Računanje Wienerovog indeksa stabla

Markulov, Ivona

Master's thesis / Diplomski rad

2016

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Mathematics / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za matematiku**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:126:398036

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni integrirani studij matematike i informatike
Smjer: Nastavnički

Ivona Markulov

Računanje Wienerovog indeksa stabla

Diplomski rad

Osijek, 2016.

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni integrirani studij matematike i informatike
Smjer: Nastavnički

Ivona Markulov

Računanje Wienerovog indeksa stabla

Diplomski rad
Mentorica: doc. dr. sc. Snježana Majstorović

Osijek, 2016.

Sadržaj

1 Uvod

Wienerov indeks definira se kao suma udaljenosti među svim vrhovima grafa. U kemijskoj teoriji grafova pripada grupi takozvanih topoloških molekularnih deskriptora. Molekularni deskriptor se definira kao konačan rezultat logičkog i matematičkog postupka koji transformira kemijske informacije kodirane simboličkom reprezentacijom molekule u numeričku vrijednost. Topološki molekularni deskriptor je ona numerička vrijednost koja je izračunata obzirom na odgovarajući molekularni graf, tj. neusmjereni graf koji reprezentira određeni kemijski spoj na način da mu vrhovi predstavljaju atome, a bridovi kemijske veze između atoma.

Wienerov indeks nazvan je po znanstveniku Haroldu Wieneru koji je 1947. godine ustanovio postojanje korelacije između točke vrenja parafina i strukture molekula. U svom radu [12] točku vrenja parafina definira linearnom formulom:

$$t_B = aw + bp + c,$$

gdje je p polarnost, tj. broj parova atoma ugljika koji su udaljeni za točno tri ugljik - ugljik kemijske veze, a, b i c su konstante dane izomerne grupe, a w je suma udaljenosti svih parova ugljika u molekuli izraženih u broju ugljik - ugljik kemijskih veza, odnosno, w je Wienerov indeks.

Danas je poznato nekoliko stotina globalnih (opisuju čitavu molekulu) i lokalnih (opisuju pojedine atome u molekuli) topoloških indeksa, a važnost im se očituje u činjenici da za opisivanje raznih kemijskih spojeva sama kemijska formula, kao najjednostavnija reprezentacija molekule, nije dovoljna. Primjerice, u proizvodnji droga, cilj je izgraditi kemijske spojeve sa određenim svojstvima koja ne ovise samo o kemijskoj formuli, nego i o molekularnoj strukturi. Tako npr. kemijska formula $C_{17}H_{21}NO_4$ ne daje dovoljno informacija o vrsti droge jer je zajednička i za kokain i za skopolamin.

Winerov indeks se kao gobalna invarijanta grafa intenzivno proučavao i u teorijskoj matematici. Razvijeni su brojni algoritmi za njegovo računanje, dokazane su brojne relacije koje ga povezuju sa mnoštvom drugih grafovskih invarijanti i grafovskih parametara.

Danas je vrlo popularan u proučavanju kompleksnih mreža, naročito u pronalaženju "najvažnijih" vrhova u mreži za koje su odgovorni takozvani indeksi centralnosti.

Nadalje, postoje mnogi problemi u teoriji komunikacija, lociranju objekata, kriptografiji, arhitekturi itd. gdje je Wienerov indeks odgovarajućeg grafa ili pak prosječna udaljenost vrhova u grafu od velike važnosti. Jedan od tih problema je pronalazak razapinjujućeg stabla s najmanjom prosječnom udaljenosti među vrhovima.

U drugom poglavlju definiramo osnovne pojmove iz teorije grafova koje ćemo koristiti u radu te Wienerov indeks. U trećem poglavlju računamo Winerov indeks nekih specijalnih grafova. U četvrtom poglavlju iskazujemo i dokazujemo direktne i rekurzivne formule za Wienerov indeks stabla. Neke od tih formula možemo primijeniti na povezane grafove.

2 Osnovni pojmovi i definicije

Ovaj je odjeljak posvećen definicijama i objašnjenjima osnovnih pojmova iz teorije grafova koje ćemo koristiti u radu. Za bolje razumijevanje nekih pojmova navedeno je nekoliko primjera ilustriranih crtežom.

