Orijentacije grafova s najvećim Wienerovim indeksom

Martić, Ružica

Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku
Fakultet primijenjene matematike i informatike

Sveučilišni prijediplomski studij Matematika

Orijentacije grafova s najvećim Wienerovim indeksom

Završni rad

Mentor:
izv. prof. dr. sc. Snježana Majstorović Ergotić

Komentor:
naslovni doc. dr. sc. Una Radojičić

Student:
Ružica Martić

Osijek, 2024

Sadržaj

1 | Uvod

Wienerov indeks važan je pojam iz teorije grafova, grane diskretne matematike koja se bavi vrstom matematičkih objekata koje zovemo grafovi. Prvi rad iz teorije grafova napisao je švicarski matematičar, fizičar i astronom Leonhard Euler 1736. godine kada je riješio takozvani problem Königsberških mostova. Temelji teorije grafova sežu iz tog doba, a danas je nezamislivo riješiti neke složene probleme ne poznavajući osnovne alate iz teorije grafova. Jedan takav važan alat je upravo Wienerov indeks grafa G, u oznaci $W(G)$, koji je definiran kao zbroj udaljenosti među svim vrhovima u G. Taj pojam je prvi definirao američki kemičar, fizičar i psiholog Harold Wiener 1947. godine [11]. Wienerov indeks, poznat po svojoj širokoj primjeni u kemiji, kriptografiji, arhitekturi i brojnim drugim disciplinama, značajan je koncept u analizi grafova. U ovom radu, fokusirat ćemo se na istraživanje Wienerovog indeksa specifičnih digrafova. U uvodnom dijelu, osvrnut ćemo se na osnovne pojmove i definicije vezane za usmjerene grafove, odnosno digrafove.

Usmjeren graf D zadan je skupom vrhova $V(D)$ i skupom uređenih parova vrhova $A(D)$ nazvanih usmjerenim bridovima ili lukovima. Svakom vrhu u digrafa D pridružen je izlazni i ulazni stupanj. Izlazni stupanj $d^+(u)$ je broj lukova kojima je početak u vrhu u, dok je ulazni stupanj $d^-(u)$ vrha u broj lukova kojima je kraj u vrhu u. Usmjereni put ili diput u D je niz međusobno različitih vrhova $v_0, v_1, \ldots, v_k$ tako da je (v_{i-1}, v_i) luk u D, pri čemu $i = 1, \ldots k$. Analogno je definiran i usmjereni ciklus ili diciklus, pri čemu dodatno vrijedi $v_0 = v_k$. Ukoliko digraf ne sadrži usmjerene cikluse kao podgrafove, onda za njega kažemo da je acikličan. Udaljenost $d_D(u, v)$ između vrhova $u, v \in V(D)$ je ukupan broj lukova na najkraćem putu od u do v, odnosno duljina najkraćeg puta od u do v. Općenito, u usmjerenom grafu D vrijedi $d_D(u, v) \neq d_D(v, u)$. Dijametar $diam(D)$ digrafa D definiran je kao duljina najkraćeg puta između najudaljenijih vrhova u D, odnosno $diam(D) = \max_{(u,v) \in V(D) \times V(D)} d_D(u, v)$.

Svakom neusmjerenom grafu G možemo pridružiti digraf D tako da mu orijentiramo bridove, odnosno svakom bridu $e = \{u, v\}$ iz G pridružimo ili luk (u, v) ili luk (v, u). U tom slučaju govorimo o orijentaciji na G, a dobiven usmjereni graf D se prigodno naziva pridruženim digrafom grafa G. Obratno, svakom digrafu D možemo pridružiti neusmjereni graf G s istim skupom vrhova tako da svakom luku u D pridružimo neusmjereni brid u G, odnosno brišemo strelice svim lukovima u D. Graf G zovemo pripadnim grafom digrafa D.

Prve rezultate o Wienerovom indeksu digrafova predstavio je američki matematičar Frank Harary [5], čija su istraživanja bila potaknuta određenim sociometrijskim problemima. Rana faza istraživanja Wienerovog indeksa usmjerenih grafova bila je ograničena na jako povezane usmjerene grafove, tj. usmjerene grafove u kojima postoji usmjereni put između svaka dva vrha. Međutim, u realnim usmjerenim grafovima (usmjerenim mrežama) moguće je da postoje neka dva vrha u i v za koje ne postoji usmjereni put od u do v. U tom slučaju dogovorno uzimamo da je $d_D(u,v) = 0$ [1]. Pod tom pretpostavkom, analogno kao kod neusmjerenih grafova, Wienerov indeks $W(D)$ digrafa D definiran je kao zbroj udaljenosti među svim vrhovima u D, pri čemu je svaki uređeni par vrhova uzet u obzir. Preciznije,

$$W(D) = \sum_{(u,v)\in V(D)\times V(D)} d_D(u,v) = \sum_{u\in V(D)} w_D(u), \tag{1.1}$$

gdje je $w_D(u) := \sum_{v\in V(D)} d_D(u,v)$, odnosno $w(u)$ je suma udaljenosti od vrha u do svih ostalih vrhova u D. Indeks D ćemo izostavljati kada zabuna nije vjerojatna.

Pri istraživanju svake grafovske ili digrafovske invarijante, uobičajeno je odrediti njene donje ili gornje granice u ovisnosti o raznim (di)grafovskim parametrima kao što su broj vrhova, broj bridova (lukova), dijametar, struk itd. te karakterizirati ekstremalne (di)grafove, odnosno (di)grafove u kojima se postižu te granice [7]. Dok su ovakve vrste problema temeljito istražene, a mnoge i u potpunosti riješene za slučaj Wienerovog indeksa neusmjerenog grafa, u slučaju digrafova takvi problemi su puno složeniji. Primjerice, Plesník je pokazao [10] da je problem pronalaska jako povezane orijentacije grafa koja ima najmanji Wienerov indeks NP-težak problem, dok je Dankelmann pokazao [2] da je problem pronalaska orijentacije grafa koja ima najveći Wienerov indeks NP-potpun problem.

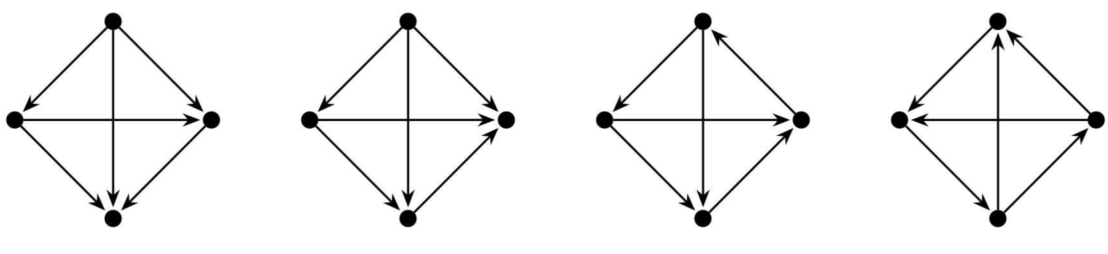
Ovaj rad se bazira na pronalaženju orijentacija nekih klasa grafova koje imaju najveći Wienerov indeks. U drugom poglavlju su predstavljene gornje granice Wienerovog indeksa turnira u ovisnosti o broju njegovih vrhova. Treće poglavlje je posvećeno parcijalnim rezultatima vezanim za određivanje orijentacije stabla koja ima najveći Wienerov indeks, dok su u četvrtom poglavlju pronađene orijentacije nekih tipova theta grafova koje imaju najveći Wienerov indeks.

2 | Turniri

Turnir je pojam kojeg svi vrlo dobro poznajemo iz sporta, gdje svaki igrač igra protiv svakog drugog igrača točno jednom i uvijek je netko pobjednik. Primjerice, na nekom turniru postoji n timova te će svaki od tih timova igrati protiv svakog od preostalih $n-1$ timova. U svakoj utakmici postojat će pobjednički tim jer nema neriješenih rezultata. Takvo natjecanje možemo prikazati digrafom s n vrhova i s lukovima (u, v) koji predstavljaju pobjedu tima u nad timom v. Slijedi definicija turnira jezikom teorije grafova.

