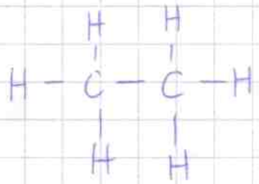
Algoritem za izračun $WX(G)$:

1. Preveri, ali je G kvazi-medianski graf.
2. Velja: če je $WX(G) < \infty$, tedaj je $WX(G) = \omega(G)$.

Izrek. $WX(G)$ lahko izračunamo v času $O(mn)$, kjer je $m = |E(G)|$, $n = |V(G)|$.

7. IZOMETRIJE V KEMIJSKI TEORIJI GRAFOV

molekula $\longmapsto$ graf molekule

 $\longmapsto$ 

alkani — drevesa

C_4H_{10} .. kemiki so ugotovili, da s tem zapisom molekula ni enolično določena

7.1. WIENERJEV INDEKS

Harry Wiener (1947):

G graf, tedaj je Wienerjev indeks:

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

Zgled. Izračunaj Wienerjev indeks za P_n (pot na n vozliščih).

$$W(P_n) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} (j-i) = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=i+1}^{n} j - \sum_{j=i+1}^{n} i \right) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{n(n+1)}{2} - \frac{i(i+1)}{2} - i(n-i) \right) =$$

$$= \frac{n^2(n+1)}{2} + \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\left(-\frac{i^2}{2} - \frac{i}{2} - in + i^2 \right)}_{\frac{i^2}{2} - \left(n+\frac{1}{2}\right) i} = \frac{n^2(n+1)}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} i^2 - \left(n+\frac{1}{2}\right) \frac{n(n+1)}{2} =$$

$$= \frac{n^2(n+1)}{2} - n(n+1)(2n+1) + \frac{1}{12}(2n+1)(n+1)n =$$

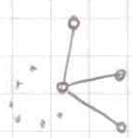
$$= \frac{m^2(m+1)}{2} - \frac{1}{6}(2m+1)(m+1)m = m(m+1)\left(\frac{m}{2} - \frac{1}{6} - \frac{1}{3}m\right) =$$
$$= m(m+1)\left(\frac{1}{6}m - \frac{1}{6}\right) = \frac{1}{6}m(m+1)(m-1) = \frac{m(m^2-1)}{6} = \binom{m+1}{3}$$

Izrek. Naj bosta G in H povezana grafa. Tedaj:
$$W(G \square H) = |V(G)|^2 W(H) + |V(H)|^2 W(G).$$

Dokaz. $$W(G\square H) = \frac{1}{2}\sum_{(g,h)}\sum_{(g',h')} d_{G\square H}((g,h),(g',h')) =$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{(g,h)}\sum_{(g',h')}\left(d_G(g,g') + d_H(h,h')\right) = \frac{1}{2}\sum_g\sum_h\sum_{g'}\sum_{h'}\left(d_G(g,g') + d_H(h,h')\right)$$
$$= \frac{1}{2}\sum_g\sum_h\sum_{g'}\sum_{h'} d_G(g,g') + \frac{1}{2}\sum_g\sum_h\sum_{g'}\sum_{h'} d_H(h,h') =$$
$$= \sum_h\sum_{h'} \underbrace{\frac{1}{2}\sum_g\sum_{g'} d_G(g,g')}_{W(G)} + \sum_g\sum_{g'} \underbrace{\frac{1}{2}\sum_h\sum_{h'} d_H(h,h')}_{W(H)} =$$
$$= |V(H)|^2 W(G) + |V(G)|^2 W(H).$$
■

Izrek. Med vsemi drevesi z m povezavami ima $K_{1,m}$ (zvezda) najmanjši Wienerjev indeks in P_{m+1} največji Wienerjev indeks.

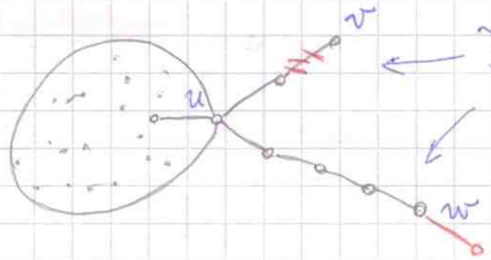
Dokaz. Vsaka povezava drevesa T prispeva 1 k $W(T)$. Vsak drug par vozlišč prispeva vsaj 2 ($d(u,v) \geq 2$, če u ni soseden z v).



