}]| - (|N(v)\cap N(\tilde{v})|-1)\beta\})D(v)}{\deg(v)},$$

gdzie β jest zdefiniowane jak we wzorze (3.5).

Dowód. Załóżmy, że mamy graf G rzędu $n \geq 3$. Niech $P(v)$ będzie zbiorem wierzchołków peryferyjnych względem v oraz $N(v)$, $N[v]$ będą, odpowiednio, otwartym i domkniętym sąsiedztwem wierzchołka v. Z twierdzenia 3.1.10 mamy:

$$\xi^{sv}(G) = \sum_{v\in V(G)} \frac{\varepsilon(v)D(v)}{\deg(v)} \leq \sum_{v\in V(G)} \frac{(n-\deg(v))D(v)}{\deg(v)}$$
$$- \sum_{v\in V(G)} \frac{(\max_{\tilde{v}\in P(v)}\{(\deg(\tilde{v})-1) + |P(v)\setminus N[\tilde{v}]| - (|N(v)\cap N(\tilde{v})|-1)\beta\})D(v)}{\deg(v)}$$

W odniesieniu do wyrażenia $\sum_{v\in V(G)} \frac{(n-\deg(v))D(v)}{\deg(v)}$, wykonujemy podobne przeliczenia, jak w dowodzie twierdzenia 3.1.8 (nierówność 3.3) i otrzymujemy tezę twierdzenia.

To kończy dowód. □

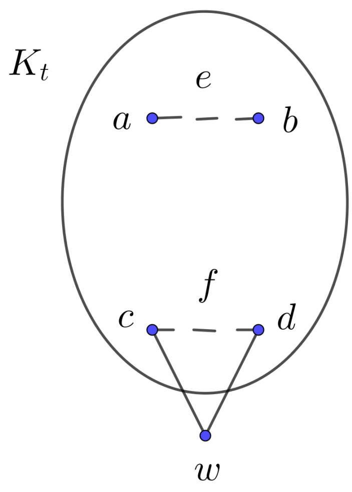
Równość w twierdzeniu 3.1.11 jest osiągnięta dla nieskończonych rodzin grafów. Zdefiniujemy jedną z tych rodzin (rysunek symboliczny 3.9). Niech $e, f \in E(K_t)$, gdzie $e \cap f = \emptyset$, $t \geq 5$. Niech $e = ab$, $f = cd$.

$$G = K_t + \{cw, wd\} - \{e, f\},$$

gdzie $w \notin V(K_t)$. Zbiór wierzchołków oraz zbiór krawędzi grafu G jest zdefiniowany następująco:

$$V(G) = V(K_t) \cup \{w\},$$

$$E(G) = E(K_t) \backslash \{e, f\} \cup \{cw, wd\}.$$



Rysunek 3.9: Graf G z $V(G) = V(K_t) \cup \{w\}$ oraz $E(G) = E(K_t) \backslash \{e, f\} \cup \{cw, wd\}$.

Dla grafów z tej rodziny mamy: $\delta = 2$, $\delta_2 = n-3$, $\delta_3 = n-2$. Aby udowodnić, iż jest dla nich osiągana granica górna w twierdzeniu 3.1.11 wystarczy zbadać acentryczność ze wzoru (3.6). Mamy zatem:

$$\varepsilon(v) \leq \begin{cases} n - 2 - (n-4) = 2, & \text{gdy } v = w, \\ n - (n-3) - (n - 4 + 1 - (n-4)) = 2, & \text{gdy } v \in \{a, b\} \\ n - (n-2) - (n - 3 - (n-3)) = 2, & \text{gdy } v \in \{c, d\} \\ n - (n-2) = 2, & \text{gdy } v \in V(G) \backslash \{a, b, c, d, w\}. \end{cases}$$

W każdym z powyższych przypadków otrzymaliśmy równość z rzeczywistą wartością acentryczności, która dla grafów z tej rodziny jest równa 2 dla każdego wierzchołka.

Osiągamy zatem ograniczenie górne w twierdzeniu 3.1.11. Dodatkowo, jest ono osiągnięte również w twierdzeniu 3.1.10.

Warto zwrócić uwagę, iż dla grafu na rysunku 3.8 nie osiągniemy równości w twierdzeniu 3.1.11. Graf ten ma cztery rodzaje stopni dla $n \geq 6$, a, według twierdzenia, każdy stopień niemniejszy niż δ_3, jest ograniczany przez δ_3. Stąd też wynikałaby różnica, pomiędzy wartością indeksu AEDS z definicji oraz z ograniczenia w twierdzeniu.

Podsumowując, przedstawione twierdzenia pokazują ograniczenia górne i dolne dla indeksu AEDS. Warto zwrócić uwagę, na zależności pomiędzy indeksem AEDS, a indeksem Wienera, który pojawił się w ograniczeniach górnych. W kolejnej sekcji zajmiemy się własnościami indeksu AEDS dla różnych parametrów.

3.1.3 Indeks AEDS dla różnych parametrów

Indeks AEDS był bardzo szeroko badany pod kątem różnych parametrów, takich jak, na przykład: minimalny stopień, maksymalny stopień czy spójność wierzchołkowa lub krawędziowa. W tej sekcji zostaną zaprezentowane twierdzenia opisujące te własności.

Dodawanie krawędzi może zwiększać stopień wierzchołków w grafie G, ale nie zwiększa acentryczności i sumy odległości. Stąd też, dla indeksu AEDS zachodzi zależność opisana w lemacie 3.1.12.

Lemat 3.1.12. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie grafem spójnym oraz niech nie będzie grafem pełnym. Niech ponadto e będzie krawędzią w $\overline{G}$ (dopełnienie grafu G). Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) > \xi^{sv}(G+e).$$

Przejdziemy teraz do twierdzenia H. Qu oraz S. Cao [79], którzy w 2015 roku pokazali ograniczenie dolne dla indeksu AEDS.

Twierdzenie 3.1.13. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu n. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq n,$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_n$. Jeśli $G \neq K_n$, to

$$\xi^{sv}(G) \geq n - 2 + \frac{4n}{n-2},$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_n - e$.

Kolejny z przedstawionych lematów, zostanie następnie uogólniony. Ponadto, zostanie zaprezentowana klasa grafów, która go spełnia. Lemat został wprowadzony przez H. Qu i S. Cao, i pokazuje dokładną wartość indeksu AEDS w zależności od indeksu Wienera dla grafów wierzchołkowo-przechodnich.

Lemat 3.1.14. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech* G *będzie grafem wierzchołkowo–przechodnim o* n *wierzchołkach ze stopniem* δ*. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) = \frac{2\mathrm{rad}(G)}{\delta} W(G).$$

Możemy teraz usunąć założenie o wierzchołkowej–przechodniości i sformułować lemat jak poniżej:

Lemat 3.1.15. *Niech* G *będzie grafem* δ*-regularnym o* n *wierzchołkach. Niech* $\mathrm{rad}(G) = \mathrm{diam}(G)$*. Wtedy*

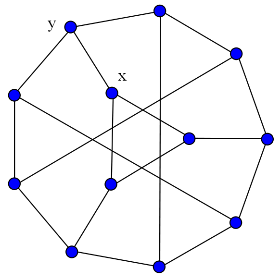
$$\xi^{sv}(G) = \frac{2\mathrm{rad}(G)}{\delta} W(G).$$

Dowód. Bezpośrednio z definicji indeksu AEDS uzyskujemy rezultat jak w lemacie. □

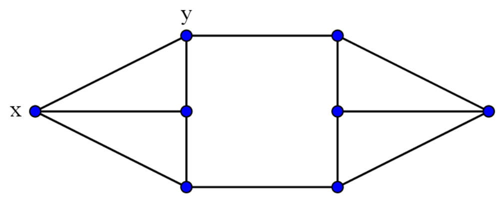
Przykłady grafów spełniających lemat 3.1.15 (ale nie lemat 3.1.14) można zobaczyć na rysunkach 3.10, 3.11, 3.12. Warto zwrócić uwagę, iż grafy nie są wierzchołkowo–przechodnie, ale są regularne. Rozważając strukturę sąsiedztwa wierzchołków x oraz y na rysunkach 3.10 i 3.11 (strukturę drugiego sąsiedztwa na rysunku 3.12), możemy zauważyć, że nie ma automorfizmu f w tych grafach, takiego, że $f(x) = f(y)$. Możemy utworzyć nieskończoną klasę grafów spełniającą lemat 3.1.15. W tym celu wprowadzamy definicję kompozycji grafów.

Kompozycja $G = G_1[G_2]$ (nazywana również produktem leksykograficznym) grafów G_1 i G_2 z rozłącznymi zbiorami wierzchołków V_1 i V_2 oraz zbiorami krawędzi E_1 i E_2, jest grafem ze zbiorem wierzchołków $V(G_1[G_2]) = V_1 \times V_2$ oraz zbiorem krawędzi zdefiniowanym jako: $E(G_1[G_2]) = \{\{(u_1, u_2), (v_1, v_2)\} : u_1, v_1 \in V(G_1) \wedge u_2, v_2 \in V(G_2) \wedge (u_1 = v_1 \wedge \{u_2, v_2\} \in E(G_2) \vee \{u_1, v_1\} \in E(G_1))\}$. Do każdego wierzchołka cyklu kopiujemy graf G_2, a następnie łączymy wierzchołki tylko wtedy, gdy istnieje krawędź pomiędzy odpowiednimi wierzchołkami w G_1.

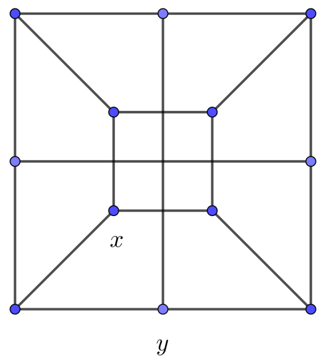
Niech G będzie grafem, który nie jest wierzchołkowo–przechodni, ale jest regularny, $\delta(G) = \Delta(G)$. Niech $F = C_n[G]$ będzie kompozycją grafów ($n > 3$), gdzie C_n jest



Rysunek 3.10: Graf Tietze'go, $n = 12$, $\mathrm{rad}(G) = \mathrm{diam}(G) = 3$.



Rysunek 3.11: Graf 3–regularny, $n = 8$, $\mathrm{rad}(G) = \mathrm{diam}(G) = 3$.