Definicija 1. ***Turnir*** *T_n je digraf s n vrhova čiji je pripadni graf potpun.*

Slika 2.1: Dva primjera turnira T_3. Na slici lijevo prikazan je acikličan turnir, dok je na slici desno dan primjer turnira kao usmjerenog ciklusa s tri vrha.



Slika 2.2: Primjeri turnira T_4. Gledajući slijeva na desno, prva dva turnira su aciklička.

Još 1984. godine Plesník [10] je pronašao gornju granicu Wienerovog indeksa u jako povezanom turniru.

Teorem 1. *Neka je T_n jako povezan turnir s $n \geq 3$ vrhova. Tada je*

$$W(T_n) \leq \binom{n+2}{3} - 1. \tag{2.1}$$

Jednakost vrijedi ako i samo ako je T_n turnir dijametra $n-1$.

Dokaz. Koristimo indukciju po broju vrhova n. Slučaj $n = 3$ je očit pa pretpostavljamo da je $n \geq 4$. Prema [4], zbog jake povezanosti, T_n sadrži ciklus Z' duljine $n-1$. Neka je v_0 vrh u T_n koji ne pripada Z'. Tada je $T' := T_n - v_0$ jako povezan pa prema pretpostavci indukcije vrijedi

$$W(T') \leq \binom{n+1}{3} - 1. \tag{2.2}$$

Nadalje, jaka povezanost digrafa T_n implicira i egzistenciju razapinjujućeg diciklusa $Z = v_0 v_1 \ldots v_{n-1} v_0$, odnosno diciklusa u T_n koji sadrži sve vrhove od T_n. Za proizvoljna dva prirodna broja p i q tako da $1 \leq p < q \leq n-1$ i postoje lukovi (v_0, v_p) i (v_q, v_0) u T_n, definiramo

$$\sigma_0(p,q) = \sum_{i=p}^{q} \left[d(v_0, v_i) + d(v_i, v_0) \right].$$

Sada je jasno da vrijedi

$$W(T_n) \leq W(T') + \sigma_0(1, n-1) \tag{2.3}$$

pa ako

$$\sigma_0(1, n-1) \leq \frac{1}{2} n(n+1), \tag{2.4}$$

onda nejednakost (2.1) proizlazi uvrštavanjem (2.2) i (2.4) u (2.3). Da bismo dokazali (2.4), koristit ćemo princip matematičke indukcije po $q - p$ za dokaz nejednakosti

$$\sigma_0(p,q) \leq \frac{1}{2}(q-p+2)(q-p+3). \tag{2.5}$$

Njena istinitost za $q - p = 1$ je očigledna. Neka je $q - p \geq 2$. Razlikujemo tri slučaja.

Slučaj 1. $(v_0, v_{p+1}) \in A(T_n)$. Tada možemo pisati

$$\begin{aligned} \sigma_0(p,q) &= \sigma_0(p+1,q) + d(v_0,v_p) + d(v_p,v_0) \\ &\leq \frac{1}{2}(q-p+1)(q-p+2) + q - p + 2 \\ &= \frac{1}{2}(q-p+2)(q-p+3), \end{aligned}$$

što je i trebalo dokazati.

Slučaj 2. $(v_{q-1}, v_0) \in A(T_n)$. Tada, kao i u Slučaju 1 imamo

$$\begin{aligned} \sigma_0(p,q) &= \sigma_0(p,q-1) + d(v_0,v_q) + d(v_q,v_0) \\ &\leq \frac{1}{2}(q-p+1)(q-p+2) + q - p + 2 \\ &= \frac{1}{2}(q-p+2)(q-p+3). \end{aligned}$$

Slučaj 3. $(v_{p+1}, v_0), (v_0, v_{q-1}) \in A(T_n)$. Neka je k najveći broj za koji $(v_{p+1}, v_0), \ldots, (v_k, v_0) \in A(T_n)$. Tada $(v_0, v_{k+1}) \in A(T_n)$ i imamo

$$\begin{aligned}
\sigma_0(p,q) &= \sigma_0(p,k) + \sigma_0(k+1,q) \\
&\leq \frac{1}{2}(k-p+2)(k-p+3) + \frac{1}{2}(q-k+1)(q-k+2) \\
&< \frac{1}{2}[(q-k)+(k-p)+2][(q-k)+(k-p)+3] \\
&= \frac{1}{2}(q-p+2)(q-p+3),
\end{aligned}$$

jer $k-p \geq 1$ i $q-k \geq 2$. Stoga vrijedi nejednakost (2.5) pa specijalno i (2.4). Time je nejednakost (2.1) dokazana.

Lako je provjeriti da se gornja granica u (2.1) postiže za turnir T_n dijametra $n-1$. Ostaje pokazati da ju niti jedan drugi turnir ne može postići. Analizirajući dokaz nejednakosti (2.1), primjećujemo da ako se gornja granica postiže, tada nejednakosti (2.2), (2.3) i (2.4) postaju jednakosti. Stoga u svakom koraku matematičke indukcije za dokazivanje (2.1) treba se pojaviti jednakost u (2.1) pa su mogući jedino slučajevi 1 i 2. U slučaju 1 imamo $d(v_0, v_p) + d(v_p, v_0) = q-p+2$ pa vrijedi $d(v_p, v_0) = q-p+1$. Slučaj 2 daje $d(v_0, v_q) = q-p+1$. Ako stavimo $p=1$ i $q=n-1$, dobivamo ili $d(v_1, v_0) = n-1$ ili $d(v_0, v_{n-1}) = n-1$. Posljedično, T_n je dijametra $n-1$. □

Uočimo da za svaki $n \geq 3$ postoji do na izomorfizam točno jedan turnir promjera $n-1$. Takav turnir nazivamo *turnirom Hamiltonova puta* i označavamo ga s H_n. Možemo ga opisati kao digraf s vrhovima $v_1, v_2, \ldots, v_n$ u kojem je (v_j, v_i) luk za svaki $i < j$ osim ako je $j = i+1$, u čijem slučaju H_n sadrži luk (v_i, v_j).

Dvanaest godina nakon Plesnikovih rezultata, Moon [9] je poboljšao granicu u (2.1) uključivanjem dodatnog parametra, što mu je omogućilo karakterizaciju turnira s najmanje 5 vrhova koji imaju drugi najveći Wienerov indeks. Radi se o dva tipa turnira koji se mogu dobiti iz H_n, $n \geq 5$, na sljedeći način: da bismo dobili H_n^1, u H_n obrnemo smjer luka (v_{n-2}, v_n), a da bismo dobili H_n^2, obrnemo smjer lukova $(v_3, v_n), \ldots, (v_{n-2}, v_n)$ (valja primijetiti da su turniri H_5^1 i H_5^2 izomorfni). Slijedi Moonov rezultat.

Teorem 2. [9] *Ako je T_n jak turnir s $n \geq 5$ vrhova i T_n nije izomorfan H_n, onda je $W(T_n) \leq \binom{n+2}{3} - n + 3$, pri čemu se jednakost postiže u turnirima H_n^1 ili H_n^2.*

Sljedeća tvrdnja pokazuje da rezultati koji su analogni onima od Plesníka i Moona vrijede čak i ako se ne ograničimo na klasu jako povezanih turnira. Pritom za računanje Wienerovog indeksa koristimo formulu (1.1).