V $K_{1,m}$ vsak tak par prispeva natanko 2. Ker ima vsako drevo z m povezavami natanko $m+1$ vozlišč, to pomeni da je $W(T)$ minimalen na $K_{1,m}$.

$$W(K_{1,m}) = m + \binom{m}{2}\cdot 2 = m + \frac{m(m-1)}{2}\cdot 2 = m^2.$$

T drevo, ki ni pot. Torej ima vozlišče stopnje vsaj 3. Izberemo lahko tako vozlišče (u), da je T naslednje oblike:

T : 

BŠS: $d(u,v) \leq d(u,w)$.

$T \longmapsto T'$. Velja: $W(T') > W(T)$.

Ta postopek ponavljamo tolikokrat časa, dokler ne ostanemo brez vozlišč stopnje 3. Dobimo pot.

7.2. WIENERJEV INDEKS DELNIH KOCK

delne kocke $\overset{def.}{=}$ izometrični podgrafi hiperkock

G je delna kocka, če $\exists d : G \xhookrightarrow{izom.} Q_d$.

$W_{uv} = \{w \mid d(u,w) < d(v,w)\}$ $\quad\Theta$: razbitje $E(G)$ na ekvivalenčne razrede

<u>Izrek</u>. Naj bo G delna kocka in naj bodo $x_1y_1, x_2y_2, \ldots, x_ky_k$ predstavniki njenih Θ-razredov. Tedaj velja:

$$W(G) = \sum_{i=1}^{k} |W_{x_iy_i}| \cdot |W_{y_ix_i}|.$$

(4. poglavje; (3) ⇒ (1))

<u>Dokaz</u>. V dokazu izreka, ki je karakteriziral delne kocke, smo ugotovili, da je $\alpha : V(G) \longrightarrow Q_k$, definiran z:

$$\alpha_i(v) = \begin{cases} 1; & v \in W_{x_iy_i} \\ 0; & v \in W_{y_ix_i} \end{cases}$$

izometrična preslikava.

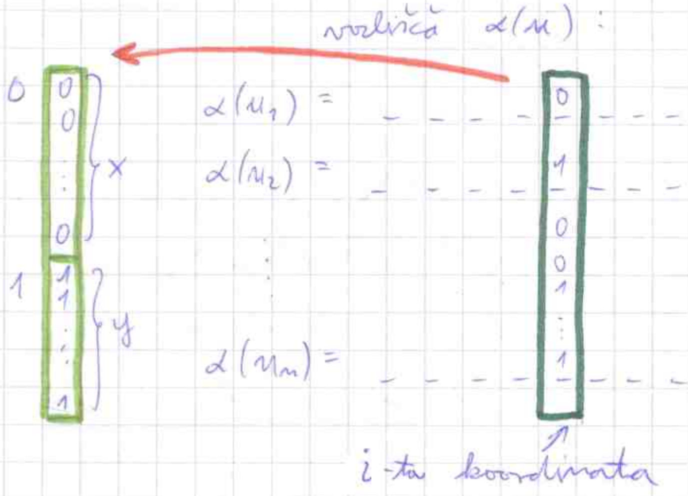
$$W(G) = \frac{1}{2}\sum_u \sum_v d_G(u,v) = \frac{1}{2}\sum_u \sum_v d_{Q_k}(\alpha(u), \alpha(v)) \;=$$

<u>Def</u>. $\delta_i(\alpha(u), \alpha(v)) = \begin{cases} 1; & \alpha(u) \text{ in } \alpha(v) \text{ se razlikujeta v } i\text{-ti koord.} \\ 0; & \text{sicer} \end{cases}$

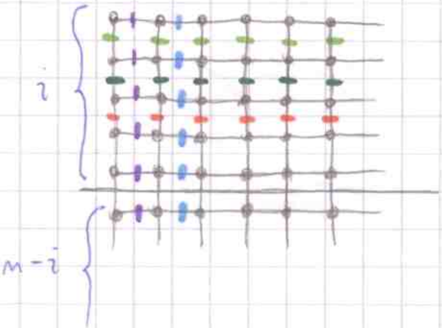
$$= \frac{1}{2}\sum_u \sum_v \sum_{i=1}^{k} \delta_i(\alpha(u), \alpha(v)) = \sum_{i=1}^{k} \Big(\underbrace{\frac{1}{2}\sum_u \sum_v \delta_i(\alpha(u), \alpha(v))}_{} \Big)$$

$x = |W_{x_i y_i}|$

$y = |W_{y_i x_i}|$



Zgled: Izračunaj $W(P_n \square P_n)$.