Rysunek 3.12: Graf 3–regularny, $n = 12$, $\mathrm{rad}(G) = \mathrm{diam}(G) = 3$.

n–wierzchołkowym cyklem. W tym przypadku mamy: $\mathrm{diam}(F) = \mathrm{rad}(F) = \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor$ oraz $\delta(F) = \Delta(F) = \delta(G) + 2|V(G)|$. Graf F jest regularny, ale nie jest wierzchołkowo–przechodni, ponieważ zawiera podgraf G, który nie jest wierzchołkowo–przechodni. Dzięki tej konstrukcji, otrzymujemy klasę grafów spełniającą lemat 3.1.15.

Dodatkowo, możemy utworzyć klasę $C_{n_1}[C_{n_2}[G]]$ oraz w ogólności $C_{n_1}[...[C_{n_s}[G]]...]$, która spełnia lemat 3.1.15.

Przed kolejnym twierdzeniem wprowadźmy definicje. **Zbiór pokrywający** grafu G to podzbiór $S \subseteq V(G)$ taki, że każda krawędź grafu G ma przynajmniej jeden wierzchołek końcowy w S. **Liczba pokrywająca** γ grafu G to minimalna liczba wierzchołków w dowolnym zbiorze pokrywającym. Twierdzenie 3.1.16 pokazuje kolejną własność indeksu AEDS, w zależności od wartości liczby pokrywającej.

Twierdzenie 3.1.16. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie spójnym grafem o n wierzchołkach z liczbą pokrywającą γ. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq \gamma + \frac{2(n-\gamma)(2n-\gamma-2)}{\gamma},$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_\gamma + \overline{K_{n-\gamma}}$.

Twierdzenie 3.1.17 to kolejne twierdzenie H. Qu i S. Cao z 2015 roku, które zostało udowodnione w dość skomplikowany sposób. Poniżej przedstawiamy jego treść oraz inną, łatwiejszą wersję dowodu z wykorzystaniem lematu 3.1.12.

Twierdzenie 3.1.17. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie spójnym grafem rzędu n z liczbą chromatyczną χ. Niech $n = \chi s + r$, gdzie $0 \leq r < \chi$. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq \frac{2s(\chi-r)(n+s-2)}{n-s} + \frac{2r(s+1)(n+s-1)}{n-s-1},$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong T_{n,\chi}$.

Dowód. Graf G rzędu n z liczbą chromatyczną χ ma maksymalną liczbę krawędzi wtedy i tylko wtedy, gdy jest grafem Turána, $T_{n,\chi} = K_n - rK_{s+1} - (\chi-r)K_s$ ([21], strona 149). Zatem z lematu 3.1.12 otrzymujemy: $\xi^{sv}(T_{n,\chi}) < \xi^{sv}(G)$ dla każdego n-wierzchołkowego grafu $G \neq T_{n,\chi}$ z $\chi(G) = \chi$.

Policzmy teraz wartość $\xi^{sv}(T_{n,\chi})$.

Jeśli $r = 0$, to z lematu 3.1.15 otrzymujemy:

$$\xi^{sv}(T_{n,\chi}) = \frac{2\mathrm{rad}(T_{n,\chi})}{\delta} W(T_{n,\chi}).$$

Mamy następujące zależności:

1. $D(v) = n - s + 2(s-1) = n + s - 2$,

2. $W(T_{n,\chi}) = \frac{1}{2}\sum_{v \in V(T_{n,\chi})} D(v) = \frac{1}{2}n(n+s-2)$,

3. $\mathrm{rad}(T_{n,\chi}) = \mathrm{diam}(T_{n,\chi}) = 2$,

4. $\delta = n - s$,

a co za tym idzie

$$\xi^{sv}(T_{n,\chi}) = \frac{2}{n-s}n(n+s-2) = \frac{2s\chi(n+s-2)}{n-s}.$$

Jeśli $r > 0$, to

$$\xi^{sv}(T_{n,\chi}) = \sum_{v \in V(T_{n,\chi})} \frac{\varepsilon(v)D(v)}{\deg(v)} = 2\left(\sum_{v \in W_1} \frac{D(v)}{\deg(v)} + \sum_{v \in W_2} \frac{D(v)}{\deg(v)}\right),$$

gdzie $V(T_{n,\chi})$ jest podzielony na dwie grupy: W_1 oraz W_2. W jednej z nich mamy r podzbiorów o mocy $s+1$, natomiast w drugiej mamy $\chi - r$ podzbiorów o mocy s.

$$W_1 = \bigcup_{i=1}^{r} V_i, \text{ gdzie } |V_i| = s+1 \text{ dla } i = 1, ..., r, |W_1| = r(s+1)$$

$$W_2 = \bigcup_{i=r+1}^{\chi} V_i, \text{ gdzie } |V_i| = s \text{ dla } i = r+1, ..., \chi, |W_2| = (\chi - r)s$$

Jeśli $v \in W_1$, to $\deg(v) = n - (s+1)$ oraz $D(v) = n + s - 1$.

Jeśli $v \in W_2$, to $\deg(v) = n - s$ oraz $D(v) = n + s - 2$.

Otrzymujemy zatem:

$$\xi^{sv}(T_{n,\chi}) = 2\left((\chi - r)s\frac{n+s-2}{n-s} + r(s+1)\frac{n+s-1}{n-s-1}\right).$$

To kończy dowód. □

Zdefiniujemy teraz kolejne pojęcia, aby wprowadzić dalsze własności indeksu AEDS.

Obcięcie wierzchołkowe grafu G to podzbiór $V'(G)$ zbioru $V(G)$, taki, że $G - V'$ nie jest spójny. **Obcięcie κ-wierzchołkowe** to obcięcie wierzchołkowe, które ma κ elementów. **Spójność wierzchołkowa** grafu G, oznaczana przez $\kappa(G)$, to minimalna κ dla której G ma obcięcie κ-wierzchołkowe.

Spójność krawędziowa to minimalna liczba krawędzi $\lambda(G)$ (krótko λ), których usunięcie z grafu G rozspójnia graf. Spójność krawędziowa grafu, który nie jest spójny wynosi 0, natomiast grafu spójnego z mostem wynosi 1.

Istnieje następująca zależność pomiędzy spójnością wierzchołkową, spójnością krawędziową i minimalnym stopniem grafu:

Twierdzenie 3.1.18. *(H. Whitney 1932 [89], F. Harary 1994 [44]) Niech $\kappa(G)$ będzie spójnością wierzchołkową, a $\lambda(G)$ spójnością krawędziową grafu G oraz $\delta(G)$ jego minimalnym stopniem. Wtedy*

$$\kappa(G) \leq \lambda(G) \leq \delta(G).$$

Przejdziemy teraz do twierdzeń, które pokazują ograniczenia dolne dla indeksu AEDS w terminach stopnia minimalnego i maksymalnego oraz spójności wierzchołkowej i krawędziowej. Twierdzenia 3.1.19–3.1.22 przedstawiają bardzo podobne rezultaty. Każdy z pokazanych wyników różni się od poprzedniego tylko podstawieniem zadanego parametru. W pierwszym twierdzeniu, tym parametrem jest stopień minimalny.

Twierdzenie 3.1.19. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu n z minimalnym stopniem δ. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq 2n - \delta + 4(n - \delta - 1)\left(\frac{1}{\delta} + \frac{1}{n-2}\right),$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_\delta + (K_1 \cup K_{n-\delta-1})$.

Kolejne twierdzenie to ograniczenie indeksu AEDS w zależności od spójności wierzchołkowej.

Twierdzenie 3.1.20. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu n o spójności wierzchołkowej κ. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq 2n - \kappa + 4(n - \kappa - 1)\left(\frac{1}{\kappa} + \frac{1}{n-2}\right),$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_\kappa + (K_1 \cup K_{n-\kappa-1})$.

Przejdziemy teraz do twierdzenia z wykorzystaniem spójności krawędziowej.

Twierdzenie 3.1.21. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu n o spójności krawędziowej λ. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq 2n - \lambda + 4(n - \lambda - 1)\left(\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{n-2}\right),$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_\lambda + (K_1 \cup K_{n-\lambda-1})$.

Warto zwrócić uwagę, iż twierdzenie 3.1.21 nie jest prawdziwe, gdy $\lambda < \delta$, gdzie δ jest minimalnym stopniem grafu G. Podobnie, otrzymujemy rezultat dla indeksu AEDS w terminach stopnia maksymalnego:

Twierdzenie 3.1.22. *(H. Qu, S. Cao 2015 [79]) Niech G będzie grafem spójnym rzędu n z maksymalnym stopniem Δ. Wtedy*

$$\xi^{sv}(G) \geq 2n - \Delta + 4(n - \Delta - 1)\left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{n-2}\right),$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_\Delta + (K_1 \cup K_{n-\Delta-1})$.

Warto zwrócić uwagę, iż twierdzenie 3.1.22 nie zachodzi dla $\Delta = n-1$. Gdy $\Delta = n-1$ to graf jest grafem pełnym i wtedy z definicji indeksu AEDS otrzymujemy

$$\xi^{sv}(G) = n \cdot \frac{1 \cdot (n-1)}{n-1} = n.$$

Z twierdzenia wynika natomiast, że

$$\xi^{sv}(G) \geq 2n - (n-1) + 4(n-n+1-1)\left(\frac{1}{n-1} + \frac{1}{n-2}\right) = n+1,$$

co jest sprzecznością.

W kolejnej sekcji zajmiemy się własnościami indeksu AEDS po wprowadzeniu pewnej transformacji.

3.1.4 Wpływ transformacji grafowych na wartości indeksu AEDS

W przypadku transformacji grafowych, różni autorzy rozważali różne konstrukcje. My zajmiemy się jedną z nich i będzie to transformacja ściągania krawędzi. Będziemy rozważali grafy, które są bardzo często wykorzystywane do badań w chemii.