Teorem 3. [6] *Ako je T_n turnir s najmanje 3 vrha, tada je $W(T_n) \leq \binom{n+2}{3} - 1$, pri čemu jednakost vrijedi ako i samo ako je T_n turnir Hamiltonova puta. Štoviše, ako T_n sadrži najmanje 5 vrhova i nije izomorfan turniru Hamiltonova puta, tada je $W(T_n) \leq \binom{n+2}{3} - n + 3$, pri čemu se jednakost postiže samo ako je T_n izomorfan H_n^1 ili H_n^2.*

Dokaz. Ako je T_n jako povezan, onda obje tvrdnje vrijede prema gore navedenim rezultatima Plesníka i Moona. Stoga, pretpostavimo da T_n nije jako povezan. Tada postoji usmjereni rezni brid, što znači da se vrhovi od T_n mogu particonirati u podskupove A i B tako da je svaki luk između vrha x iz A i vrha y iz B usmjeren od x prema y. Neka su T_a i T_b turniri inducirani redom skupovima A i B. Uočimo da je $W(T_n) = W(T_a) + W(T_b) + ab$, gdje su $a = |A|$ i $b = |B|$ pozitivni cijeli brojevi.
Kako bismo dokazali prvu tvrdnju, koristimo matematičku indukciju. Lako se provjeri da je za $n = 3$ tvrdnja istinita. Prema pretpostavci indukcije dobivamo

$$W(T_n) = W(T_a) + W(T_b) + ab \leq \binom{a+2}{3} - 1 + \binom{b+2}{3} - 1 + ab,$$

a jednostavnim izračunom može se pokazati da je izraz s desne strane nejednakosti strogo manji od $\binom{a+b+2}{3} - 1$. Iz ovoga slijedi da $W(T_n)$ postiže maksimalnu vrijednost za jako povezanu orijentaciju od T_n. Dakle, prema rezultatu Plesníka, T_n je turnir Hamiltonova puta.
Ako je T_n turnir s najmanje 5 vrhova, koji nije izomorfan turniru Hamiltonova puta, primjećujemo da pretpostavka $W(T_n) \geq \binom{n+2}{3} - n + 3$ vodi do kontradikcije. Budući da je $n = a + b$, dobivamo

$$\begin{aligned}\binom{a+b+2}{3} - (a+b) + 3 \leq W(T_n) &= W(T_a) + W(T_b) + ab \\ &\leq \binom{a+2}{3} - 1 + \binom{b+2}{3} - 1 + ab.\end{aligned}$$

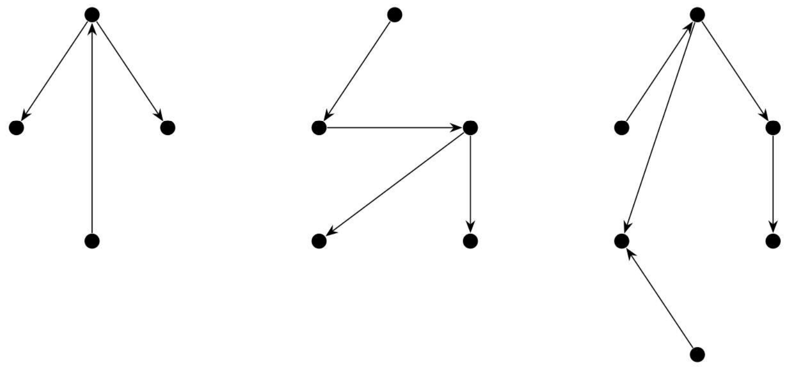
Ovo dovodi do nejednakosti $(a+b)(ab-2) \leq -10$, što je kontradikcija jer su oba faktora s lijeve strane nejednakosti pozitivna s obzirom da vrijedi $a + b \geq 5$. Dakle, $W(T_n) < \binom{n+2}{3} - n + 3$. Ovo implicira da se najveća vrijednost Wienerovog indeksa turnira s najmanje 5 vrhova, koji nije izomorfan turniru Hamiltonova puta, postiže za jako povezanu orijentaciju od T_n. Karakterizacija Moona tako zaključuje dokaz. □

3 | Usmjerena stabla

U ovom poglavlju ćemo iskazati Wienerov teorem usmjerenih stabala, a zatim predstaviti rezultate o orijentacijama nekih klasa stabala koje imaju najveći Wienerov indeks. Prisjetimo se najprije definicije stabla.

Definicija 2. ***Stablo*** *je povezan graf koji ne sadrži cikluse.*

Drugim riječima, stablo je povezan acikličan graf. Usmjereno stablo nastaje orijentacijom bridova neusmjerenog stabla.



Slika 3.1: Primjeri usmjerenih stabala redom s 4, 5 i 6 vrhova.

Harold Wiener je davne 1947. godine u svome radu [11] pokazao da za proizvoljno stablo T vrijedi

$$W(T) = \sum_{e=\{ab\}\in E(T)} n_e(a)n_e(b), \tag{3.1}$$

gdje je $n_e(a)$ broj vrhova u T koji su bliži vrhu a nego vrhu b, a $n_e(b)$ je broj vrhova u T koji su bliži vrhu b nego vrhu a. Ovaj rezultat danas je poznat pod nazivom Wienerov teorem. U nastavku ćemo pokazati da se Wienerov indeks usmjerenog stabla računa formulom koja je slična (3.1).

Označimo s $T(a)$ skup vrhova x sa svojstvom da postoji usmjereni put od x do a te sa $S(a)$ skup vrhova x sa svojstvom da postoji usmjereni put od a do x. Uočimo $a \in S(a)$ i $a \in T(a)$. Neka $t(a) = |T(a)|$ i $s(a) = |S(a)|$. Martin Knor i ostali [8] su 2016. godine predstavili sljedeći rezultat.

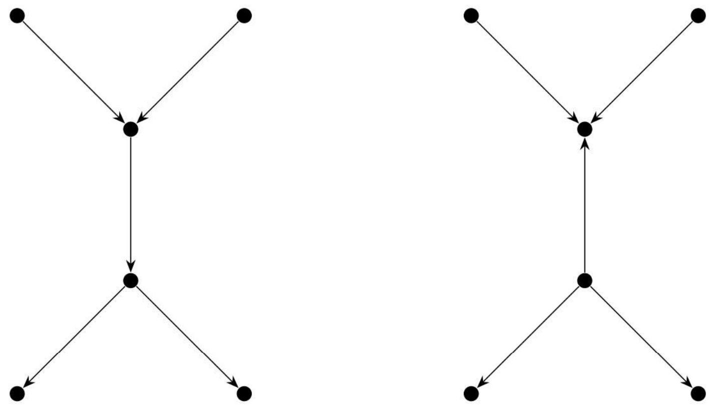
Teorem 4. *Neka je T usmjereno stablo. Tada vrijedi*

$$W(T) = \sum_{ab\in A(T)} t(a)s(b).$$

Dokaz. Ako postoji usmjereni put između dva vrha u T, onda je on jedinstven jer bi u suprotnom pripadno stablo od T sadržavalo cikluse, što ne može biti. Stoga luk (a, b) doprinosi 1 u $W(T)$ za svaki par vrhova za koji usmjereni put između njih sadrži (a, b). Budući da postoji $t(a)s(b)$ takvih puteva, tvrdnja je dokazana. $\square$

U nastavku ćemo se baviti problemom određivanja orijentacije zadanog stabla koja rezultira usmjerenim stablom s najvećim Wienerovim indeksom.

Vrh v u usmjerenom stablu T je *jezgreni vrh* ako za svaki vrh w u T postoji usmjereni put od w do v ili od v do w. Na Slici 3.2 prikazan je primjer usmjerenog stabla koji sadrži jezgrene vrhove i primjer usmjerenog stabla koji ih ne sadrži.



Slika 3.2: Lijevo usmjereno sablo sadrži dva jezgrena vrha, dok desno usmjereno stablo ne sadrži jezgrene vrhove.

Pojam jezgrenog vrha se može definirati koristeći ne-cik-cak orijentacije bridova. Orijentaciju stabla zovemo ne-cik-cak ako ne postoji usmjereni put u stablu u kojemu bridovi mijenjaju orijentaciju dva puta. Prema tome, usmjereno stablo ima jezgru ako i sako ako mu je orijentacija ne-cik-cak. Martin Knor i ostali [8] su postavili hipotezu prema kojoj je orijentacija proizvoljnog stabla T koja ima najveći Wienerov indeks ne-cik-cak te su pokazali da ona vrijedi za neke specijalne klase stabala. Ostatak poglavlja posvećen je njihovim rezultatima. Premda je hipoteza istinita za sva stabla s najviše 10 vrhova [3] te za neka specijalna stabla, Peter Dankelmann je pokazao da ona općenito ne vrijedi [2]. Štoviše, pokazao je da je problem pronalaska orijentacije grafa koja ima najveći Wienerov indeks NP-potpun problem.