Definicija 2.1. ***Graf*** *G je uređena trojka $G = (V(G), E(G), \psi_G)$ koja se sastoji od nepraznog skupa V čije elemente zovemo vrhovima, skupa E disjunktnog s V čije elemente zovemo bridovima i funkcije ψ koja svakom bridu od G pridružuje neuređeni par ne nužno različitih vrhova od G.*

Obično broj vrhova nekog grafa označavamo s n, a broj bridova s m.
Za graf G kažemo da je **konačan** ako su $V(G)$ i $E(G)$ konačni skupovi. Kažemo da brid e spaja vrhove u i v ili da su u i v krajevi brida e u G ako vrijedi $\psi_G(e) = \{u, v\}$. Još kažemo da je brid e incidentan s vrhom u odnosno v.
Jednostavan graf je onaj graf u kojemu su svaka dva vrha spojena najviše jednim bridom.

Podgraf grafa G je graf nastao od G uklanjanjem određenog broja bridova ili vrhova iz G.
Razapinjujući podgraf grafa G je podgraf od G čiji se skup vrhova podudara sa skupom vrhova od G.

Definicija 2.2. ***Stupanj*** *$d_G(v)$ vrha $v \in V(G)$ je broj bridova incidentnih sa v.*

Niz stupnjeva grafa G s n vrhova je vektor $(d_G(v_1), d_G(v_2), \ldots, d_G(v_n))$ pri čemu vrijedi $d_G(v_1) \geq d_G(v_2) \geq \ldots \geq d_G(v_n) \geq 0$ i $n = |V(G)|$.

Definicija 2.3. ***Put*** *u grafu G je konačan niz $P = v_1 e_1 v_2 e_2 \ldots e_{k-1} v_k$ čiji su članovi naizmjence međusobno različiti vrhovi v_i i međusobno različiti bridovi e_i tako da brid e_i spaja vrhove v_i i v_{i+1} za svaki $i = 1, \ldots, k-1$.*

Broj $k-1$ iz prethodne definicije zovemo **duljinom puta** P, a vrhove v_1 i v_k zovemo redom početak i kraj puta P. Još kažemo da se radi o (v_1, v_k)-putu.

Definicija 2.4. ***Udaljenost*** *$d_G(u, v)$ između dva vrha $u, v \in V(G)$ je duljina najkraćeg (u, v)-puta u G. Ako takav put ne postoji, onda pišemo $d_G(u, v) = \infty$.*

Lako se može provjeriti da je udaljenost metrika na skupu vrhova grafa G.
Povezanim grafom zovemo onaj graf G za koji vrijedi da je $d_G(u, v)$ konačan broj za svaka dva vrha $u, v \in V(G)$, tj. to je graf u kojem postoji put između svaka dva njegova vrha. U suprotnom kažemo da je graf **nepovezan**.

Komponenta povezanosti grafa G je najveći podgraf grafa G koji je povezan. Povezani grafovi imaju samo jednu komponentu povezanosti.

Definicija 2.5. ***Dijametar*** *$diam(G)$ grafa G definira se kao*

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

Definicija 2.6. *Udaljenost $D_G(v)$ vrha v u grafu G je suma udaljenosti između v i svih ostalih vrhova u G.*

Definicija 2.7. ***Wienerov indeks*** *$W(G)$ grafa G je definiran s*

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d_G(u,v), \tag{2.0.1}$$

a prosječna udaljenost $\mu(G)$ između vrhova u G je dana s

$$\mu(G) = \frac{W(G)}{\binom{|V(G)|}{2}}.$$

Obzirom na Definiciju 2.6 Wienerov indeks možemo definirati i ovako:

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} D_G(v), \tag{2.0.2}$$

pri čemu stavljamo $\frac{1}{2}$ jer smo u sumi put između svaka dva vrha brojali dva puta.