Niech H będzie grafem spójnym o przynajmniej dwóch wierzchołkach. Niech $u \in V(H)$. Niech ponadto $K_{1,p+1}$ będzie gwiazdą ze zbiorem wierzchołków $\{v, u, w_1, ..., w_p\}$, gdzie v jest wierzchołkiem centralnym gwiazdy. Graf G jest połączeniem grafu H i gwiazdy $K_{1,p+1}$ w wierzchołku u. W innych słowach, niech uv będzie krawędzią grafu G ze stopniem $\deg(u) \geq 2$. Niech $\{u, w_1, w_2, ..., w_p\}$, $p \geq 1$, będą sąsiadami wierzchołka v, natomiast $w_1, w_2, ..., w_p$ będą stopnia 1.
Przekształcimy teraz graf G do grafu G' w sposób następujący:

$$V(G') = V(G)$$

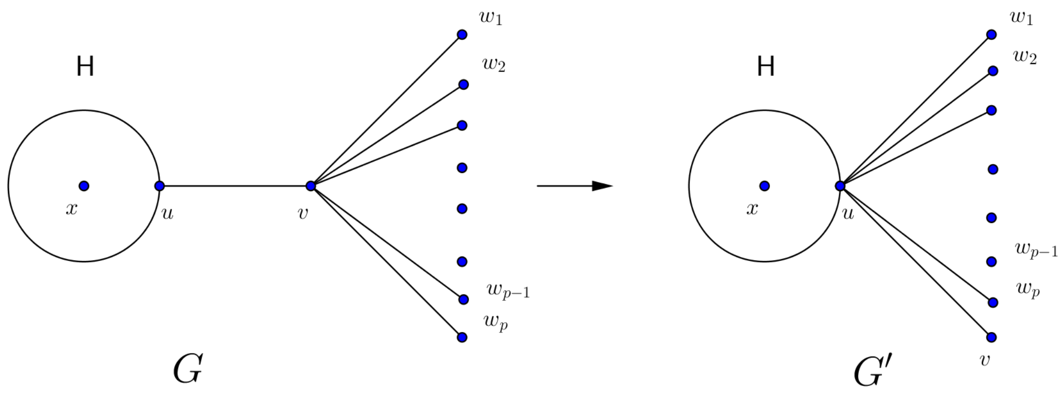
$$E(G') = E(G) \cup \{uw_1, uw_2, ..., uw_p\} \backslash \{vw_1, vw_2, ...vw_p\}$$

W skrócie, tę operację będziemy zapisywać jak poniżej:

$$G' = G + \{uw_1, uw_2, ..., uw_p\} - \{vw_1, vw_2, ...vw_p\}.$$

Rysunek 3.13 przedstawia opisaną transformację.

W poniższym twierdzeniu przedstawimy jaki wpływ ma dana transformacja na wartości indeksu AEDS.



Rysunek 3.13: Transformacja $G \to G'$, gdzie $G' = G + \{uw_1, uw_2, ..., uw_p\} - \{vw_1, vw_2, ...vw_p\}$.

Twierdzenie 3.1.23. *(H. Bielak, K. Broniszewska 2019 [6]) Niech H będzie grafem spójnym rzędu conajmniej dwa oraz niech $u \in V(H)$. Niech ponadto $K_{1,p+1}$ będzie gwiazdą ze zbiorem wierzchołków $\{v, u, w_1, ..., w_p\}$, $p \geq 1$, gdzie v jest wierzchołkiem centralnym gwiazdy. Niech graf G będzie złączeniem grafu H oraz gwiazdy $K_{1,p+1}$ w wierzchołku u. Niech G' będzie zdefiniowany jako (rysunek 3.13):*

$$G' = G + \{uw_1, uw_2, ..., uw_p\} - \{vw_1, vw_2, ...vw_p\}.$$

Jeśli $p \geq \varepsilon_G(v)$, to zachodzi

$$\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G) < 0.$$

Dowód. Niech graf G będzie złączeniem grafu H oraz gwiazdy $K_{1,p+1}$ w wierzchołku u. Niech graf G' będzie grafem przetransformowanym, czyli

$$G' = G + \{uw_1, uw_2, ..., uw_p\} - \{vw_1, vw_2, ...vw_p\}.$$

Zacznijmy od przedstawienia tego, jak zmieniły się wartości acentryczności, stopni oraz sumy odległości po wykonaniu transformacji grafu G.

Niech $\eta = \begin{cases} 0, & \deg_H(u) = |V(H)| - 1 \\ 1, & \deg_H(u) \neq |V(H)| - 1. \end{cases}$

1. W przypadku stopni mamy następujące zależności:

   (a) $\deg_{G'}(v) = 1 = \deg_G(v) - p$,

(b) $\deg_{G'}(u) = \deg_G(u) + \deg_G(v) - 1$,

(c) dla wszystkich $x \in V(H)\backslash\{u\}$ mamy $\deg_{G'}(x) = \deg_G(x)$,

(d) dla wszystkich $1 \leq i \leq p$ mamy $\deg_{G'}(w_i) = \deg_G(w_i) = 1$.

2. Mamy następujące zależności dla sumy odległości:

(a) $D_{G'}(v) = D_G(v) + \deg_G(v) - 1$,

(b) $D_{G'}(u) = D_G(u) - \deg_G(v) + 1$,

(c) dla wszystkich $x \in V(H)\backslash\{u\}$ mamy $D_{G'}(x) = D_G(x) - p$,

(d) dla wszystkich $1 \leq i \leq p$ mamy $D_{G'}(w_i) = D_G(w_i) - |V(H)| + 1$.

3. Acentryczności zmieniły się następująco:

(a) $\varepsilon_{G'}(v) = \varepsilon_G(v)$,

(b) $\varepsilon_{G'}(u) = \varepsilon_G(u) - (1 - \eta)$,

(c) dla wszystkich $1 \leq i \leq p$ mamy $\varepsilon_{G'}(w_i) = \varepsilon_G(w_i) - 1$.

(d) Dla wierzchołków $x \in V(H)\backslash\{u\}$ mamy dwa przypadki:

i. *Przypadek 1.* Niech $\varepsilon_G(x) > d_G(x, \hat{x})$ dla wszystkich $\hat{x} \in V(H)$. Wtedy $\varepsilon_G(x) = d_G(x, w_i)$ dla wszystkich $i = 1, 2, ...$ oraz $\varepsilon_{G'}(x) = \varepsilon_G(x) - 1$.

ii. *Przypadek 2.* Niech $\varepsilon_G(x) = d_G(x, \hat{x})$ dla pewnego $\hat{x} \in V(H)$. Wtedy $\varepsilon_G(x) = \varepsilon_H(x)$ oraz $\varepsilon_{G'}(x) = \varepsilon_G(x)$.

Zdefiniujmy teraz dwa zbiory.

Podzielimy graf H w sposób następujący: $V(H)\backslash\{u\} = X_= \cup X_{\neq}$, gdzie $X_{\neq}$ jest zbiorem wierzchołków spełniających przypadek 1 oraz $X_=$ jest zbiorem wierzchołków spełniających przypadek 2.

Warto zwrócić uwagę, iż jeśli $\eta = 0$, to $X_= = \emptyset$ oraz $|X_{\neq}| = |V(H)| - 1$.

Rozważmy teraz wartości indeksu AEDS. Wprost z definicji otrzymujemy następującą wartość:

$$\xi^{sv}(G') = \sum_{v \in V(G')} \frac{\varepsilon(v)D(v)}{\deg(v)} = \sum_{x \in X_=} \frac{\varepsilon_{G'}(x)D_{G'}(x)}{\deg_{G'}(x)} + \sum_{x \in X_{\neq}} \frac{\varepsilon_{G'}(x)D_{G'}(x)}{\deg_{G'}(x)}$$
$$+ \frac{\varepsilon_{G'}(u)D_{G'}(u)}{\deg_{G'}(u)} + \frac{\varepsilon_{G'}(v)D_{G'}(v)}{\deg_{G'}(v)} + \sum_{i=1}^{p} \frac{\varepsilon_{G'}(w_i)D_{G'}(w_i)}{\deg_{G'}(w_i)}$$

Po skorzystaniu z relacji (1) – (3) mamy:

$$
\begin{aligned}
\xi^{sv}(G') = & \sum_{x \in X_=} \frac{(D_G(x) - p)\varepsilon_G(x)}{\deg_G(x)} + \sum_{x \in X_{\neq}} \frac{(D_G(x) - p)(\varepsilon_G(x) - 1)}{\deg_G(x)} \\
& + \frac{(D_G(u) - \deg_G(v) + 1)(\varepsilon_G(u) - (1 - \eta))}{\deg_G(u) + \deg_G(v) - 1} \\
& + \frac{(D_G(v) + \deg_G(v) - 1)\varepsilon_G(v)}{\deg_G(v) - p} \\
& + p\frac{(D_G(w_1) - |V(H)| + 1)(\varepsilon_G(w_1) - 1)}{\deg_G(w_1)}.
\end{aligned}
$$

Warto zwrócić uwagę na dodatkowe zależności:

(a) $D_G(u) = D_G(v) - |V(H)| + 1 + p$,

(b) $\deg_G(v) = p + 1$,

(c) $\deg_G(u) = \deg_H(u) + 1$,

(d) $\varepsilon_G(u) = \varepsilon_G(v) - \eta$,

(e) $D_G(w_1) = D_G(v) + |V(H)| + p - 1$.

Po wyodrębnieniu informacji o $\xi^{sv}(G)$ oraz skorzystaniu z powyższych zależności otrzymujemy:

$$\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G) = A + B + C + D,$$

gdzie:

$$A = -p \sum_{x \in X_=} \frac{\varepsilon_G(x)}{\deg_G(x)} - \sum_{x \in X_{\neq}} \frac{D_G(x)}{\deg_G(x)}$$

$$B = -p \sum_{x \in X_{\neq}} \frac{\varepsilon_G(x)}{\deg_G(x)} + p \sum_{x \in X_{\neq}} \frac{1}{\deg_G(x)}$$

$$C = \frac{D_G(u)(\varepsilon_G(u) - (1 - \eta))}{\deg_G(u) + p} - \frac{p(\varepsilon_G(u) - (1 - \eta))}{\deg_G(u) + p} - \frac{D_G(u)\varepsilon_G(u)}{\deg_G(u)}$$

$$D = D_G(v)\varepsilon_G(v) + p\varepsilon_G(v) - \frac{D_G(v)\varepsilon_G(v)}{p + 1} - pD_G(v) - p^2 - p\varepsilon_G(w_1)(|V(H)| - 1)$$

Przeanalizujemy, czy wartość wyrażenia $\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G)$ jest dodatnia czy ujemna.

Jest oczywiste, że wartość wyrażenia A jest ujemna. Wartość wyrażenia B jest również ujemna, ponieważ $\varepsilon_G(x) \geq 3$. Zapiszemy teraz wyrażenie C jak poniżej:

$$\begin{aligned} C &= \frac{D_G(u)\varepsilon_G(u)}{\deg_G(u)+p} - \frac{D_G(u)(1-\eta)}{\deg_G(u)+p} - \frac{p(\varepsilon_G(u)-(1-\eta))}{\deg_G(u)+p} - \frac{D_G(u)\varepsilon_G(u)}{\deg_G(u)} \\ &= D_G(u)\varepsilon_G(u)\left(\frac{1}{\deg_G(u)+p} - \frac{1}{\deg_G(u)}\right) - \frac{D_G(u)(1-\eta)}{\deg_G(u)+p} - \frac{p(\varepsilon_G(u)-(1-\eta))}{\deg_G(u)+p} \end{aligned}$$

co oznacza, że jego wartość jest również ujemna.