Lema 1. *Ako je D orijentacija stabla T s najvećim Wienerovim indeksom, onda su svi putovi u T, kojima su unutarnji vrhovi stupnja dva, usmjereni putovi u D.*

Dokaz. Neka je v vrh stupnja dva u T te neka su u_1 i u_2 dva susjedna vrha od v u T. Neka je D orijentacija od T s majvećim Wienerovim indeksom. Razdvojimo D u vrhu v, tj. zamijenimo v s v_1 i v_2 tako da luk koji je bio incidentan s vrhovima u_1 i v sada postaje incidentan s u_1 i v_1, dok luk koji je bio incidentan s vrhovima u_2 i v sada postaje incidentan s u_2 i v_2. Označimo dobivene digrafove s D_1 i D_2. Tada se D dobiva iz $D_1 \cup D_2$ identifikacijom vrhova v_1 s v_2. Pretpostavimo da su oba luka koja su incidentna s v usmjerena prema ili od vrha v u D. Tada je $W(D) =$

$W(D_1) + W(D_2)$. Sada u D obrnemo orijentaciju svih lukova u D_1 te označimo dobiveni digraf s D'. Budući da je $d_D(u_1, u_2) = d_D(u_2, u_1) = 0$, dok je $d_{D'}(u_1, u_2) = 2$ ili $d_{D'}(u_2, u_1) = 2$, imamo $W(D') \geq W(D_1) + W(D_2) + 2 = W(D) + 2$, što je u kontradikciji s pretpostavkom da D ima najveći Wienerov indeks. □

Prije navođenja sljedeće lema, sjetimo se da je rezni vrh v grafa G onaj vrh čijim uklanjanjem G prestaje biti povezan, tj. postoje vrhovi u $G - v$ između kojih ne postoji niti jedan put.

Napomena 1. *Lema 1 vrijedi za sve grafove u kojima su unutarnji vrhovi putova stupnja dva istovremeno i rezni vrhovi.*

Kako bismo razumjeli sljedeći teorem, sjetimo se pojma subdivizije. Subdivizija proizvoljnog grafa je graf dobiven umetanjem vrhova stupnja dva na neke ili sve bridove tog grafa. Subdivizija zvijezde je proizvoljno stablo u kojemu postoji najviše jedan vrh stupnja većeg od 2.

Propozicija 1. *Neka je T subdivizija zvijezde. Tada je svaka orijentacija od T koja ima najveći Wienerov indeks ne-cik-cak.*

Dokaz. Prema Lemi 1, ako je D orijentacija od G s najvećim Wienerovim indeksom, tada su svi putovi u G, čiji su unutarnji vrhovi stupnja dva, usmjereni putovi u D. To znači da je u subdiviziji zvijezde središnji vrh ujedno i jezgreni vrh. □

Teorem 5. *Neka je $T_{a,b,c}$ stablo dobiveno od dvije zvijezde $K_{1,a}$ i $K_{1,b}$, čiji su središnji vrhovi povezani putom duljine c, gdje je $c \geq 1$. Tada je svaka orijentacija od $T_{a,b,c}$ koja ima najveći Wienerov indeks, ne-cik-cak.*

Dokaz. Neka su u_1 i u_2 redom središnji vrhovi od $K_{1,a}$ i $K_{1,b}$. S P označimo $(u_1, u_2)-$put duljine c u $T_{a,b,c}$. Neka je D orijentacija od $T_{a,b,c}$ s najvećim Wienerovim indeksom. Prema Lemi 1, P je usmjereni put u D. S obzirom da se Wienerov indeks ne mijenja promjenom orijentacije svih lukova u D [6], možemo pretpostaviti da je P usmjeren od u_1 prema u_2. Neka je x broj lukova usmjerenih prema u_1 u D. Tada je broj lukova usmjerenih od u_1 jednak $a - x + 1$ jer je jedan takav luk u P. Analogno, neka je y broj lukova usmjerenih od u_2 u D. Tada je broj lukova usmjerenih prema u_2 jednak $b - y + 1$. Uočimo da je u_2 jezgreni vrh ako je $x = a$. Analogno, u_1 je jezgreni vrh ako je $y = b$. Stoga, pretpostavimo da je $x < a$ i $y < b$. Pokazat ćemo da u takvom slučaju postoji orijentacija D' od $T_{a,b,c}$ tako da $W(D') > W(D)$.

Najprije pretpostavimo da je $x < a - x$. Neka je z vrh od $K_{1,a}$ u $T_{a,b,c}$, takav da je (z, u_1) luk u D. Stavimo $\overline{w}(z) = \sum d_D(z, v)$, pri čemu sumiramo po svim vrhovima v od $T_{a,b,c}$ koji nisu u $K_{1,a}$. Promijenimo orijentaciju svih lukova od $K_{1,a}$ u D i označimo dobiveni digraf s D'. S obzirom da je $d_D(v_1, v_2) = d'_D(v_1, v_2)$ ako v_1 i v_2 nisu listovi u $K_{1,a}$ te $d_D(v_1, v_2) = d'_D(v_2, v_1)$ ako su v_1 i v_2 vrhovi u $K_{1,a}$, da bismo izračunali razliku $W(D') - W(D)$, trebamo razmotriti parove vrhova u kojima je jedan vrh list u $K_{1,a}$, a drugi vrh ne pripada $K_{1,a}$. U tom slučaju je $W(D') - W(D) = [(a - x) - x] \cdot \overline{w}(z)$ pa je $W(D') > W(D)$.

Neka je $y < b - y$. Ovaj se slučaj može dokazati na sličan način kao i slučaj $x < a - x$, uzimajući z kao vrh od $K_{1,b}$ takav da je (u_2, z) luk u D i definirajući

$\overline{w}(z) = \sum d_D(v,z)$, pri čemu sumiramo po svim vrhovima v od $T_{a,b,c}$ koji nisu u $K_{1,b}$. Ako se D' dobije iz D promjenom orijentacije svih lukova u $K_{1,b}$, tada je $W(D') - W(D) = [(b-y) - y] \cdot \overline{w}(z) > 0$. Zato u nastavku pretpostavljamo $x \geq a - x$ i $y \geq b - y$.

Pretpostavimo da je $y \geq x$. Promijenimo orijentaciju svih lukova (u_1, z) u $K_{1,a}$ i označimo dobiveni digraf s D'. Tada je $d_D(v_1, v_2) = d'_D(v_1, v_2)$ ako v_1 i v_2 nisu krajevi lukova s početkom u_1 u $K_{1,a}$. Neka je z kraj luka (u_1, z) u $K_{1,a}$ u digrafu D. Tada je $\sum_{v \in V(T_{a,b,c})} d_D(v,z) = 2x + 1$, dok je $\sum_{v \in V(T_{a,b,c})} d'_D(v,z) \geq 3y + 2 + 1$. Slijedi $W(D') - W(D) > (a-x)(3y-2x) > 0$ jer je $x < a$ i $y > 0$ zbog $y \geq b - y$.

Konačno, pretpostavimo da je $x \geq y$. Promijenimo orijentacije svih lukova (z, u_2) od $K_{1,b}$ i označimo dobiveni digraf s D'. Analogno prethodnom slučaju, dobivamo $W(D') - W(D) > (b-y)(3x-2y) > 0$. Zaključujemo da je ili u_1 ili u_2 jezgreni vrh u D. $\square$

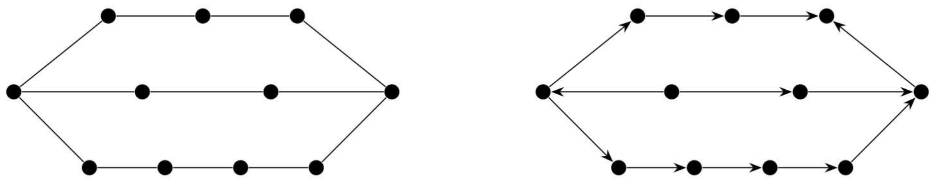
4 | Theta digrafovi

Motivacija za proučavanje Wienerovog indeksa theta digrafova proizlazi iz problema pronalaženja orijentacije grafova bez reznih vrhova koja ima najveći Wienerov indeks. Bilo bi prirodno očekivati da se na grafovima koji ne sadrže rezne vrhove najveći Wienerov indeks postiže jako povezanom orijentacijom. Takva tvrdnja je istinita za najjednostavnije grafove tog tipa kao što su ciklusi, no, theta grafovi ju osporavaju.