Napomena 2.8. *Kada je jasno ili nevažno o kojem se grafu radi, onda u $d_G(v)$, $d_G(u,v)$, $D_G(v)$,... izostavljamo oznaku grafa G i pišemo $d(v)$, $d(u,v)$, $D(v)$,...*

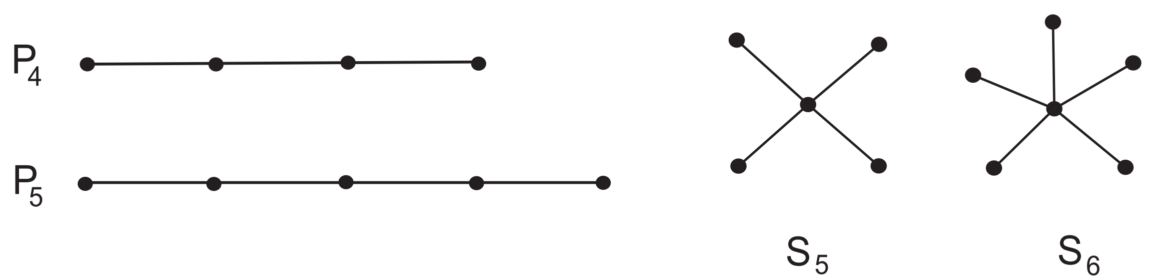
U ovom radu bavit ćemo se isključivo konačnim jednostavnim povezanim grafovima i to uglavnom onima koji ne sadrže cikluse, tj. stablima. Stoga nam treba još nekoliko definicija.

Definicija 2.9. ***Ciklus*** *u grafu G je put kod kojeg se početni i krajnji vrh podudaraju.*

Za graf kažemo da je **aciklički** ako ne sadrži cikluse.

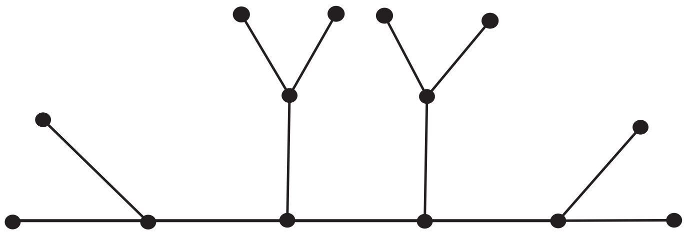
Definicija 2.10. ***Stablo*** *je povezan aciklički graf.*

Šuma je nepovezan graf čije su sve komponente povezanosti stabla.
Svako stablo s $n \geq 2$ vrhova sadrži najmanje dva vrha stupnja 1. Takve vrhove zovemo **listovima**. Stablo sa n vrhova koji ima točno dva lista zovemo **put** s n vrhova i označavamo ga s P_n. Stablo sa n vrhova i maksimalnim brojem listova zovemo **zvijezdom** i označavamo s S_n.



Slika 1: Primjeri nekih puteva i nekih zvijezda.

Definicija 2.11. *Neka je T stablo. Vrh $v \in V(T)$ zovemo* ***točkom grananja*** *stabla T ako je $d(v) \geq 3$.*



Slika 2: Primjer stabla s 14 vrhova i s maksimalnim brojem točaka grananja.

Napomena 2.12. *Svako stablo s n vrhova sadrži najviše $\frac{n-2}{2}$ točaka grananja. Suma stupnjeva svih vrhova u stablu s n vrhova je $2(n-1)$. Najviše točaka grananja bit će u onom stablu koje ima maksimalan broj vrhova stupnja 3. Ako sa n_1 označimo broj listova, a sa n_3 broj vrhova stupnja 3 u stablu, onda iz $n_1+n_3=n$ i $n_1+3n_3=2(n-1)$ slijedi $n_3=\left\lfloor \frac{n-2}{2} \right\rfloor$.*

Definicija 2.13. *Neka je T stablo. Podstablo S stabla T zovemo* **segment** *od T ako je S put čiji su početak i kraj (rubovi) ili točke grananja ili listovi, a svi unutarnji vrhovi od S su stupnja 2.*