1. način: po izreku:

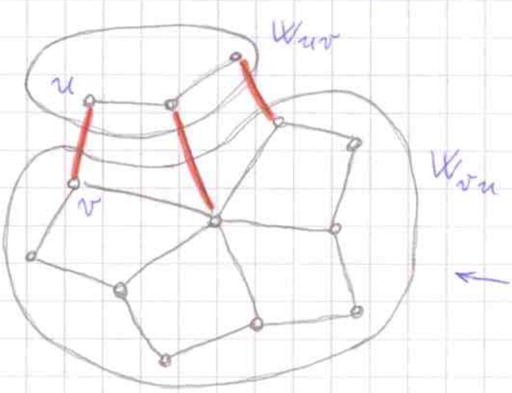
$$W(P_n \square P_n) = 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} (in)\cdot(n(n-i)) =$$

$$= 2n^2\Big(n\sum_{i=1}^{n-1} i - \sum_{i=1}^{n-1} i^2\Big) = \frac{1}{3}n^3(n^2-1)$$

2. način: po trditvi: $W(P_n \square P_n) = 2\cdot n^2 \cdot \binom{n+1}{3} =$

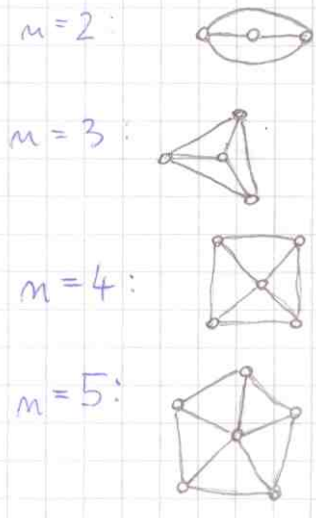
$$= 2n^2 \cdot \frac{(n+1)n(n-1)}{6} = \frac{1}{3}n^3(n^2-1)$$

Primer: Dvodelna kolesa BW_n:



← slika za $n = 6$

W_n ... kolesa



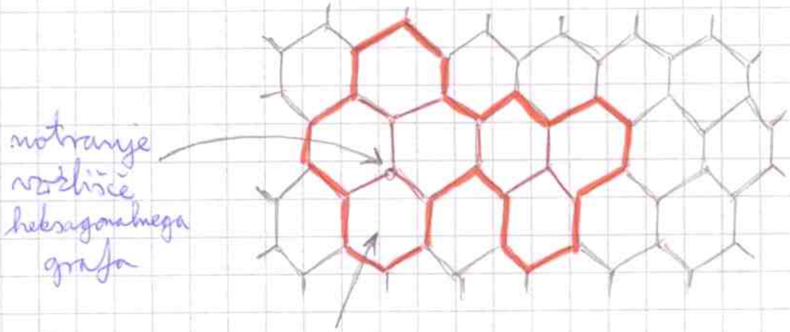
$|W_{uv}| = 3$

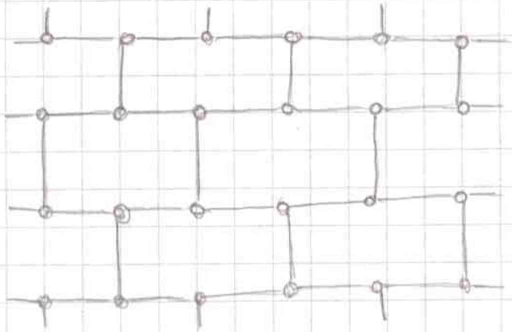
$|W_{vu}| = (2n+1) - 3 = 2n-2$

$$W = n\cdot 3\cdot(2n-2) = \underline{6n^2 - 6n}$$

7.3. WIENERJEV INDEKS HEKSAGONALNIH GRAFOV V LINEARNEM ČASU

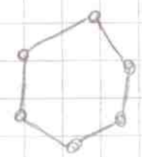
$\mathcal{H}$ ... neskončna heksagonalna mreža v $\mathbb{R}^2$:





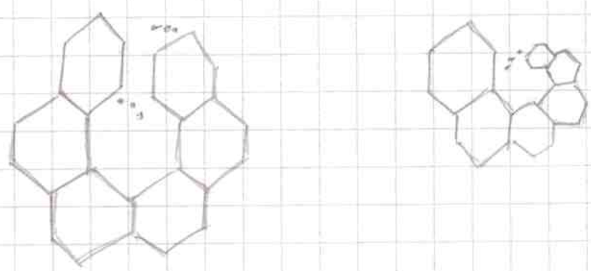
heksagonalni ali benzenoidni graf

Najmanjši heksagonalni graf je C_6:



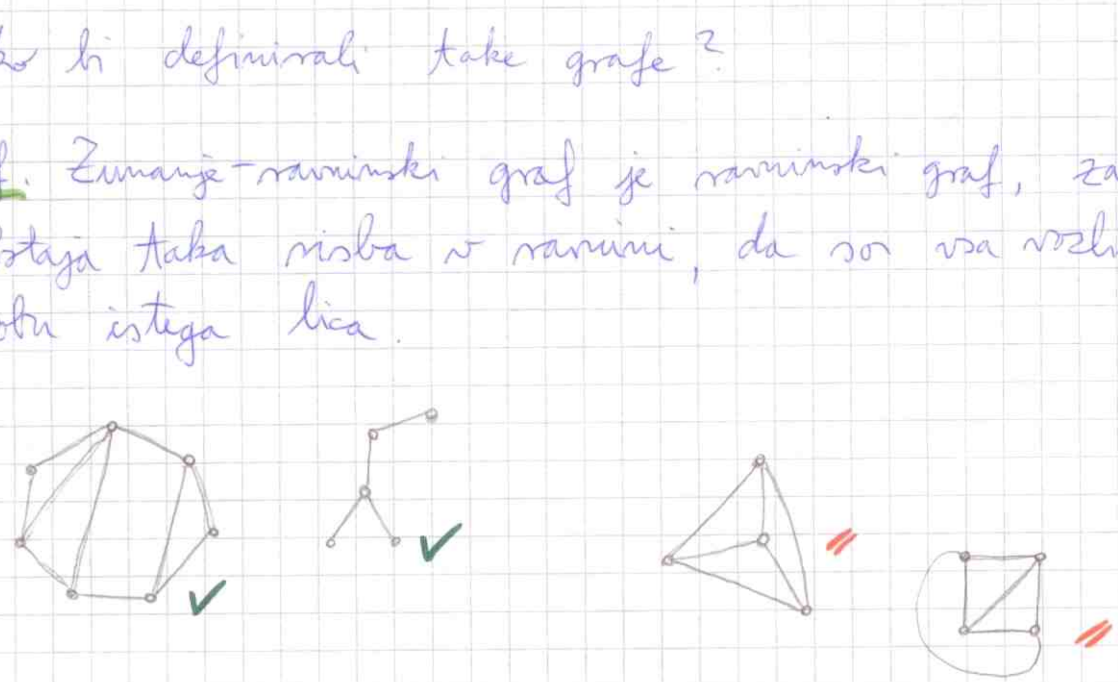
, ki je graf benzena.

Heksagonalne grafe bi lahko definirali tudi malce splošneje, tako da bi definicija vključevala tudi npr.:

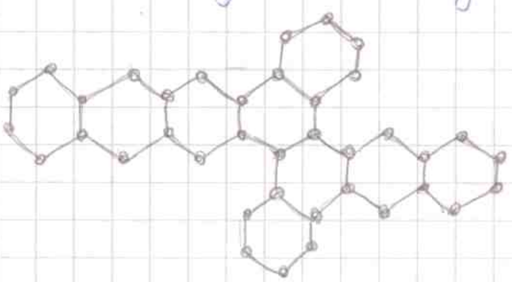


Kako bi definirali take grafe?

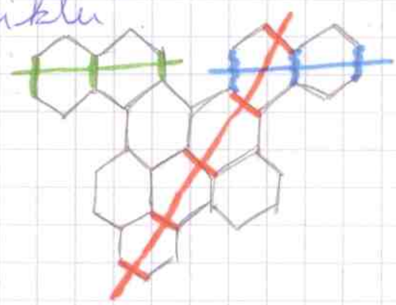
Def. Zunanje-ravninski graf je ravninski graf, za katerega obstaja taka risba v ravnini, da so vsa vozlišča na robu istega lica.