Rozważmy teraz wyrażenie $D_G(v)\varepsilon_G(v) + p\varepsilon_G(v) - pD_G(v) - p^2$ (pozostałe składniki całego wyrażenia D są ujemne). Otrzymujemy równanie kwadratowe zmiennej p. Policzmy Δ.

$$\Delta = (\varepsilon_G(v) - D_G(v))^2 - 4(-1)D_G(v)\varepsilon_G(v)$$

$$\Delta = (\varepsilon_G(v) + D_G(v))^2$$

$$\sqrt{\Delta} = \varepsilon_G(v) + D_G(v)$$

$$p_1 = \varepsilon_G(v), p_2 = -D_G(v)$$

Oznacza to, że dla wszystkich $p \geq \varepsilon_G(v)$ wartość wyrażenia D jest ujemna.

Otrzymujemy zatem, iż dla $p \geq \varepsilon_G(v)$ zachodzi $\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G) < 0$. To kończy dowód.

□

Wniosek 3.1.24. *Jeśli $\eta = 0$, to $\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G) < 0$ dla wszystkich $p \geq 1$.*

Dowód. Rozpatrując przypadek $\eta = 0$ w twierdzeniu 3.1.23 mamy $\varepsilon_G(v) = 2$. Oznacza to, że $\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G) < 0$ dla wszystkich $p \geq 2$. Możemy dodatkowo rozważyć sytuację, gdy $p = 1$.

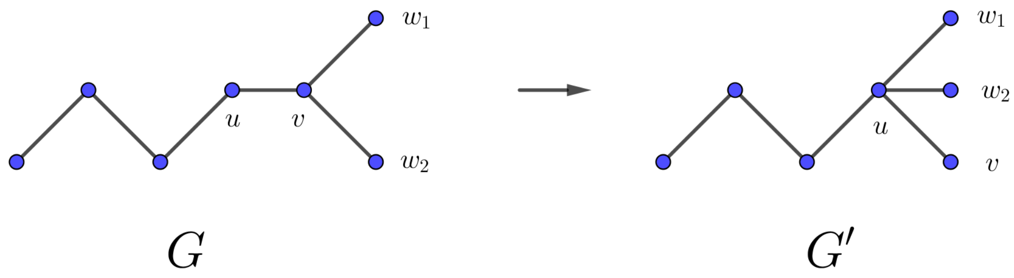
Niech $\eta = 0$ i $p = 1$. Rozważamy wyrażenie $C + D$ i mamy następujące zależności:

1. $D_G(v) = p + 1 + 2(|V(H)| - 1)$,
2. $D_G(u) = |V(H)| + 2p$,
3. $\deg_G(u) = |V(H)|$,
4. $\varepsilon_G(u) = 2$.

$$
\begin{aligned}
C + D = &\frac{(D_G(u)-1)(\varepsilon_G(u)-1)}{\deg_G(u)+1} - \frac{D_G(u)\varepsilon_G(u)}{\deg_G(u)} \\
&+ \varepsilon_G(v) + \frac{D_G(v)\varepsilon_G(v)}{2} - D_G(v) - 1 - \varepsilon_G(w_1)(|V(H)|-1) \\
&= 1 - \frac{2(|V(H)|+2)}{|V(H)|} + 2 - 1 - \varepsilon_G(w_1)(|V(H)|-1) \\
&= -\frac{4}{|V(H)|} - \varepsilon_G(w_1)(|V(H)|-1) < 0
\end{aligned}
$$

Ponieważ wartość wyrażenia $C + D$ jest ujemna dla $\eta = 0$ i $p = 1$ wnioskujemy, iż w przypadku, gdy $\eta = 0$ mamy $\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G) < 0$ dla wszystkich $p \geq 1$. $\square$

Rozpatrzmy teraz sytuację, w której $\eta = 1$ oraz $p < \varepsilon_G(v)$. Weźmy, na przykład, grafy jak na rysunku 3.14.



Rysunek 3.14: Transformacja $G' = G + \{uw_1, uw_2\} - \{vw_1, vw_2\}$.

Mamy wtedy: $\eta = 1$, $p = 2$, $\varepsilon_G(v) = 4$, czyli $p < \varepsilon_G(v)$. Wyznaczamy wartości indeksu AEDS i otrzymujemy: $\xi^{sv}(G) = 100 + 30 + 18 + 16\frac{1}{2} + 16 + 2 \cdot 85 = 350\frac{1}{2}$, $\xi^{sv}(G') = 72 + 19\frac{1}{2} + 10 + 6\frac{3}{4} + 3 \cdot 56 = 276\frac{1}{4}$. Oznacza to, że pomimo sprzeczności z założeniem o tym, iż $p \geq \varepsilon_G(v)$, otrzymaliśmy rezultat $\xi^{sv}(G') - \xi^{sv}(G) < 0$. Nie jest to odosobniony przypadek. Podobnych przykładów jest więcej, jednak dowód pozostaje wciąż kwestią otwartą.

Zajmiemy się teraz innym indeksem ściśle związanym z acentrycznością i będzie to indeks EDS.

3.2 Indeks EDS

Indeks EDS (z ang. eccentric distance sum index) został przedstawiony przez S. Guptę, M. Singh'a oraz A. K. Madana [33] w 2002 roku. Autorzy w swojej pracy zaprezentowali, między innymi, ścisłe powiązania tego indeksu z zagadnieniami chemicznymi, takimi jak, na przykład QSAR.

Indeksem EDS nazywamy następującą sumę:

$$\xi^d(G) = \sum_{v \in V(G)} D(v)\varepsilon(v).$$

Indeks EDS może być również zdefiniowany w sposób alternatywny jako:

$$\xi^d(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} (\varepsilon(u) + \varepsilon(v))d(u,v).$$

Definicje są równoważne, ponieważ zachodzi równość jak poniżej:

$$\begin{aligned}
\xi^d(G) &= \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} (\varepsilon(u) + \varepsilon(v))d(u,v) \\
&= \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \varepsilon(u)d(u,v) + \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \varepsilon(v)d(u,v) \\
&= 2 \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \varepsilon(v)d(u,v) = \sum_{v \in V(G)} \sum_{u \in V(G)} \varepsilon(v)d(u,v) = \sum_{v \in V(G)} D(v)\varepsilon(v).
\end{aligned}$$

W ostatniej równości skorzystaliśmy z zależności: $D(v) = \sum_{u \in V(G)} d(u,v)$.

3.2.1 Własności indeksu EDS

Wielu matematyków zajmowało się indeksem EDS. W szczególności A. Ilić, G. Yu i L. Feng, którzy pokazali, między innymi, kilka jego własności dla drzew i grafów jednocyklicznych. Zostały one przedstawione w twierdzeniach 3.2.1 oraz 3.2.2.

Twierdzenie 3.2.1. *(G. Yu, L. Feng, A. Ilić 2011 [93]) Niech G będzie drzewem o n wierzchołkach, $n \geq 3$. Wtedy*

$$\xi^d(G) \geq 4n^2 - 9n + 5$$

z równością wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong S_n$.

Twierdzenie 3.2.2. *(H. Hua, K. Xu, S. Wen 2011 [50], G. Yu, L. Feng, A. Ilić 2011 [93]) Niech G będzie grafem jednocyklicznym z ilością wierzchołków $n \geq 4$. Wtedy*

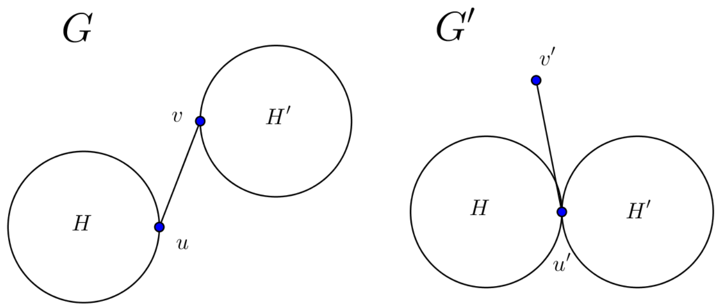
$$\xi^d(G) \geq 4n^2 - 9n + 1$$

z równością wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong H_{n,3}$, gdzie $H_{n,3}$ to graf otrzymany z C_3 poprzez dodanie $n - 3$ wierzchołków stopnia 1 do jednego z wierzchołków C_3.

W powyższym twierdzeniu 3.2.2 autorzy [93] podali założenie $n \geq 6$. Okazuje się jednak, że twierdzenie jest prawdziwe dla $n \geq 4$, co pokazano w artykule [50] z bibliografii.

Zdefiniujemy teraz pewną transformację, dla której udowodniono kolejną własność indeksu EDS.

Niech uv będzie mostem grafu G i niech H oraz H' będą nietrywialnymi spójnymi składowymi grafu $G - \{uv\}$, takimi, że $u \in H$, natomiast $v \in H'$. Tworzymy graf $\delta(G, uv)$ poprzez zidentyfikowanie wierzchołków u oraz v (nazywamy ten wierzchołek u') oraz dodajemy dodatkową krawędź $u'v'$. Mówimy, że $G' = \delta(G, uv)$ jest **δ-transformacją** grafu G (rysunek 3.15). Dla opisanej transformacji zachodzi twierdzenie 3.2.3 poniżej:



Rysunek 3.15: δ-transformacja grafu G.

Twierdzenie 3.2.3. *(H. Hua, S. Zhang, K. Xu 2012 [52]) Niech uv będzie mostem grafu G oraz niech $G' = \delta(G, uv)$ będzie δ-transformacją G. Wtedy*

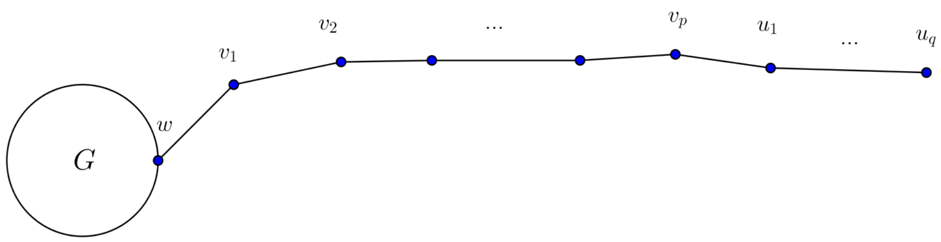
$$\xi^d(G') < \xi^d(G).$$

Kolejne twierdzenie dotyczy grafów $G(p, q)$ zdefiniowanych w rozdziale 2.3. W twierdzeniu pojawia się oznaczenie $G(p+q, 0)$, przez które będziemy rozumieć graf powstały z grafu $G(p, q)$ poprzez usunięcie krawędzi wu_1 oraz dodanie krawędzi $v_p u_1$.