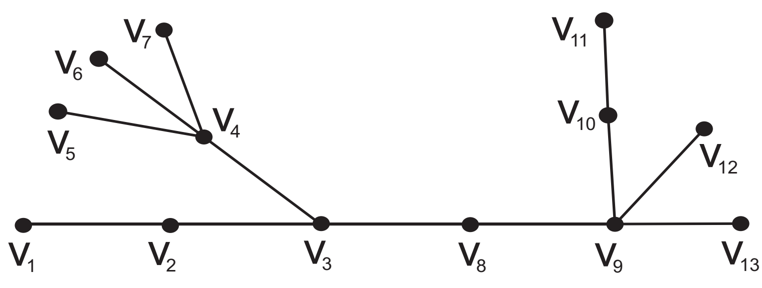
Duljina segmenta S jednaka je broju bridova u S i označava se sa l_S. Skup svih rubnih vrhova segmenata u T označavati ćemo sa $SP(T)$. Sa S^* ćemo označavati podgraf (koji je put) od S koji sadrži l_S vrhova, tj. $S^* = S \setminus \{v\}$, gdje je v rubni vrh od S, a sa S^0 segment S bez oba rubna vrha. Ovo posljednje ima smisla definirati jedino za one segmente S za koje vrijedi $l_S > 1$.

Napomena 2.14. *Svaki brid stabla T s n vrhova pripada točno jednom segmentu pa vrijedi*

$$\sum_{S \text{ seg od } T} l_S = n - 1.$$

Kada bi postojao brid koji pripada i segmentu S i segmentu S', $S \neq S'$, onda bi ti segmenti morali sadržavati barem jedan vrh stupnja 3, a to je nemoguće.

Primjer 2.15. *Promotrimo sljedeću sliku:*



Slika 3: Stablo T sa 13 vrhova.

Niz stupnjeva stabla T je $(4,4,3,2,2,2,1,1,1,1,1,1,1)$ a dijametar mu je $diam(T) = 6$. Stablo T ima samo tri točke grananja. To su vrhovi v_3, v_4 i v_9.
Nadalje, T sadrži ukupno 9 segmenata: $S_1 = v_1v_2v_3$, $S_2 = v_3v_4$, $S_3 = v_4v_5$, $S_4 = v_4v_6$, $S_5 = v_4v_7$, $S_6 = v_3v_8v_9$, $S_7 = v_9v_{10}v_{11}$, $S_8 = v_9v_{12}$ i $S_9 = v_9v_{13}$. Duljina segmenta S_1 je

$l_{S_1} = 2$, dok je npr. duljina segmenta S_4 jednaka $l_{S_4} = 1$. Rubni vrhovi segmenta S_6 su v_3 i v_9 pa je $SP(T) = \{v_3, v_9\}$, a $S_6^* = \{v_8, v_9\}$ ili smo mogli odabrati $S_6^* = \{v_3, v_8\}$.
Wienerov indeks stabla T je

$$W(T) = \sum_{i=1}^{12} \sum_{j=i+1}^{13} d(v_i, v_j)$$

pa imamo

$$W(T) = 46 + 34 + 23 + 25 + 32 + 30 + 28 + 10 + 5 + 5 + 6 + 2 = 246.$$

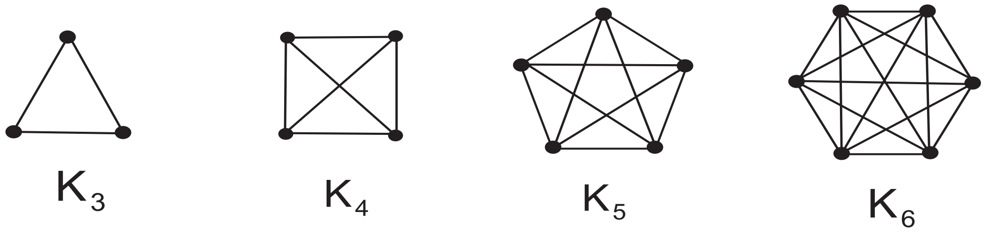
Prosječna udaljenost $\mu(T)$ između vrhova u T je

$$\mu(T) = \frac{246}{\binom{13}{2}} = \frac{41}{13} \approx 3.1538.$$

3 Wienerov indeks nekih specijalnih grafova

U nastavku ćemo izvesti formule za Wienerov indeks nekih uobičajenih tipova grafova. Pritom ćemo, gdje je potrebno, za određeni tip grafa navesti definiciju te ga reprezentirati sa sličicom.