Neka je C_n ciklus s n vrhova. Usmjereni ciklus $\vec{C}_n$ nastaje orijentacijom svih bridova u C_n u (ili obrnutom) smjeru kazaljke na satu. Među svim orijentacijama od C_n, digraf $\vec{C}_n$ ima najveći Wienerov indeks jer za svaki vrh u tog grafa vrijedi $w(u) = \binom{n}{2}$, odnosno w postiže najveću vrijednost za svaki $u \in \vec{C}_n$. Vrijedi $W(\vec{C}_n) = n\binom{n}{2}$.

Sljedeća klasa jednostavnih grafova bez reznih vrhova su theta grafovi. Theta graf $\theta_{a,b,c}$ sastoji se od dva različita vrha u_1 i u_2 koji su spojeni s tri unutarnje disjunktna puta (putovi nemaju zajedničke vrhove stupnja dva) $P_a : u_1, x_1, x_2, \ldots, x_a, u_2$, $P_b : u_1, y_1, y_2, \ldots, y_b, u_2$ i $P_c : u_1, z_1, z_2, \ldots, z_c, u_2$. Ovako definiran theta graf ima $a + b + c + 2$ vrhova. Nadalje, pretpostavljamo $a \geq b \geq c$ i $b \geq 1$.

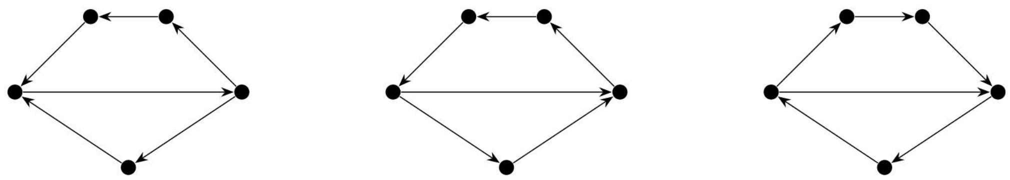
U nastavku ćemo pokazati da $W(\vec{\theta}_{a,b,0})$ postiže najveću vrijednost ako je $\vec{\theta}_{a,b,0}$ jako povezan. No, uz neke posebne uvjete na a i b, najveći Wienerov indeks od $\vec{\theta}_{a,b,1}$ postiže se kada $\vec{\theta}_{a,b,1}$ nije jako povezan. Slično vrijedi i u slučaju $c \geq 2$. Ove rezultate predstavili su M. Knor i ostali u radu [6].



Slika 4.1: Theta graf $\theta_{3,2,4}$ i pridruženi digraf $\vec{\theta}_{3,2,4}$.

4.1 Jako povezane orijentacije theta grafova

Primijetimo da u jako povezanoj orijentaciji theta grafa $\theta_{a,b,c}$, putovi P_a, P_b i P_c trebaju biti diputovi. Primjerice, možemo fiksirati orijentaciju od P_c od u_1 do u_2. Ako su P_a (P_b) usmjereni na isti način kao i P_c (od u_1 do u_2), tada stavljamo znak + kod a (b) u oznaci theta digrafa. Zaključujemo da postoje samo tri jako povezane orijentacije od $\theta_{a,b,c}$: $\vec{\theta}_{a^-,b^-,c}$, $\vec{\theta}_{a^-,b^+,c}$ i $\vec{\theta}_{a^+,b^-,c}$. Primjeri takvih orijentacija prikazani su na slici 4.2. Uočimo da ako je $a = b$, onda su $\vec{\theta}_{a^-,b^+,0}$ i $\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}$ izomorfni grafovi.



Slika 4.2: Jako povezane orijentacije grafa $\theta_{2,1,0}$, redom $\vec{\theta}_{2^-,1^-,0}$, $\vec{\theta}_{2^-,1^+,0}$ i $\vec{\theta}_{2^+,1^-,0}$.

Slijedi rezultat o Wienerovom indeksu svih jako povezanih orijentacija od $\theta_{a,b,c}$ koji uključuje i izračun Wienerovog indeksa digrafa $\vec{\theta}_{a^+,b^+,c}$.

Lema 2. *Za theta graf $\theta_{a,b,c}$ vrijedi sljedeće:*

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,c}) &= \binom{a}{2}(a+b+2) + ac(a+2b+c+4) + a(b+2)(a+b+2) \\ &+ \binom{b+c+2}{2}(b+c+2); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,c}) &= \binom{b}{2}(a+b+2) + bc(2a+b+c+4) + b(a+2)(a+b+2) \\ &+ \binom{a+c+2}{2}(a+c+2); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a^-,b^-,c}) &= \binom{a}{2}(a+c+2) + ab(a+b+2c+4) + a(c+2)(a+c+2) \\ &+ \binom{b+c+2}{2}(b+c+2); \end{aligned}$$

$$W(\vec{\theta}_{a^+,b^+,c}) = \binom{a+2}{3} + \binom{b+2}{3} + \binom{c+2}{3} + \binom{a+1}{2} + \binom{b+1}{2} + \binom{c+2}{2}.$$

Dokaz. U dokazu ćemo koristiti oznaku $D(x,y) = d(x,y) + d(y,x)$, čijom se uporabom Wienerov indeks digrafa D može zapisati kao $W(D) = \sum D(x,y)$, pri čemu sumiramo po svim neuređenim parovima vrhova u D. Neka je $A = \{x_1, x_2, \ldots, x_a\}$, $B = \{y_1, y_2, \ldots, y_b\}$, $C = \{z_1, z_2 \ldots, z_c\}$ i $U = \{u_1, u_2\}$, pri čemu je $a \geq b \geq c$. Prvo ćemo razmotriti orijentaciju $\theta_{a^+,b^-,c}$. Ako $x, y \in A$, onda $D(x,y) = a+b+2$ i postoji $\binom{a}{2}$ takvih parova vrhova u A. Ako $x \in A$ i $y \in C$, onda imamo ac parova vrhova tako da vrijedi $D(x,y) = a+c+2(b+2)$. Na sličan način razmatramo slučajeve $x \in A$, $y \in B \cup U$ i $x, y \in B \cup C \cup U$. Dobivamo:

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,c}) &= \binom{a}{2}(a+b+2) + ac(a+2b+c+4) + a(b+2)(a+b+2) \\ &+ \binom{b+c+2}{2}(b+c+2). \end{aligned}$$

Uočimo da se $W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,c})$ dobiva zamjenom uloga parametara a i b. Stoga vrijedi:

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,c}) = &\binom{b}{2}(a+b+2) + bc(2a+b+c+4) + b(a+2)(a+b+2) \\ &+ \binom{a+c+2}{2}(a+c+2). \end{aligned}$$

Wienerov indeks od $\vec{\theta}_{a^-,b^-,c}$ dobiva se razlikovanjem ovih slučajeva: $x, y \in A$ ili $x \in A, y \in B$ ili $x \in A, y \in C \cup U$ ili $x, y \in B \cup C \cup U$. Slijedi:

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a^-,b^-,c}) = &\binom{a}{2}(a+c+2) + ab(a+b+2c+4) + a(c+2)(a+c+2) \\ &+ \binom{b+c+2}{2}(b+c+2). \end{aligned}$$

Za računanje Wienerovog indeksa od $\vec{\Theta}_{a^+,b^+,c}$ koristimo činjenicu da se Wienerov indeks usmjerenog puta s n vrhova podudara s Wienerovim indeksom pripadnog puta, tj. $W(\vec{P}_n) = W(P_n) = \binom{n+1}{3}$. Koristeći ovu spoznaju. dobivamo:

$$W(\vec{\theta}_{a^+,b^+,c}) = \binom{a+2}{3} + \binom{b+2}{3} + \binom{c+2}{3} + \binom{a+1}{2} + \binom{b+1}{2} + \binom{c+2}{2}.$$

□

Sljedeća lema je direktna posljedica Leme 2.

Lema 3. *Za theta graf $\theta_{a,b,c}$ vrijedi:*

$$W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,c}) - W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,c}) = \frac{1}{2}(a-b)(ab - c(a+b) - c^2 - 2c - 2) \text{ i}$$

$$W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,c}) - W(\vec{\theta}_{a^-,b^-,c}) = \frac{1}{2}a(a-1)(b-c).$$ □

Koristeći Lemu 3, lako možemo odrediti jako povezanu orijentaciju $\vec{\theta}_{a,b,c}$ s najvećim Wienerovim indeksom.