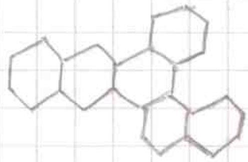
Def. Zunanje-ravninskim heksagonalnim grafom pravimo **katakondenzirani**, sicer pa perikondenzirani. Z drugimi besedami, katakondenzirani heksagonalni grafi so natanko tisti, ki nimajo notranjih vozlišč.



Def. **Prerez** heksagonalnega grafa G je množica vzporednih povezav, ki je maksimalna glede na relacijo "biti nasproten na nekem 6-ciklu".



Zgled. Koliko vozlišč in povezav imajo katakondenzirani heksagonalni grafi?

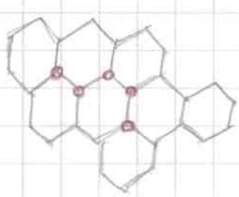


h … število šestkotnikov

$n = 6 + (h-1)\cdot 4 = 4h+2$

$m = 6 + (h-1)\cdot 5 = 5h+1$

Kaj pa splošni heksagonalni grafi?



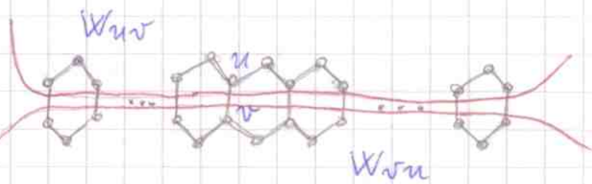
t … število notranjih vozlišč

$n = 4h+2-t$

$m = 5h+1-t$

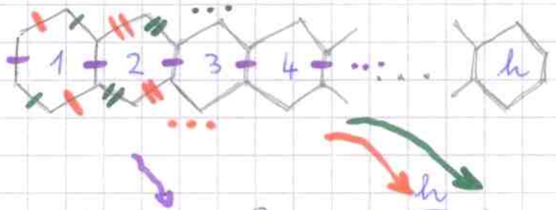
Trditev. Heksagonalni grafi so delne kocke.

Dokaz.



□

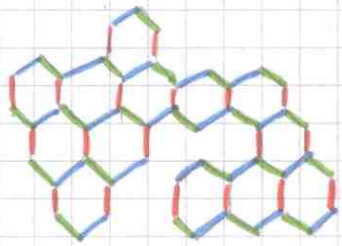
Zgled. Izračunaj $W(L_h)$.

L_h: 

Po izreku:

$$W(L_h) = (1+2h)^2 + 2\sum_{i=1}^{h}(4i-1)\bigl(4h+2-(4i-1)\bigr)$$
$$= \frac{1}{3}(16h^3 + 36h^2 + 26h + 3)$$

VLOŽITEV V 3 DREVESA

G: 

E_1

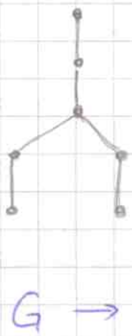
E_2

E_3

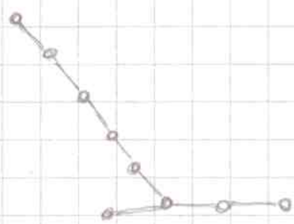
Razbijmo množico povezav heksagonalnega grafa v razrede E_1, E_2, E_3, kjer so v istem razredu vse vzporedne povezave. Naj bodo $G_i = G - E_i$, $1 \le i \le 3$. Sedaj definirajmo grafe T_i, $1 \le i \le 3$, takole:

$V(T_i)$ = povezane komponente grafa $G - E_i$

$E(T_i)$ = komponenti sta sosedni, če obstaja taka povezava iz E_i, da je eno krajišče v eni in drugo v drugi povezani komponenti.

T_1: 

T_2: 

T_3: 

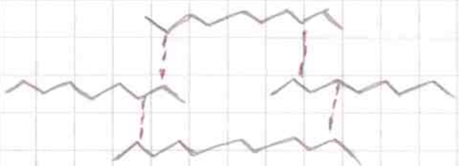
Def. $\gamma : G \to T_1 \,\square\, T_2 \,\square\, T_3$

$\gamma(u) = (u_1, u_2, u_3)$, kjer je u_i komponenta grafa $G - E_i$, v kateri leži u.