Definicija 3.1. *Potpun graf K_n s n vrhova je jednostavan graf u kojem su svaka dva vrha spojena bridom.*



Slika 4: Neki primjeri potpunih grafova.

- Wienerov indeks potpunog grafa K_n jednak je $W(K_n) = \binom{n}{2}$.

Obzirom da su u potpunom grafu svaka dva vrha spojena bridom, udaljenost između svaka dva vrha jednaka je 1. Broj bridova u K_n jednak je $|E(K_n)| = \binom{n}{2}$ pa slijedi $W(K_n) = \binom{n}{2}$.

- Wienerov indeks zvijezde S_n je $W(S_n) = (n-1)^2$

Vrh w maksimalnog stupnja zvijezde S_n spojen je sa svim ostalim vrhovima pa vrijedi

$$d(w, v) = 1, \ \ \forall v \in V(S_n), \ \ w \neq v.$$

Udaljenost svaka dva lista jednaka je 2. Parova listova ima ukupno $\binom{n-1}{2}$. Imamo

$$W(S_n) = n - 1 + 2\binom{n-1}{2} = (n-1)^2.$$

- Wienerov indeks puta P_n jednak je $W(P_n) = \binom{n+1}{3}$.

Označimo vrhove puta P_n slijeva na desno redom s $v_1, v_2, \ldots, v_n$. Iz

$$W(P_n) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} d(v_i, v_j)$$

dobivamo

$$\begin{aligned} W(P_n) &= (1 + 2 + \ldots + n - 1) + (1 + 2 + \ldots + n - 2) + \ldots + (1 + 2) + 1 \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-i} j = \sum_{i=1}^{n} \binom{i}{2} \\ &= \binom{n+1}{3}. \end{aligned}$$

Posljednju jednakost je lako dokazati indukcijom po $n \geq 2$.

- Wienerov indeks ciklusa C_n jednak je

$$W(C_n) = \begin{cases} \dfrac{n^3}{8}, & n \text{ paran} \\ \\ \dfrac{n(n^2-1)}{8}, & n \text{ neparan.} \end{cases}$$

Primijetimo da je udaljenost $D(w)$ vrha w u ciklusu C_n konstantna tj. ne ovisi o izboru vrha w. Stoga je dovoljno naći tu vrijednost za proizvoljno odabran vrh ciklusa, pomnožiti ju sa brojem vrhova n i podijeliti sa dva. Dakle, koristimo formulu (2.0.2).
Najprije ćemo promotriti slučaj kada je n paran. Dijametar ciklusa je $\dfrac{n}{2}$ pa je udaljenost proizovljnog vrha $w \in V(C_n)$ jednaka

$$\begin{aligned} D(w) &= 2\left(1+2+\ldots+\frac{n}{2}-1\right)+\frac{n}{2} \\ &= \left(\frac{n}{2}-1\right)\frac{n}{2}+\frac{n}{2} \\ &= \frac{n^2}{4}. \end{aligned}$$

Slijedi

$$W(C_n) = \frac{n}{2}\cdot\frac{n^2}{4} = \frac{n^3}{8}.$$

Za n neparan imamo

$$\begin{aligned} D(w) &= 2\left(1+2+\ldots+\frac{n-1}{2}\right) \\ &= \frac{n-1}{2}\left(\frac{n-1}{2}+1\right) \\ &= \frac{n^2-1}{4}. \end{aligned}$$

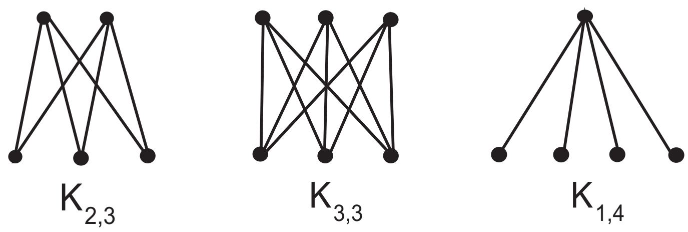
Slijedi

$$W(C_n) = \frac{n}{2}\cdot\frac{n^2-1}{4} = \frac{n(n^2-1)}{8}.$$

Definicija 3.2. *Graf je bipartitan ako mu se skup vrhova može particionirati u 2 skupa tako da nijedan brid nema oba kraja u istom skupu particije. Potpun bipartitan graf jednostavan je bipartitan graf s particijom (X,Y) u kojem je svaki vrh u X spojen sa svakim vrhom u Y. Uz $|X| = m$ i $|Y| = n$, oznaka takvog grafa je $K_{m,n}$.*