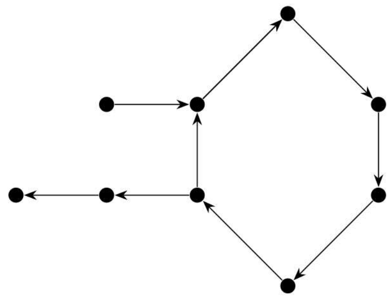
Teorem 6. *Među jako povezanim orijentacijama grafa $\theta_{a,b,c}$, digraf $\vec{\theta}_{a^+,b^-,c}$ ima najveći Wienerov indeks osim u slučaju kada je $a \neq b$ i $ab - c(a+b) - c^2 - 2c - 2 < 0$. Tada najveći Wienerov indeks ima orijentacija $\vec{\theta}_{a^-,b^+,c}$.*

Dokaz. Budući da je $a \geq b \geq c$, dokaz direktno slijedi iz Leme 3. □

4.2 Orijentacije $\theta_{a,b,0}$ grafova

Razumno je zapitati se može li theta digraf koji nije jako povezan imati najveći Wienerov indeks. U nastavku ćemo vidjeti da je to nemoguće za digrafove $\vec{\theta}_{a,b,0}$.

Označimo s $\mathcal{B}_{n,l}$ familiju grafova s n vrhova dobivenu na sljedeći način: uzmemo ciklus duljine l te s u_1 i u_2 označimo njegova dva proizvoljna susjedna vrha.



Slika 4.3: Orijentacija $\vec{B}_{9,6}^{+}$ grafa $B_{9,6}$.

Nadalje, uzmemo dva puta i identificiramo kraj jednog puta s u_1 te kraj drugog puta s u_2. Za $B_{n,l} \in \mathcal{B}_{n,l}$, s $\vec{B}_{n,l}^{+}$ označimo orijentaciju od $B_{n,l}$ u kojoj je ciklus usmjeren tako da sadrži luk (u_2, u_1), put s vrhom u_1 je usmjeren prema u_1, a put s vrhom u_2 je usmjeren od u_2 (vidi Sliku 4.3). Vrijedi sljedeća lema.

Lema 4. *Neka je $B_{n,l} \in \mathcal{B}_{n,l}$. Među svim orijentacijama grafa $B_{n,l}$, digraf $\vec{B}_{n,l}^{+}$ ima najveći Wienerov indeks i vrijedi:*

$$W(\vec{B}_{n,l}^{+}) = \binom{n+1}{3} + \frac{l(l-1)(2l-1)}{6}.$$

Dokaz. Neka je $\vec{B}_{n,l}$ orijentacija grafa $B_{n,l}$. Razmatramo parove vrhova od $\vec{B}_{n,l}$ i raspravljamo pod kojim pretpostavkama su njihove udaljenosti najveće.
Ako su x i y vrhovi ciklusa duljine l, onda $d_{\vec{B}_{n,l}}(x,y) + d_{\vec{B}_{n,l}}(y,x) \leq l$ te se jednakost postiže samo ako je ciklus usmjeren. Ako su x i y vrhovi jednog puta pripojenog ciklusu u $\vec{B}_{n,l}$, onda je suma $d_{\vec{B}_{n,l}}(x,y) + d_{\vec{B}_{n,l}}(y,x)$ najveća ako je put između x i y usmjeren. Ako su x i y vrhovi s različitih putova pripojenih ciklusu, onda je suma $d_{\vec{B}_{n,l}}(x,y) + d_{\vec{B}_{n,l}}(y,x)$ najveća ako postoji usmjeren put između x i y koji ne sadrži luk koji spaja u_1 i u_2 i ne postoji usmjereni put između x i y koji sadrži luk koji spaja u_1 i u_2.

Ako je x vrh puta pripojenog ciklusu te su y_1 i y_2 različiti vrhovi ciklusa takvi da $d_{B_{n,l}}(x,y_1) = d_{B_{n,l}}(x,y_2)$, tada je suma $d_{\vec{B}_{n,l}}(x,y_1) + d_{\vec{B}_{n,l}}(y_1,x) + d_{\vec{B}_{n,l}}(x,y_2) + d_{\vec{B}_{n,l}}(y_2,x)$ najveća ako je ciklus usmjeren i ako je put pripojen njemu usmjeren. (Isti zaključak možemo izvesti kada je ciklus parne duljine, a y leži nasuprot vrhu u kojem je put koji sadrži vrh x pripojen ciklusu.)

Budući da su u gornjim sumama uzeti u obzir svi mogući parovi vrhova u $d_{\vec{B}_{n,l}}$, a $\vec{B}_{n,l}^{+}$ postiže najveću vrijednost u svim slučajevima, slijedi da $\vec{B}_{n,l}^{+}$ ima najveći Wienerov indeks.

Označimo s $v_1, v_2, \dots, v_k, u_1$ i $u_2, v_{k+1}, v_{k+2}, \dots, v_{n-l}$ usmjerene putove u $\vec{B}_{n,l}^{+}$. Neka je $V_1 = \{v_1, v_2, \dots, v_k\}$, $V_2 = \{v_{k+1}, v_{k+2}, \dots, v_{n-l}\}$ i $V = V(\vec{B}_{n,l}^{+})$. S obzirom da $w(v_1) = \binom{n}{2}$, $w(v_2) = \binom{n-1}{2}, \dots, w(v_k) = \binom{n-k+1}{2}$, $\sum_{x \in V \setminus V_1} d(x, v_{n-l}) = \binom{n-k}{2}$, $\sum_{x \in V \setminus V_1} d(x, v_{n-l-1}) = \binom{n-k-1}{2}, \dots, \sum_{x \in V \setminus V_1} d(x, v_{k+1}) = \binom{l+1}{2}$ i $\sum_{x \in V \setminus V_2} d(v,x) = \binom{l}{2}$ za svaki vrh v ciklusa, zaključujemo da vrijedi $W(\vec{B}_{n,l}^{+}) =$

$\binom{n}{2} + \binom{n-1}{2} + \ldots + \binom{l+1}{2} + l\binom{l}{2}$, što pojednostavljenjem daje $W(\vec{B}^{+}_{n,l}) = \binom{n+1}{3} + \frac{l(l-1)(2l-1)}{6}$. □

Teorem 7. *Neka je $\vec{\theta}_{a,b,0}$ orijentacija grafa $\theta_{a,b,0}$. Tada je $W(\vec{\theta}_{a,b,0}) \leq W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0})$. Nadalje, ako $W(\vec{\theta}_{a,b,0}) = W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0})$, tada je $\vec{\theta}_{a,b,0}$ jako povezan te vrijedi $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) = W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,0})$ ako i samo ako $a = 2$ i $b = 1$, te $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) = W(\vec{\theta}_{a^-,b^-,0})$ ako i samo ako $a = b = 1$.*

Dokaz. Neka je $\vec{\theta}_{a,b,0}$ orijentacija grafa $\theta_{a,b,0}$ i neka je jako povezana. Prema Lemi 3, za $c = 0$ dobivamo $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) - W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,0}) = \frac{1}{2}(a-b)(ab-2)$. Iz $a \geq b \geq 1$ slijedi $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) \geq W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,0})$, pri čemu jednakost vrijedi samo ako je $a = 2$ i $b = 1$ (ako se ograničimo na neizomorfne grafove). Nadalje, $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) - W(\vec{\theta}_{a^-,b^-,0}) = \frac{1}{2}ab(a-1)$. S obzirom da je $a \geq b \geq 1$, dobivamo $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) \geq W(\vec{\theta}_{a^-,b^-,0})$, pri čemu jednakost vrijedi samo za $a = b = 1$.

Pretpostavimo da $\vec{\theta}_{a,b,0}$ nije jako povezan digraf, odnosno vrhovi stupnja tri spojeni su bridom i dvama putevima $u_1, x_1, x_2, \ldots, x_a, u_2$ i $u_1, y_1, y_2, \ldots, y_b, u_2$ u $\theta_{a,b,0}$. Zbog jednostavnosti stavljamo $x_0 = y_0 = u_1$ i $x_{a+1} = y_{b+1} = u_2$.