Izrek Naj bo G heksagonalni graf in T_1, T_2, T_3 kvocientni grafi, kot so def. zgoraj. Tedaj so T_1, T_2, T_3 drevesa in preslikava γ je izometrija.

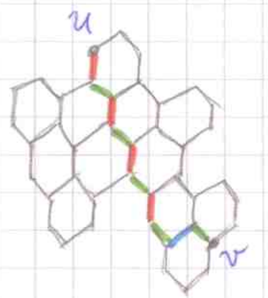
$$\gamma(G) \ldots \text{ izometrični podgraf v } T_1 \square T_2 \square T_3$$

Dokaz. T_i je povezan graf. Če bi T_i imel cikel:

bi to pomenilo, da ima G notranje lice dolžine >6.

Naj bosta $u, v \in V(G)$. Naj bo P najkrajša u,v-pot.



$P \cap E_i \qquad 1 \le i \le 3$

$|P| = |P \cap E_1| + |P \cap E_2| + |P \cap E_3|$

$\gamma(P)$: na P ni dveh povezav iz istega prereza, torej γ preslika pot P v vsaki komponenti v pot med u_i in v_i.
$\gamma(u) = (u_1, u_2, u_3)$, $\gamma(v) = (v_1, v_2, v_3)$. Torej je $\gamma(P)$ pot dolžine $|P|$. ■

(G, w) uteženi graf: graf skupaj s preslikavo $w: V(G) \to \mathbb{R}_0^+$.
(uteži so na vozliščih)

Wienerjev indeks od (G, w):

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

(T_i, w_i) ... utežena drevesa T_i, kjer je $w_i(u)$ število vozlišč v povezani komponenti, ki jo predstavlja u.

Izrek. Naj bo G heksagonalni graf in T_1, T_2, T_3 kvocientna drevesa. Tedaj velja:

$$W(G) = W(T_1, w_1) + W(T_2, w_2) + W(T_3, w_3).$$

Dokaz.

$$\begin{aligned} W(G) &= \frac{1}{2}\sum_u \sum_v d_G(u,v) \\ &= \frac{1}{2}\sum_u \sum_v d_H(\gamma(u), \gamma(v)) \\ &= \frac{1}{2}\sum_u \sum_v \sum_{i=1}^{3} d_{T_i}(u_i, v_i) \\ &= \sum_{i=1}^{3} \left[\frac{1}{2}\sum_u \sum_v d_{T_i}(u_i, v_i) \right] \\ &= \sum_{i=1}^{3} \left[\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{u_i} \sum_{v_i} w(u_i) w(v_i) d_{T_i}(u_i, v_i)}_{W(T_i, w_i)} \right] \end{aligned}$$

$H := T_1 \square T_2 \square T_3$

$\gamma(u) = (u_1, u_2, u_3)$

$\gamma(v) = (v_1, v_2, v_3)$

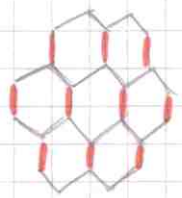
■

Posledica. Wienerjev indeks heksagonalnega grafa lahko izračunamo v linearnem času.

Dokaz. Uporabimo zadnji izrek. Vse kar potrebujemo, lahko naredimo v lin. času. ■

Zgled.

G:



T_1:

$$W(T_1, w_1) = W(T_2, w_2) = W(T_3, w_3)$$

$$\begin{aligned} W(G) &= 3 \cdot W(T_1, w_1) \\ &= 3 \cdot (5 \cdot 7 \cdot 1 + 5 \cdot 7 \cdot 2 + 5 \cdot 5 \cdot 3 + \\ &\quad + 7 \cdot 7 \cdot 1 + 7 \cdot 5 \cdot 2 + 7 \cdot 5 \cdot 1) \\ &= 1002 \end{aligned}$$

Zanimivost. M. Aigner, G. M. Ziegler: Proofs from THE BOOK

Paul Erdős je verjel v knjigo, ki jo imenuje The Book, v katero naj bi Bog zapisal najbolj eleganten dokaz vsakega izreka.