Twierdzenie 3.2.4. *(A. Ilić, G. Yu, L. Feng 2011 [57]) Niech $G(p+q, 0)$ będzie grafem zdefiniowanym jak powyżej. Niech r będzie acentrycznością wierzchołka w dla grafu G. Jeśli $r \geq p \geq q \geq 1$, to*

$$\xi^d(G(p, q)) < \xi^d(G(p + q, 0)).$$

Graf $G(p+q,0)$ przedstawiony jest na rysunku 3.16. W porównaniu do grafów na rysunkach 2.1 oraz 2.2, graf $G(p+q,0)$ różni się długością dołączonej ścieżki.



Rysunek 3.16: Graf $G(p+q,0)$.

W 2018 roku H. Hua, H. Wang i I. Gutman [49] pokazali pewne zależności pomiędzy indeksem EDS oraz acentrycznymi indeksami zagrzebskimi. **Pierwszy acentryczny indeks zagrzebski** $EM_1(G)$ oraz **drugi acentryczny indeks zagrzebski** $EM_1(G)$ zostały niezależnie zdefiniowane przez D. Vukičevića i A. Graovaca [86] oraz M. Ghorbaniego i M. A. Hosseinzadeha [32] w sposób następujący:

$$EM_1(G) = \sum_{u \in V(G)} \varepsilon(u)^2$$

$$EM_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} \varepsilon(u)\varepsilon(v).$$

Najnowsze rezultaty dotyczące tych indeksów można znaleźć, między innymi, w pracach [15, 77, 78]. Twierdzenia 3.2.5, 3.2.6 oraz 3.2.7 pokazują wspomniane wcześniej zależności. Wartości indeksu EDS są większe, bądź równe wartościom acentrycznych indeksów zagrzebskich pod opisanymi warunkami.

Twierdzenie 3.2.5. *(H. Hua, H. Wang, I. Gutman 2018 [49]) Niech G będzie spójnym grafem rzędu n. Wtedy*

$$\xi^d(G) \geq EM_1(G)$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_2$.

Twierdzenie 3.2.6. *(H. Hua, H. Wang, I. Gutman 2018 [49]) Niech T będzie drzewem. Wtedy*

$$\xi^d(T) > EM_2(T).$$

Twierdzenie 3.2.7. *(H. Hua, H. Wang, I. Gutman 2018 [49]) Niech G będzie spójnym grafem z promieniem r oraz maksymalnym stopniem Δ. Jeśli $r \geq \Delta$, to*

$$\xi^d(G) \geq EM_2(G).$$

Szczegółowe dowody powyższych twierdzeń można znaleźć w pracy autorstwa H. Hua, H. Wang, I. Gutman [49].

3.2.2 Indeks EDS dla kaktusów oraz innych klas grafów

Zaprezentujemy teraz bardzo ciekawe twierdzenie H. Hua, K. Xu i S. Wen [50] opisujące dolne ograniczenie dla indeksu EDS dla kaktusów. Następnie czytelnik może zapoznać się z rezultatami uogólnionymi dla tego ograniczenia z ideą dowodu opartą na dowodzie wspomnianego twierdzenia.

Niech Cat_{n,k_2} oznacza graf, który jest kaktusem utworzonym poprzez dołączenie k_2 niezależnych krawędzi pomiędzy wierzchołkami stopnia 1, n-wierzchołkowej gwiazdy $K_{1,n-1}$. Bardziej precyzyjnie możemy zapisać:

$$Cat_{n,k_2} = K_1 + (k_2 P_2 \cup (n-1-2k_2)K_1),$$

gdzie $0 \leq k_2 \leq \frac{n-1}{2}$.

Twierdzenie 3.2.8. *(H. Hua, K. Xu, S. Wen 2011 [50]) Niech G będzie kaktusem o $n \geq 4$ wierzchołkach oraz $k_2 \geq 0$ cyklach. Wtedy*

$$\xi^d(G) \geq 4n^2 - 9n - 4k_2 + 5$$

z równością wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong Cat_{n,k_2}$.

Wprowadzamy, ponadto, lemat jak poniżej:

Lemat 3.2.9. *Niech G będzie grafem rzędu n o rozmiarze m. Jeśli* $\mathrm{rad}(G) \geq 2$, *to*

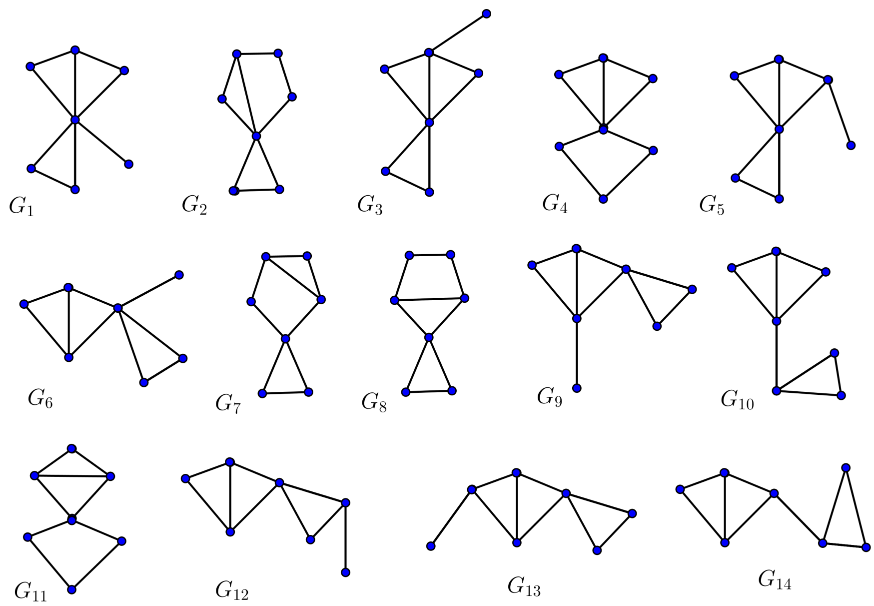
$$\xi^d(G) \geq 4n(n-1) - 4m$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $\mathrm{rad}(G) = 2$.

Dowód. Z definicji indeksu EDS mamy:

$$\begin{aligned}
\xi^d(G) \geq 2 \sum_{v\in V(G)} D(v) &= 2\Big(\sum_{v\in V(G)} \deg(v) + \sum_{v\in V(G)} \sum_{u\in V(G)\setminus N(v)} d(v,u) \Big) \\
&\geq 2\Big(\sum_{v\in V(G)} \deg(v) + \sum_{v\in V(G)} \sum_{u\in V(G)\setminus N(v)} 2 \Big) \\
&= 2\Big[\sum_{v\in V(G)} \deg(v) + \sum_{v\in V(G)} 2(n-\deg(v)-1) \Big] \\
&= 2\Big[2n(n-1) - \sum_{v\in V(G)} \deg(v) \Big] = 4n(n-1) - 4m.
\end{aligned}$$

□



Rysunek 3.17: Grafy z klasy $\mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$, gdzie $n = 7$, $k_2 = 1$ oraz $k_3 = 1$. Wartości indeksu EDS: $\xi^d(G_1) = 126$, $\xi^d(G_2) = 174$, $\xi^d(G_3) = 175$, $\xi^d(G_4) = 189$, $\xi^d(G_5) = 191$, $\xi^d(G_6) = 191$, $\xi^d(G_7) = 195$, $\xi^d(G_8) = 196$, $\xi^d(G_9) = 197$, $\xi^d(G_{10}) = 217$, $\xi^d(G_{11}) = 254$, $\xi^d(G_{12}) = 255$, $\xi^d(G_{13}) = 264$, $\xi^d(G_{14}) = 286$.

Rozważmy teraz inną strukturę grafową niż kaktus. Niech n, k_2, k_3 będą liczbami całkowitymi, gdzie $k_2, k_3 \geq 0$ oraz $n \geq 2k_2 + 3k_3 + 1$. Niech $\mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$ będzie klasą grafów spójnych rzędu n składających się z bloków: k_2 cykli bez cięciw, k_3 cykli z jedną cięciwą oraz ewentualnie ścieżek P_2. Kilka przykładów pokazuje rysunek 3.17 (warto zwrócić uwagę, iż mamy $\xi^d(G_5) = \xi^d(G_6) = 191$). Dla tej klasy grafów zostanie zaprezentowane dolne ograniczenie dla indeksu EDS i jest to rozszerzony rezultat z twierdzenia 3.2.8. Idea dowodu opiera się na dowodzie twierdzenia 3.2.8.

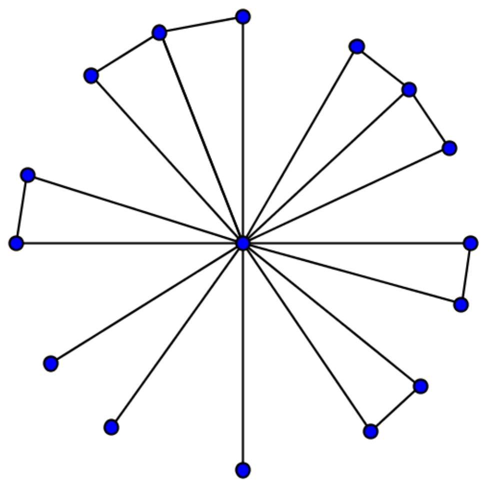
Twierdzenie 3.2.10. *(H. Bielak, K. Broniszewska 2017 [5]) Niech n, k_2, k_3 będą liczbami całkowitymi, gdzie $k_2, k_3 \geq 0$ oraz $n \geq 2k_2 + 3k_3 + 1$. Niech $G \in \mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$ będzie grafem rzędu $n \geq 5$. Wtedy*

$$\xi^d(G) \geq 4n^2 - 9n - 8k_3 - 4k_2 + 5$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong \widehat{G}_{n,k_2,k_3}$, gdzie $\widehat{G}_{n,k_2,k_3} = K_1 + (k_3P_3 \cup k_2P_2 \cup (n-1-k_2-k_3)K_1)$.

Dowód. Rozważamy graf G z klasy $\mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$.

Niech S_i będzie zbiorem wierzchołków o acentryczności równej i oraz niech $n_i = |S_i|$. Rozważmy najpierw przypadek, gdy $n_1 > 0$. Niech v będzie wierzchołkiem dla którego $\varepsilon(v) = 1$. Wtedy każdy wierzchołek $u \in V(G) \backslash \{v\}$ jest sąsiadem v. W związku z tym, że $n \geq 5$ i $G \in \mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$, to G może jedynie być grafem utworzonym z k_3 niezależnych ścieżek P_3 i k_2 niezależnych ścieżek P_2 pośród wierzchołków stopnia 1 gwiazdy $K_{1,n-1}$, czyli $G \cong \widehat{G}_{n,k_2,k_3}$. Przykład takiego grafu pokazuje rysunek 3.18.