- Wienerov indeks potpunog bipartitnog grafa $K_{m,n}$ jednak je

$$W(K_{m,n}) = m^2 + n^2 + mn - m - n.$$



Slika 5: Neki primjeri potpunih bipartitnih grafova.

Neka je (X, Y) biparticija skupa vrhova od $K_{m,n}$ tako da $|X| = m$ i $|Y| = n$. Za svaki vrh $u \in X$ udaljenost $D(u)$ ima istu vrijednost: do svih vrhova u Y udaljenost mu je 1, a do vrhova iz iste particije vrh u je udaljen za 2. Slično zaključujemo za neki vrh $v \in Y$. Imamo

$$\begin{aligned} D(u) &= n + 2(m-1) \\ D(v) &= m + 2(n-1). \end{aligned}$$

Slijedi

$$W(K_{m,n}) = \frac{1}{2}[m(n + 2m - 2) + n(m + 2n - 2)] = m^2 + n^2 + mn - m - n.$$

Ukoliko je $m = n$, onda vrijedi

$$W(K_{n,n}) = n(3n - 2).$$

4 Različiti načini računanja Wienerovog indeksa stabala

Obzirom da je stablo povezan graf koji ne sadrži cikluse, to postoji točno jedan put između proizvoljna dva vrha. Zbog takvih svojstava, Wienerov indeks je puno lakše računati za stabla nego za proizvoljne povezane grafove. U ovom odjeljku ćemo predstaviti različite formule za izračunavanje Wienerovog indeksa, najprije direktne, a onda i rekurzivne. Kod rekurzivnih formula bit će potrebno koristiti neka istaknuta svojstva stabala pa će time i računanje Wienerova indeksa biti mnogo jednostavnije.

4.1 Direktne formule

Prvu formulu koju ćemo dokazati otrkio je H. Wiener [12] 1947.godine. Dok definicija Wienerovog indeksa stavlja naglasak na to koliko daleko moramo ići iz svakog vrha kako bismo dosegnuli sve vrhove grafa, ova formula broji koliko često moramo proći kroz svaki brid.

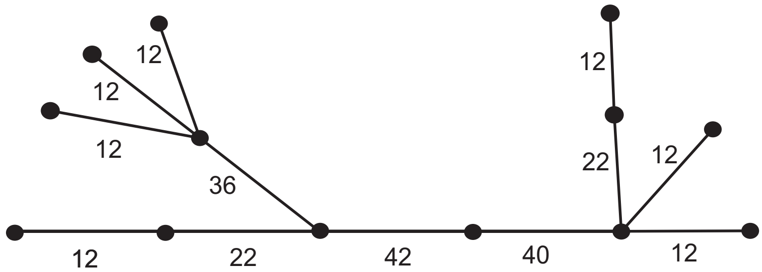
Neka je $e = uv \in E(T)$ brid stabla T. Podstabla T_u i T_v definiramo kao komponente povezanosti stabla T nastale uklanjanjem brida e iz T. Komponenta T_u je ona koja sadrži u, a T_v ona koja sadrži v. Stavit ćemo oznake $n_u(e) = |V(T_u)|$ i $n_v(e) = |V(T_v)|$.