Najprije pretpostavimo da postoje dva luka suprotnih orijentacija na $(u_1, u_2)-$putu duljine $b+1$ u $\vec{\theta}_{a,b,0}$. Možemo uzeti lukove (y_{i+1}, y_i) i (y_{i+1}, y_{i+2}), $0 \leq i < b$. Primjetimo da je $\theta_{a,b,0} - y_{i+1}$ (graf koji se dobije uklananjem y_{i+1} iz $\theta_{a,b,0}$) izomorfan grafu $B_{a+b+1,a+2}$. Kako $\theta_{a,b,0}$ ima $a+b+2$ vrhova, imamo $w_{\vec{\theta}_{a,b,0}}(y_{i+1}) \leq \binom{a+b+2}{2}$. Zbog orijentacije lukova (y_{i+1}, y_i) i (y_{i+1}, y_{i+2}), dobivamo $W(\vec{\theta}_{a,b,0}) \leq W(\vec{B}^{+}_{a+b+1,a+2}) + \binom{a+b+2}{2}$. Koristeći Lemu 4 dobivamo:

$$
\begin{aligned}
W(\vec{\theta}_{a,b,0}) &\leq \binom{a+b+2}{3} + \frac{(a+2)(a+1)(2a+3)}{6} + \binom{a+b+2}{2} \\
&= \binom{a+b+3}{3} + \frac{(a+2)(a+1)(2a+3)}{6} \\
&= \frac{1}{2}(a^3 + a^2b + ab^2 + \frac{1}{3}b^3 + 5a^2 + 4ab + 2b^2 + 8a + \frac{11}{3}b + 4).
\end{aligned}
$$

Budući da je $a \geq b \geq 1$, vrijedi $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) - W(\vec{\theta}_{a,b,0}) \geq \frac{1}{2}(a^2b + ab^2 + \frac{2}{3}b^3 + 3ab + 3b^2 - 2a + \frac{13}{3}b) > \frac{1}{2}a(3b-2) > 0$. Stoga, $W(\vec{\theta}_{a,b,0}) < W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0})$ za sve a, b takve da je $a \geq b \geq 1$.

Sada ćemo pretpostaviti da postoje dva suprotno orijentirana luka na $(u_1, u_2)-$putu duljine $a+1$ u $\vec{\theta}_{a,b,0}$. Postupajući analogno kao u prethodnom slučaju, dobivamo:

$$
\begin{aligned}
W(\vec{\theta}_{a,b,0}) &\leq \binom{a+b+3}{3} + \frac{(b+2)(b+1)(2b+3)}{6} \\
&= \frac{1}{2}(\frac{1}{3}a^3 + a^2b + ab^2 + b^3 + 2a^2 + 4ab + 5b^2 + \frac{11}{3}a + 8b + 4)
\end{aligned}
$$

i $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) - W(\vec{\theta}_{a,b,0}) \geq \frac{1}{2}(\frac{2}{3}a^3 + 2a^2b + ab^2 + 3a^2 + 3ab + \frac{7}{3}a) > 0$ za $a \geq b \geq 1$. Stoga, $W(\vec{\theta}_{a,b,0}) < W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0})$ za sve a, b takve da je $a \geq b \geq 1$.

Dakle, možemo pretpostaviti da su $(u_1, u_2)-$putovi usmjereni u $\vec{\theta}_{a,b,0}$. S obzirom da $\vec{\theta}_{a,b,0}$ nije jako povezan, možemo pretpostaviti da $\vec{\theta}_{a,b,0} = \vec{\theta}_{a^+,b^+,0}$. Iz Leme 2 proizlazi $W(\vec{\theta}_{a^+,b^+,0}) = \frac{1}{2}(\frac{1}{3}a^3 + \frac{1}{3}b^3 + 2^a + 2b^2 + \frac{5}{3}a + \frac{5}{3}b + 2)$ i $W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0}) - W(\vec{\theta}_{a^+,b^+,0}) = \frac{1}{2}(\frac{2}{3}a^3 + 3a^2b + 2ab^2 + \frac{2}{3}b^3 + 3a^2 + 7ab + 3b^2 + \frac{13}{3}a + \frac{13}{3}b + 2) > 0$. Stoga, kad god $W(\vec{\theta}_{a,b,0})$ nije jako povezan, dobivamo $W(\vec{\theta}_{a,b,0}) < W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,0})$ za sve a, b takve da je $a \geq b \geq 1$. □

4.3 Orijentacije $\theta_{a,b,1}$ grafova

Sjetimo se da ako je $\vec{\theta}_{a,b,1}$ jako povezan digraf, onda je izomorfan ili $\vec{\theta}_{a^-,b^-,1}$ ili $\vec{\theta}_{a^-,b^+,1}$ ili $\vec{\theta}_{a^+,b^-,1}$. Iz Leme 2 dobivamo

$$
\begin{aligned}
W(\vec{\theta}_{a^-,b^-,1}) &= \frac{1}{2}(a^3 + 2a^2b + 2ab^2 + b^3 + 8a^2 + 12ab + 8b^2 + 15a + 21b + 18) \\
W(\vec{\theta}_{a^-,b^+,1}) &= \frac{1}{2}(a^3 + 2a^2b + 3ab^2 + b^3 + 8a^2 + 11ab + 7b^2 + 21a + 16b + 18) \\
W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,1}) &= \frac{1}{2}(a^3 + 3a^2b + 2ab^2 + b^3 + 7a^2 + 11ab + 8b^2 + 16a + 21b + 18).
\end{aligned}
$$

Promjenom orijentacije luka (u_1, z_1) u $\vec{\theta}_{a^+b^-,1}$, dobivamo specifičnu orijentaciju koju ćemo označiti s $\vec{\theta}^+_{a,b,1}$. Jasno je da $\vec{\theta}^+_{a,b,1}$ nije jako povezan jer su svi lukovi incidentni s z_1 usmjereni od z_1. Ipak, za neke vrijednosti a i b, ovakva orijentacija ima najveći Wienerov indeks.

Lema 5. *Vrijedi*

$$W(\vec{\theta}^+_{a,b,1}) = \frac{1}{2}(a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3 + 6a^2 + 10ab + 6b^2 + 11a + 11b + 8).$$

Dokaz. Primijetimo da u $\vec{\theta}^+_{a,b,1}$ imamo $w(v) = \binom{a+b+2}{2}$ za sve $v \in V(\vec{\theta}^+_{a,b,1}) \setminus \{z_1\}$. Stoga,

$$
\begin{aligned}
W(\vec{\theta}^+_{a,b,1}) &= w(z_1) + (a+b+2)w(u_1) \\
&= \left[\binom{a+2}{2} + \binom{b+2}{2}\right] + (a+b+2)\binom{a+b+2}{2},
\end{aligned}
$$

čime je lema dokazana. □

Teorem 8. *Neka je $\vec{\theta}^+_{a,b,1}$ orijentacija od $\theta_{a,b,1}$ koja nije jako povezana te je različita od $\vec{\theta}^+_{a,b,1}$ i od digrafa $(\vec{\theta}^+_{a,b,1})^-$ nastalog od $\vec{\theta}^+_{a,b,1}$ promjenom orijentacija svih lukova. Tada $W(\vec{\theta}_{a,b,1}) < W(\vec{\theta}^+_{a,b,1})$ ili $W(\vec{\theta}_{a,b,1}) < W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,1})$.*

Dokaz. Stavimo $x_0 = y_0 = u_1$ i $x_{a+1} = y_{b+1} = u_2$. Najprije pretpostavimo da postoje dva luka suprotno orijentirana na $(u_1, u_2)-$putu duljine $a+1$ u $\vec{\theta}_{a,b,1}$. Neka

su dani lukovi (x_{i+1}, x_i) i (x_j, x_{j+1}), $0 \leq i < j \leq a$. Neka je razlika $j - i$ najveća moguća. Razlikujemo dva slučaja.
Slučaj 1. $i = 0$ i $j = a$. Tada najviše jedan od vrhova $x_1, \ldots, x_a$ ima w jednak $\binom{a+b+3}{2}$, dok je za ostale vrhove veličina w najviše $\binom{a+b+2}{2}$. Štoviše, vrhovi $u_1, z_1, u_2, y_1, y_2, \ldots, y_b$ imaju w najviše $\binom{b+3}{2}$, iz čega dobivamo