Rysunek 3.18: Przykład grafu $\widehat{G}_{n,k_2,k_3}$, gdzie $n = 16$, $k_2 = 3$ i $k_3 = 2$.

Ponieważ $n_1 = 1$ mamy:

$$\begin{aligned}
\xi^d(\widehat{G}_{n,k_2,k_3}) &= (n-1) && \text{(dla wierzchołka } v \text{ z } \varepsilon(v) = 1)\\
&+ 4(k_2+k_3)(2(n-3)+2) && \text{(dla wierzchołków } v \text{ z } \deg(v) = 2)\\
&+ 2k_3(2(n-4)+3) && \text{(dla wierzchołków } v \text{ z } deg(v) = 3)\\
&+ 2(n-1-3k_3-2k_2)(2(n-2)+1) && \text{(dla wierzchołków } v \text{ z } deg(v) = 1)\\
&= 4n^2 - 9n - 8k_3 - 4k_2 + 5.
\end{aligned}$$

Rozważmy teraz przypadek, gdy $G \in \mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$ oraz $n_1 = 0$. Tutaj mamy $\varepsilon(v) \geq 2$ dla każdego wierzchołka v w grafie. Z Lematu 3.2.9 mamy

$$\xi^d(G) \geq 4n(n-1) - 4m.$$

Ze struktury grafu wynika, że $m = n-1+2k_3+k_2$, gdzie $n-1$ jest ilością krawędzi w drzewie rozpinającym naszego grafu i $2k_3 + k_2$ jest sumą krawędzi, które nie należą do tego drzewa rozpinającego.

Wynik jest następujący:

$$\begin{aligned}
\xi^d(G) - \xi^d(\widehat{G}_{n,k_2,k_3}) &\geq [4n(n-1) - 4m] - [4n^2 - 9n - 8k_3 - 4k_2 + 5]\\
&= [4n(n-1) - 4(n-1+2k_3+k_2)] - [4n^2 - 9n - 8k_3 - 4k_2 + 5]\\
&= n - 1 > 0.
\end{aligned}$$

To kończy dowód. $\square$

Twierdzenie 3.2.10 nie może być rozszerzone dla $n = 4$ z $k_3 = 1$, ponieważ w takim przypadku $\xi^d(K_1 + (P_2 \cup K_1)) = 29$, ale $\xi^d(K_2 + 2K_1) = 22$.

Jeśli zastosujemy $k_3 = 0$ w twierdzeniu 3.2.10 to natychmiast otrzymamy rezultat z twierdzenia 3.2.8 dla $n \geq 5$.

Zdefiniujmy teraz następującą klasę grafów. Niech p, q będą całkowitymi liczbami dodatnimi, gdzie $q \geq p \geq 1$ i niech $k_p, k_{p+1}, ..., k_q$ będzie ciągiem liczb całkowitych, gdzie $k_i \geq 0$ dla $p \leq i \leq q$; $k_p, k_q \geq 1$ oraz $n = 1 + \sum_{i=p}^{q} k_i i$. Niech $\mathcal{G}$ będzie klasą spójnych grafów rzędu n, składającą się z k_i bloków izomorficznych do $K_1 + P_i$, $p \leq i \leq q$. Liczby p, q są długościami najkrótszej i najdłuższej ściezki P_i, odpowiednio. Dla opisanej powyżej klasy grafów, wprowadzamy twierdzenie 3.2.11.

Twierdzenie 3.2.11. *(H. Bielak, K. Broniszewska 2017 [5]) Niech $G \in \mathcal{G}$ będzie grafem z ilością wierzchołków n, $n \geq 5$. Wtedy*

$$\xi^d(G) \geq 4n^2 - 9n + 5 - 4\sum_{i=p}^{q} k_i(i-1)$$

z równością zachodzącą wtedy i tylko wtedy, gdy $G \cong K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_i P_i$, gdzie $n = 1 + \sum_{i=p}^{q} k_i i$ oraz p, q są długościami najkrótszej i najdłuższej ścieżki P_i, odpowiednio.

Dowód. Dla naszego grafu G liczba wierzchołków o acentryczności równej jeden wynosi $n_1 \leq 1$, ponieważ $n \geq 5$.

Przypadek 1. Jeśli $\varepsilon(v) = 1$ dla v w G, to każdy wierzchołek $u \in V(G) \backslash \{v\}$ jest sąsiadem v. Teraz wiemy, że w tym przypadku G może jedynie być grafem izomorficznym z $K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_i P_i$.

Zajmijmy się teraz policzeniem wartości dla $\xi^d(K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_i P_i)$. Jest tylko jeden wierzchołek v dla którego $\varepsilon(v) = 1$ i jest oczywiste, że $D(v) = n - 1$. Dla każdego innego wierzchołka u w G mamy $\varepsilon(u) \geq 2$. Każda dołączona ścieżka P_i ma dwa „końce" (dla tych wierzchołków mamy dwa wierzchołki w odległości 1, a wszystkie pozostałe są w odległości 2) i $(i-2)$ wewnętrznych wierzchołków P_i (dla tych wierzchołków mamy 3 wierzchołki w odległości 1). Liczba pozostałych wierzchołków wynosi $n - 1 - \sum_{i=p}^{q} ik_i$.

Mamy zatem:

$$\begin{aligned}
\xi^d(K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_i P_i) &= n - 1 && \text{(wierzchołek } v \text{ z } \varepsilon(v) = 1) \\
&+ 2 \cdot 2 \cdot (2 \cdot (n-3) + 2) \sum_{i=p}^{q} k_i && \text{(„końce" ścieżki)} \\
&+ 2 \cdot (2 \cdot (n-4) + 3) \sum_{i=p}^{q} (i-2) k_i && \text{(wewnętrzne wierzchołki ścieżki)} \\
&+ 2 \cdot (2 \cdot (n-2) + 1) \left(n - 1 - \sum_{i=p}^{q} ik_i \right) && \text{(wierzchołki stopnia 1)}
\end{aligned}$$

Wykonując obliczenia otrzymujemy:

$$\xi^d(K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_i P_i) = n - 1 + (8n - 16) \sum_{i=p}^{q} k_i + (4n - 10) \sum_{i=p}^{q} ik_i$$

$$
\begin{aligned}
&- 2(4n-10)\sum_{i=p}^{q} k_i + (4n-6)(n-1) - (4n-6)\sum_{i=p}^{q} ik_i \\
&= (n-1)(4n-5) + (8n-16-8n+20)\sum_{i=p}^{q} k_i \\
&+ (4n-10-4n+6)\sum_{i=p}^{q} ik_i
\end{aligned}
$$

Podsumowując, ostatecznie dostajemy:

$$
\begin{aligned}
\xi^d(K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_iP_i) &= 4n^2 - 9n + 5 + 4\sum_{i=p}^{q} k_i - 4\sum_{i=p}^{q} ik_i \\
&= 4n^2 - 9n + 5 - 4\sum_{i=p}^{q} k_i(i-1).
\end{aligned}
$$

Przypadek 2. Rozważmy teraz przypadek, gdy $n_1 = 0$. Mamy wówczas $\varepsilon(v) \geq 2$ dla każdego wierzchołka v w G. W związku z tym, również $\mathrm{rad}(G) \geq 2$, czyli możemy wnioskować z lematu 3.2.9, iż $\xi^d(G) \geq 4n(n-1) - 4m$. Ponadto $m = n - 1 + \sum_{i=p}^{q} k_i(i-1)$.

Badamy następującą różnicę:

$$
\begin{aligned}
&\xi^d(G) - \xi^d(K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_iP_i) \\
&\geq [4n(n-1) - 4m] - [4n^2 - 9n + 5 - 4\sum_{i=p}^{q} k_i(i-1)] \\
&= [4n(n-1) - 4(n - 1 + \sum_{i=p}^{q} k_i(i-1))] - [4n^2 - 9n + 5 - 4\sum_{i=p}^{q} k_i(i-1)] \\
&= n - 1 > 0
\end{aligned}
\tag{3.7}
$$

Wnioskujemy, iż dla naszego grafu G zachodzi $\xi^d(G) \geq \xi^d(K_1 + \bigcup_{i=p}^{q} k_iP_i)$. To kończy dowód twierdzenia. □

W tym rodziale zostały przedstawione pewne własności indeksu EDS. Przedstawiono również twierdzenia pokazujące dolne ograniczenia dla tego indeksu dla kaktusów oraz innych klas grafów. Wciąż pozostaje jednak otwarty problem związany z tym, jak porządkować grafy z klasy $\mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$. Porządkowanie grafów polega na ustawieniu kolejności ich występowania względem wartości indeksu. Należy zwrócić uwagę, iż klasa $\mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$ nie może być porządkowana przez wartość indeksu EDS dla $n = 7$,

$k_2 = 1$, $k_3 = 1$, ponieważ dla grafów G_5 oraz G_6 z rysunku 3.17 jest ona równa i wynosi $\xi^d(G_5) = \xi^d(G_6) = 191$. Ponadto, grafy G_5 oraz G_6 nie mogą być porządkowane przez wartość indeksu Wienera, która ponownie jest dla nich równa i wynosi $W(G_5) = W(G_6) = 36$. Mogą być one jednak uporządkowane przez wartość indeksu AEDS. Dla grafu G_5 wynosi ona $\xi^{sv}(G_5) = 106,3$, natomiast dla grafu G_6 mamy $\xi^{sv}(G_6) = 103,3$. Podsumowując, możemy uporządkować klasę $\mathcal{G}_{7,1,1}$ korzystając z dwóch indeksów: EDS oraz w dalszej kolejności AEDS.

Podsumowanie

Niniejsza rozprawa doktorska została poświęcona zagadnieniom związanym z indeksami topologicznymi w teorii grafów. Opisano definicje oraz własności wybranych indeksów. Dodatkowo, poruszono temat ich zachowania przy różnych przekształceniach. Zagadnienia te są bardzo obszerne, stąd też pozostawiono czytelnikowi problemy otwarte do własnej analizy.

W rozdziale pierwszym przypomnieliśmy podstawowe pojęcia i definicje z dziedziny teorii grafów. Zostały one zilustrowane wieloma przykładami, aby ułatwić czytelnikowi zrozumienie przedstawianego zagadnienia.

W rozdziale drugim poznaliśmy indeks Wienera, indeksy pochodzące od indeksu Wienera (zmodyfikowany indeks Wienera, biegunowy indeks Wienera, indeks zmiennej Wienera, indeks hyper–Wiener) oraz ich własności. W szczególności zaprezentowano tam przykłady dwudrzew maksymalnych dla uogólnionego biegunowego indeksu Wienera przy pewnych szczególnych założeniach oraz przypadek ogólny dla jego maksymalych wartości.

Rozdział trzeci poświęcono indeksom związanym z acentrycznością, w szczególności AEDS oraz EDS. Opisano, między innymi, ograniczenia górne i dolne dla indeksu AEDS wraz z rezultatami uogólnionymi. Ponadto, czytelnik znajdzie tam również uproszczony dowód twierdzenia zaprezentowanego przez H. Qu i S. Cao w 2015 roku. Dodatkowo, opisano wpływ transformacji ściągania krawędzi na wartości indeksu AEDS.

Druga część rozdziału trzeciego to rozważania na temat własności indeksu EDS dla kaktusów oraz innych klas grafów. Udowodniono tam twierdzenia obrazujące dolne ograniczenia tego indeksu.

Zagadnienia otwarte pozostawione w tej pracy to, między innymi, problem wyznaczenia wartości uogólnionego biegunowego indeksu Wienera $W_k(G)$ dla dwudrzew dla $k = 2$ oraz $k = 3$. Dodatkowo, otwarta pozostaje kwestia porządkowania grafów z klasy $\mathcal{G}_{n,k_2,k_3}$. Nie mogą być one porządkowane przez wartości indeksu EDS, ani przez wartości indeksu Wienera.

Przedstawione w tej pracy zagadnienia dotyczą indeksów topologicznych w teorii grafów. Mają one bardzo szerokie zastosowanie w wielu dziedzinach nauki, takich jak, na przykład farmacja, chemia, genetyka czy geografia. Stosuje się je w dużej mierze do produkcji leków, stąd też ciągle postępujący rozwój tej dziedziny jest bardzo istotny.

W dzisiejszych czasach zmagamy się z coraz to bardziej zmutowanymi wirusami, które powodujaą nowe, trudniejsze do wyleczenia choroby. Oby rozwój zagadnienia indeksów topologicznych w teorii grafów, przyczynił się do rozwoju innych dziedzin, które mają na celu odnalezienie skutecznego lekarstwa na choroby, które do tej pory były nieuleczalne.

Lista symboli i oznaczeń

C_n	cykl rzędu n
$D(v)$	suma wszystkich odległości z wierzchołka v
$d(u,v)$	odległość pomiędzy wierzchołkami u oraz v
$\deg(v)$	stopień wierzchołka v
$\mathrm{diam}(G)$	średnica grafu G
$E(G)$	zbiór krawędzi grafu G
$EM_1(G)$	pierwszy acentryczny indeks zagrzebski dla grafu G
$EM_2(G)$	drugi acentryczny indeks zagrzebski dla grafu G
$g(G)$	talia grafu G
G'	podgraf grafu G
$\overline{G}$	dopełnienie grafu G
$G_1 \cong G_2$	graf G_1 izomorficzny z grafem G_2
$G_1[G_2]$	kompozycja grafów G_1 oraz G_2
K_n	graf pełny rzędu n
$K_{r,s}$	graf pełny dwudzielny
$M_1(G)$	pierwszy indeks zagrzebski dla grafu G
$M_2(G)$	drugi indeks zagrzebski dla grafu G
$M_k(T)$	uogólnienie indeksów zagrzebskich
$N(v)$	otwarte sąsiedztwo wierzchołka v
$N[v]$	domknięte sąsiedztwo wierzchołka v
P_n	ścieżka rzędu n
$P(v)$	zbiór wierzchołków peryferyjnych względem wierzchołka v
$\mathrm{rad}(G)$	promień grafu G
S	zbiór pokrywający grafu G
S_n	gwiazda rzędu n

T_n	drzewo o n wierzchołkach
$T_{n,k}$	graf Turána
$V(G)$	zbiór wierzchołków grafu G
$W(G)$	indeks Wienera dla grafu G
$W(G, x)$	wielomian Hosoya grafu G w x
$W_k(G)$	uogólniony biegunowy indeks Wienera dla grafu G
$WP(G)$	biegunowy indeks Wienera dla grafu G
$WW(G)$	indeks hyper–Wiener dla grafu G
${}^mW(G)$	zmodyfikowany indeks Wienera dla grafu G
${}^mW_\lambda(G)$	indeks zmiennej Wienera dla grafu G
γ	liczba pokrywająca grafu G
$\delta(G)$	minimalny stopień w grafie G
$\Delta(G)$	maksymalny stopień w grafie G
$\varepsilon(v)$	acentryczność wierzchołka v
$\zeta(G)$	acentryczność całkowita
$\kappa(G)$	spójność wierzchołkowa grafu G
$\lambda(G)$	spójność krawędziowa grafu G
$\xi^d(G)$	indeks EDS dla grafu G
$\xi^{sv}(G)$	indeks AEDS dla grafu G
$\chi(G)$	liczba chromatyczna

Spis rysunków

Bibliografia

[1] M. Azari, A. Iranmanesh, *Computing the eccentric–distance sum for graph operations*, Discrete Appl. Math. 161 (2013) 2827–2840.

[2] R. Balakrishnan, N, Sridharan, K. Viswanathan Iyer, *Wiener index of graphs with more than one cut–vertex*, Applied Mathematics Letters 21 (2008) 922–927, doi: 10.1016/j.aml.2007.10.003.

[3] S. Bekkai, M. Kouider, *On mean distance and girth*, Discrete Appl. Math. 158 (2010) 1888–1893.

[4] A. Bethoei, M. Jannesari, B. Taeri, *Maximum Zagreb index, minimum hyper–Wiener index and graph connectivity*, Applied Mathematics Letters 22 (2009) 1571–1576, doi: 10.1016/j.aml.2009.05.001.

[5] H. Bielak, K. Broniszewska, *Eccentric distance sum index for some classes of connected graphs*, Annales UMCS, Sectio A 71 (2017) 25–32, doi: http://dx.doi.org/10.17951/a.2017.71.2.25

[6] H. Bielak, K. Broniszewska, *Properties of the adjacent eccentric distance sum index*, 2020, manuskrypt

[7] H. Bielak, K. Dąbrowska, K. Wolska, *On the generalized Wiener polarity index for some classes of graphs*, Proceedings of the Federated Conference on Computer Science and Information Systems, ACSIS 5 (2015) 483–487, doi: 10.15439/2015F340.

[8] H. Bielak, K. Wolska, *On the adjacent eccentric distance sum of graphs*, Annales UMCS, Sectio A 68 (2014) 1–10, doi: 10.1515/umcsmath-2015-0001.

[9] D. Bonchev, N. Trinajstić, *Information theory, distance matrix, and molecular branching*, J. Chem. Phys. 67 (1977), 4517.

[10] J.A. Bondy, U.S.R. Murty, *Graph Theory with Application*, Macmillan London and Elsevier, New York, 1976.

[11] G. G. Cash, *Relationship between the Hosoya Polynomial and the Hyper–Wiener index*, Applied Mathematic Letters 15 (2002) 893-895.

[12] V. Chepoi, S. Klavžar, *The Wiener index and the Szeged index of benzenoid systems in linear time*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 37 (1997) 752-755, doi: 10.1021/ci9700079.

[13] P. Dankelmann, R. Entringer, *Average distance, minimum degree, and spanning trees*, J. Graph Theory 33 (2000) 1–13.

[14] P. Dankelmann. W. Goddard, S. Swart, *The average eccentricity of a graph and its subgraphs*, Util. Math., 65 (2004) 41–51.

[15] K. C. Das, D–W. Lee, A. Graovac, *Some properties of the Zagreb eccentricity indices*, Ars Math. Contemp. 6 (2013) 117–125.

[16] H. Deng, *On the extremal Wiener polarity index of chemical trees*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 60 (2011) 305–314.

[17] H. Deng, H. Xiao, *The maximum Wiener polarity index of trees with k pendants*, Applied Math. Letters 23 (2010) 710-715.

[18] H. Deng, H. Xiao, F. Tang, *The maximum Wiener polarity index of trees with k pendants*, Appl. Math. Lett. 23 (2010) 710–715, doi: 10.1016/j.aml.2010.02.013.

[19] H. Deng, H. Xiao, F. Tang, *On the extremal Wiener polarity index of trees with a given diameter*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 63 (2010) 257–264.

[20] J. Devillers, A. T. Balaban, *Topological indices and related descriptors in QSAR and QSPR*, Gordon and Breach, Amsterdam, 1999.

[21] R. Diestel, *Graph Theory*, Springer–Verlag New York, 1997.

[22] M. V. Diudea , I. Gutman, *Wiener–type topological indices*, Croar. Chem. Acta 71 (1998) 21–51.

[23] A. Dobrynin, R. C. Entringer, I. Gutman, *Wiener index of trees: theory and applications*, Acta Appl. Math. 66 (2001) 211–249, doi: 10.1023/A:1010767517079.

[24] A. Dobrynin, A. A. Kochetova, *Degree distance of a graph: A graph analogue of the Wiener index*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 34 (1994) 1082–1086.

[25] T. Došlić, B. Furtala, A. Graovac, I. Gutman, S. Moradi, Z. Yarahmadi, *On vertex–degree-based molecular structure descriptors*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 66 (2011) 613–626.

[26] W. Du, X. Li, Y. Shi, *Algorithms and extremal problem on Wiener polarity index*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 62 (2009) 235–244.

[27] Z. Du, B. Zhou, *A note on Wiener indices of uicyclic graphs*, Ars Combin. 93 (2009) 97–103.

[28] M. Eliasi, B. Taeri, *Extension of the Wiener index and Wiener polynomial*, Applied Mathematics Letters 21 (2008) 916-921, doi:10.1016/j.aml.2007.10.001.

[29] R. C. Entringer, D. E. Jackson, D. A. Snyder, *Distance in graphs*, Czechoslovak Math. J. 26 (1976) 283–296.

[30] L. Feng, A. Ilić, *Zagreb, Harary and hyper–Wiener indices of graphs with given matching number*, Appl. Math. Letters 23 (2010) 943–948.

[31] X. Geng, S. Li, M. Zhang, *Extremal values on the eccentric distance sum of trees*, Discrete Applied Mathematics 161 (2013) 2427–2439.

[32] M. Ghorbani, M. A. Hosseinzadeh, *A new version of Zagreb indices*, Filomat 26 (2012) 93–100.

[33] S. Gupta, M. Singh, A. K. Madan, *Eccentric distance sum: A novel graph invariant for predicting biological and phisical properties*, J. Math. Anal. Appl 275 (2002) 386–401.

[34] I. Gutman, *A new hyper–Wiener index*, Croat. Chem. Acta 77 (2004) 61–64.