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a,b,1}) &\leq \binom{a+b+3}{2} + (a-1)\binom{a+b+2}{2} + (b+3)\binom{b+3}{2} \\ &= \frac{1}{2}(a^3 + 2a^2b + ab^2 + b^3 + 3a^2 + 3ab + 8b^2 + 4a + 23b + 22) \\ &< W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,1}). \end{aligned}$$

Slučaj 2. $i \geq 1$ ili $j \leq a - 1$. Jer je razlika $j - i$ najveća moguća, jedan od vrhova x_i i x_{j+1} moraju imati svojstvo da svi s njima incidentni lukovi moraju biti usmjereni prema njima. S obzirom da najviše jedan od vrhova $x_{i+1}, x_{i+2}, \ldots, x_j$ ima w jednak $\binom{a+b+3}{2}$, dok ostali vrhovi u $\vec{\theta}_{a,b,1}$ imaju w najviše $\binom{a+b+2}{2}$, dobivamo

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a,b,1}) &\leq 0 + \binom{a+b+3}{2} + (a+b+1)\binom{a+b+2}{2} \\ &= \frac{1}{2}(a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3 + 5a^2 + 10ab + 5b^2 + 10a + 10b + 8) \\ &< W(\vec{\theta}^+_{a,b,1}). \end{aligned}$$

Ako postoje dva luka suprotne orijentacije na $(u_1, u_2)-$putu duljine $b + 1$ u $\vec{\theta}_{a,b,1}$, tada u prvom slučaju dobivamo

$$W(\vec{\theta}_{a,b,1}) \leq \frac{1}{2}(a^3 + a^2b + 2ab^2 + b^3 + 8a^2 + 3ab + 3b^2 + 23a + 4b + 22) < W(\vec{\theta}_{a^+,b^-,1})$$

dok u drugom slučaju dobivamo $W(\vec{\theta}_{a,b,1}) < W(\vec{\theta}^+_{a,b,1})$. Zato ćemo u nastavku pretpostaviti da su $(u_1, u_2)-$putovi duljina $a + 1$ i $b + 1$ usmjereni u $\vec{\theta}_{a,b,1}$. Razlikujemo dva slučaja.
Slučaj 1. $(u_1, u_2)-$put duljine dva nije usmjeren. Pretpostavimo da $\vec{\theta}_{a,b,1}$ sadrži lukove (z_1, u_1) i (z_1, u_2). S obzirom da je $\vec{\theta}_{a,b,1}$ različit od $\vec{\theta}^+_{a,b,1}$ i $(u_1, u_2)-$putovi duljina $a + 1$ i $b + 1$ jesu usmjereni, možemo uzeti da $\vec{\theta}_{a,b,1}$sadrži usmjerene putove $u_1, x_1, x_2, \ldots, x_a, u_2$ i $u_1, y_1, y_2, \ldots, y_b, u_2$. Tada

$$\begin{aligned} W(\vec{\theta}_{a,b,1}) &= w(u_1) + w(z_1) + W(P_{a+1} + W(P_{b+1})) \\ &= \binom{a+1}{2} + \binom{b+2}{2} + \binom{b+2}{2} + \binom{a+2}{2} + \binom{a+2}{3} + \binom{b+2}{3} \\ &= \frac{1}{2}(\frac{1}{3}a^3 + \frac{1}{3}b^3 + 3a^2 + 3b^2 + \frac{14}{3}a + \frac{20}{3}b + 8) \\ &< W(\vec{\theta}^+_{a,b,1}). \end{aligned}$$

Slučaj 2. $(u_1, u_2)-$put duljine dva je usmjeren. S obzirom da su svi $(u_1, u_2)-$putovi usmjereni i $\vec{\theta}_{a,b,1}$ nije jako povezan, možemo pretpostaviti da $\vec{\theta}_{a,b,1} = \vec{\theta}_{a^+,b^+,1}$. Tada, primjenom Leme 2 dobivamo

$$W(\vec{\theta}_{a^+,b^+,1}) = \frac{1}{2}(\frac{1}{3}a^3 + \frac{1}{3}b^3 + 2a^2 + 2b^2 + \frac{5}{3}a + \frac{5}{3}b + 8) < W(\vec{\theta}^+_{a,b,1}).$$

□

Izostavljanjem detalja koji se nalaze u [6], dobivamo sljedeći rezultat.

Korolar 1. *Orijentacija grafa $\theta_{a,b,1}$ koja ima najveći Wienerov indeks nije jako povezana ako i samo ako*
(a) $ab^2 - a^2 - ab - 2b^2 - 5a - 10b - 10 > 0$ *ili*
(b) $ab^2 - a^2 - ab - 2b^2 - 5a - 10b - 10 = 0$ *i orijentacija od $\theta_{a,b,1}$ nije izomorfna* $\vec{\theta}_{a^+,b^-,1}$. □

Literatura

[1] D. Bonchev, *Complexity of Protein-Protein Interaction Networks, Complexes, and Pathways*, in: P. M. Conn (ed.), Handbook of Proteomic Methods, Humana Press, Totowa, NJ, 2003, 451—462.

[2] P. Dankelmann, *On the Wiener index of orientations of graphs*, Discrete Applied Mathematics **336**(2024), 125–131.

[3] K. Hajdinová, *Wiener index in directed trees*, 2015 magistarski rad. SvF-5342-56691 (na Slovačkom jeziku).

[4] F. Harary, *Graph theory*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1969.

[5] F. Harary, *Status and constrastatus*, Sociometry **22**(1959), 23–43.

[6] M. Knor, R. Škrekovski, A. Tepeh, *Orientations of graphs with maximum Wiener index*, Discrete Applied Mathematics **211**(2016), 121–129.

[7] M. Knor, R. Škrekovski, A. Tepeh, *Selected topics on Wiener index*, Ars Mathematica Contemporanea (2024), DOI:10.26493/1855-3974.3077.63a

[8] M. Knor, R. Škrekovski, A. Tepeh, *Some remarks on Wiener index of oriented graphs*, Applied Mathematics and Computations **273**(2016), 631-–636.

[9] J. W. Moon, *On the total distance between nodes in tournaments*, Discrete Mathematics **151**(1996), 169—174.

[10] J. Plesník, *On the sum of all distances in a graph or digraph*, Journal of Graph Theory **8**(1984), 1—21.

[11] H. Wiener, *Structural determination of paraffin boiling points*, Journal of the American Chemical Society **69**(1947), 17—20.

Sažetak

Rana faza istraživanja Wienerovog indeksa usmjerenih grafova bila je ograničena samo na jako povezane usmjerene grafove. Izostavljanjem uvjeta o jakoj povezanosti, Wienerov indeks digrafa definiran je kao suma udaljenosti po uređenim parovima vrhova, dok se za parove između kojih ne postoji usmjereni put uzima da je udaljenost jednaka nuli. Ovaj rad je posvećen problemu pronalaska orijentacija nekih klasa grafova koje imaju najveći Wienerov indeks. Razmotreni su turniri, neke klase stabala te neke vrste theta grafova.

Ključne riječi

digraf, Wienerov indeks, orijentacija, jako povezan digraf, turnir, stablo, theta graf

Orientations of graphs with the largest Wiener index

Summary

The early research phase on the Wiener index of directed graphs was limited only to strongly connected directed graphs. By removing the condition of strong connectivity, the Wiener index of a digraph is defined as the sum of distances over ordered pairs of vertices, while for pairs where there is no directed path, the distance is considered to be zero. This paper is dedicated to the problem of finding orientations of certain classes of graphs that have the largest Wiener index. Tournaments, some classes of trees, and certain types of theta graphs are considered.

Keywords

digraph, Wiener index, orientation, strongly connected digraph, tournament, tree, theta graph

Životopis

Rođena sam 13. lipnja 2001. godine u Osijeku. Pohađala sam Osnovnu školu Vladimir Nazor Čepin. Nakon završetka osnovne škole upisala sam I. Gimnaziju u Osijeku, koju sam završila 2020. godine. Svoje obrazovanje nastavlila sam upisom Prijediplomskog studija Matematike na Fakultetu primijenjene matematike i informatike u Osijeku. Tijekom treće godine studija sam volontirala na projektu "Kreativna STEM revolucija u Slavoniji".