[35] I. Gutman, B. Furtala, *Hyper–Wiener index vs. Wiener index. Two highly correlated structure descriptors*, Monatsch. Chem. 134 (2003) 975–981.

[36] I. Gutman, N. Trijnajstić, *Graph theory and molecular orbitals, total ϕ–electron energy of alternat hydrocarbons*, Chem. Phys. Lett. 17 (1972) 535–538.

[37] I. Gutman, D. Vidović, B. Furtala, I. G. Zenkevich, *Wiener–type indices and internal molecular energy*, J. Serb. Chem. Soc. 68 (2003) 401–408.

[38] I. Gutman, D. Vukičević, J. Žerovnik, *A class of modified Wiener indices*, Croat. Chem. Acta 77 (2004) 103–109.

[39] I. Gutman, Y.-N. Yeh, *The sum of all distances in bipartite graphs*, Mathematica Slovaca 45 (1995) 327–334.

[40] I. Gutman, Y.-N. Yeh, J. C. Chen, *On the sum of all distances in graphs*, Tamkang J. Math. 25 (1994) 83–86.

[41] I. Gutman, I. G. Zenkevich, *Wiener index and vibrational energy*, Z. Naturfosch. 57a (2002) 824–828.

[42] I. Gutman, J. Žerovnik, *Corroborating a modification of the Wiener index*, Croat. Chem. Acta 75 (2002) 603–612.

[43] I. Gutman, Y. Zhang, M. Dehmer, A. Ilić, Altenburg, *Wiener, and Hosoya polynomial*, In: Gutman, I., Furtula, B. (eds.) Distance in Molecular Graphs-Theory, Univerity of Kragujevac, Kragujevac 2012, 49–70.

[44] F. Harary, *Graph Theory*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1994.

[45] H. Hosoya, *Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons*, Bull. Chem. Soc. Jpn. 4 (1971) 2332–2339.

[46] H. Hosoya, *Mathematical and chemical analysis of Wiener's polarity number*, In: Rouvray, D.H., King, R.B. (eds.) Topology in Chemistry-Discrete Mathematics of Molecules, Horwood, Chichester 2002; doi: 10.1533/9780857099617.38.

[47] S. Hossein–Zadeh, A. Hamzeh, A. R. Ashrafi, *Wiener–type invariants of some graphs operations*, Filomat 23 (3) (2009) 103–113.

[48] H. Hua, K. Ch. Das, *On the Wiener polarity index of graphs*, Applied Mathematics and Computation 280 (2016) 162–167.

[49] H. Hua, H. Wang, I. Gutman, *Comparing eccentricity–based graph invariants*, Discussiones Mathematicae Graph Theory (2018) 1–15, doi: 10.7151/dmgt.2171.

[50] H. Hua, K. Xu, S. Wen, *A short and unified proof of Yu et al.'s two results on the eccentric distance sum*, J. Math. Anal. Appl. 382 (2011) 364–366.

[51] H. Hua, G. Yu, *Bounds for the adjacent eccentric distance sum*, International Mathematical Forum 7 (2002) 1289–1294.

[52] H. Hua, S. Zhang, K. Xu, *Further results on the eccentric distance sum*, Discrete App. Math. 160 (2012) 170–180.

[53] H. Hua, S. Zhang, *Relations between Zagreb coindices and some distance–based topological indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 68 (2012) 199–208.

[54] A. Ilić, *On the extremal properties of the average eccentricity*, Comput. Math. Appl. 64 (2012) 2877–2885.

[55] A. Ilić, M. Ilić, *Generalizations of Wiener Polarity Index and Terminal Wiener Index*, Graphs and Combinatorics 29 (2013) 1403–1416, doi: 10.1007/s00373-012-1215-6.

[56] A. Ilić, D. Stevanović, *On Comparing Zagreb Indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 62, 681–687 (2009).

[57] A. Ilić, G. Yu, L. Feng, *On the eccentric distance sum of graphs*, J. Math. Anal. Appl. 381 (2011) 590–600.

[58] M. Karelson, *Molecular descriptors in QSAR/QSPR*, Wiley, New York, 2000.

[59] M. H. Khalifeh, M. R. Darafsheh, H. Jolany, *The hyper-Wiener index of one-pentagonal carbon nanocone*, Current Nanoscience 9 (2013) 557–560.

[60] M. H. Khalifeh. H. Yousefi–Azari, A. R. Asarafi, *The first and second Zagreb indices of some graph operations*, Discrete Appl. Math. 157 (2009) 804–811.

[61] M. Knor, P. Potočnik, R. Škrekovski, *Relationship between the edge-Wiener index and the Gutman index of a graph*, Discrete App. Math. 167 (2014) 197–201.

[62] M. Knor, Mačaj, P. Potočnik, R Škrekovski, *Complete solution of equation $W(L^3(T)) = W(T)$ for the Wiener index of iterated line graph of trees*, Discrete Appl. Math. 171 (2014) 90–103.

[63] M. Kouider, P. Winkler, *Mean distance and minimum degree*, J. Graph Theory 25 (1997) 95–99.

[64] H. Lei, T. Li, Y. Shi, H. Wang, *Wiener polarity index and its generalization in trees*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 78 (2017) 199–212

[65] B. Liu, H. Hou, Y. Huang, *On the Wiener polarity index of trees with maximum degree or given number of leaves*, Comp. Math. Appl. 60 (2010) 2053–2057, doi:10.1016/j.camwa.2010.07.045.

[66] H. Liu, X. F. Pan, *On the Wiener index of trees with fixed diameter*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 60 (2008) 85–94.

[67] M. Liu, B. Liu, *A survey on recent results of variable Wiener index*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 69 (2013) 491–520.

[68] M. Liu, B. Liu, *On the Wiener polarity index*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 66 (2011) 293–304.

[69] M. Liu, B. Liu, *Trees with the seven smallest and fifteen greatest hyper–Wiener indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem 63 (2010) 151–170.

[70] B. Lučić, A Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *On variable Wiener index*, Indian J. Chem. 42A (2003) 1279–1282.

[71] I. Lukovits, *Wiener–type graph invariants*, In: M. V. Diudea (Ed.), QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors, Nova, Hutington, 2001, 31–38.

[72] I. Lukovits, W. Linert, *Polarity–numbers of cycle–containing structures*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 38 (1998) 715–719.

[73] B. Ma, B, Wu, W. Zhang, *Proximity and average eccentricity of a graph*, Information Processing Letters 112 (2012) 392–395.

[74] V. Mukungunugwa, S. Mukwembi, *On eccentric distance sum and minimum degree*, Disrecete Appl. Math. 175 (2014) 55–61.

[75] S. Nikolić, N. Trinajstić, M. Randić, *Wiener index revisited*, Chem. Phys. Lett. 333 (2001) 319–321.

[76] O. E. Polansky, in: MATH/CHEM/COMP/1988, ed. A. Graovac, Elsevier, Amsterdam 1989, 167.

[77] X. Qi, Z. Du, *On Zagreb eccentricity indices of trees*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 78 (2017) 241–256.

[78] X. Qi, B. Zhou, J. Li, *Zagreb eccentricity indices of unicyclic graphs*, Discrete Applied Mathematics 233 (2017) 166-174.

[79] H. Qu, S. Cao, *On the Adjacent Eccentric Distance Sum Index of Graphs*, PLoS ONE 10(6) (2015), doi: 10.1371/journal.pone.0129497.

[80] M. Randić, *Novel molecular descriptor for structure–property studies*, Chem. Phys. Lett. 211 (1993) 478–483.

[81] J. A. Rodríguez, J. M. Sigaretta, *On the Randić index ad conditional parameters of a graph*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry 54 (2) (2005) 403-416.

[82] S. Sardana, A. K. Madan, *Predicting anti-HIV activity of TIBO derivatives: a computational approach using a novel topological descriptor*, J. Mol. Model 8 (2002) 258–265.

[83] S. Sardana, A. K. Madan, *Relationship of Wiener's index and adjacent eccentric distance sum index with nitroxide free radicals and theor precursors as modifiers against oxidative damage*, J. Mol. Struct. Theochem 624 (2003) 53–59.

[84] R. Shi, *The average distance of trees*, Sys. Sci. Math. Sci. 6 (1993) 18–24.

[85] Y. Tang, B, Zhou, *On average eccentricity*, MATCH Commun, Math. Comput. Chem. 67 (2012) 405–423.

[86] D. Vukičević, A. Graovac, *Note on the comparison of the first and the second normalized Zagreb eccentricity indices*, Acta Chim. Sloven. 57 (2010) 524–528.

[87] S. G. Wagner, *A class of trees and its Wiener index*, Acta Applicandae Mathematicae 91 (2006) 119–132, doi: 10.1007/s10440-006-9026-5.

[88] H. Wang, G. Yu, *All but 49 numbers are Wiener indices of trees*, Acta Applicandae Mathematicae 92 (2006) 15–20, doi: 10.1007/s10440-006-9037-2.

[89] H. Whitney, *Congruent Graphs and the Connectivity of Graphs*, Amer. J. Math. 54 (1932) 150–168.

[90] H. Wiener, *Structural determination of paraffin boiling points*, J. Amer. Chem. Soc. 69 (1947) 17–20.

[91] A. Xinhui, W. Baoyindureng, *The Wiener index of the kth power of a graph*, Applied Mathematics Letters 21 (2008) 436–440, doi:10.1016/j.aml.2007.03.025.

[92] K. Xu, M. Liu, Kinkar Ch. Das, I. Gutmamn, B. Furtala, *A survey on graphs extremal with respect to distance–based topological indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 71 (2014) 461–508.

[93] G. Yu, L. Feng, A. Ilić, *On the eccentric distance sum of trees and unicyclic graphs*, J. Math. Anal. Appl. 375 (2011) 99-107.

[94] J. Yue, H. Lei, Y. Shi, *On the generalized Wiener polarity index of trees with a given diameter*, Discrete Applied Mathematics 243 (2018) 279–285.

[95] Y. Zhang, Y. Hu, *The Nordhaus–Gaddum–type inequality for the Wiener polarity index*, Applied Mathematics and Computation 273 (2016) 880–884.

[96] J. Zhang, J. Li, *On the maximal eccentric distance sum of graphs*, ISRN Appl. Math. 2011, Article ID 421456, 9 pages, doi: 10.5402/2011/421456.

[97] B. Zhou, I. Gutman, *Relations between Wiener, hyper–Wiener and Zagreb indices*, Chem. Phys. Lett. 394 (2004) 93–95.

[98] https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6165239/figure/biomolecules-08-00071-f001/?report=objectonly (dostęp 11.03.2020)

[99] https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6165239/figure/biomolecules-08-00071-f002/ (dostęp 11.03.2020)