Teorem 4.1. *Neka je T stablo. Tada vrijedi*

$$W(T) = \sum_{e=uv \in E(T)} n_u(e) n_v(e). \tag{4.1.1}$$

Dokaz. Neka je $e = uv$ brid u T. Za prizvoljno odabrane vrhove $x \in V(T_u)$ i $y \in V(T_v)$ (jedinstveni) put između x i y mora sadržavati e. Ako je odabir vrhova drugačiji, tj. ako oba vrha pripadaju istoj komponenti, npr. T_u, onda e ne pripada putu između tih vrhova. Prema osnovnom principu prebrojavanja (princip produkta) broj $n_u(e)n_v(e)$ odgovara na pitanje koliko puteva u T sadrži brid e. Suma ovih vrijednosti uzeta po svim bridovima od T daje Wienerov indeks od T. □

Primjer 4.2. *Izračunajmo Wienerov indeks stabla T iz Primjera 2.15 koristeći formulu iz*



Slika 6: Stablo iz Primjera 2.15.

Teorema 4.1. Na Slici 6 svakom bridu stabla pridružen je odgovarajući broj puteva kojima taj brid pripada. Dobivamo

$$W(T) = 7 \cdot 12 + 2 \cdot 22 + 36 + 40 + 42 = 246.$$

Sljedeću formulu za Wienerov indeks postavili su Dobrynin i Gutman [6] 1994. godine:

Teorem 4.3. *Neka je T stablo s n vrhova. Wienerov indeks od T možemo računati prema formuli*

$$W(T) = \frac{1}{4}\left\{n^2(n-1) \; - \sum_{e=uv\in E(T)} [D_T(v) - D_T(u)]^2\right\}. \tag{4.1.2}$$

Dokaz. Neka je $e = uv$ proizvoljan brid u T. Prema definiciji komponenata povezanosti T_u i T_v vrijedi $n_u(e) + n_v(e) = n$. Nadalje imamo

$$\begin{aligned}
D_T(v) - D_T(u) &= \left(\sum_{x\in T_u} d_T(v,x) + \sum_{y\in T_v} d_T(v,y)\right) - \left(\sum_{x\in T_u} d_T(u,x) + \sum_{y\in T_v} d_T(u,y)\right) \\
&= \sum_{x\in T_u}(d_T(v,x) - d_T(u,x)) - \sum_{y\in T_v}(d_T(u,y) - d_T(v,y)) \\
&= \sum_{x\in T_u} 1 - \sum_{y\in T_v} 1 \\
&= n_u(e) - n_v(e).
\end{aligned}$$

Slijedi

$$\begin{aligned}
2n_u(e) &= n + (D_T(v) - D_T(u)) \\
2n_v(e) &= n - (D_T(v) - D_T(u)).
\end{aligned}$$

Uvrštavanjem gornjih izraza u formulu (4.1.1) dobivamo

$$\begin{aligned}
W(T) &= \sum_{e=uv\in E(T)} \frac{1}{2}\Big[n + D_T(v) - D_T(u)\Big]\frac{1}{2}\Big[n - D_T(v) + D_T(u)\Big] \\
&= \frac{1}{4}\sum_{e=uv\in E(T)} \left[n^2 - (D_T(v) - D_T(u))^2\right] \\
&= \frac{1}{4}\left[n^2(n-1) - \sum_{(u,v)\in E(T)} (D_T(v) - D_T(u))^2\right],
\end{aligned}$$

čime je dokaz teorema završen. □

Primjer 4.4. *Neka je T stablo kao na slici 6. Izračunajmo mu Wienerov indeks primjenom Teorema 4.3. Poslužit ćemo se jednakošću*

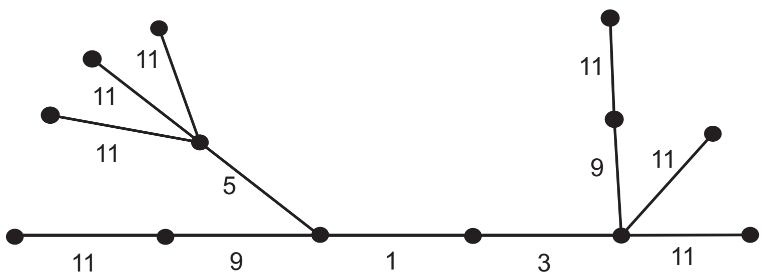
$$D_T(v) - D_T(u) = n_u(e) - n_v(e), \quad \forall e = uv \in E(T)$$

i tako pojednostaviti račun.
Dobivamo

$$W(T) = \frac{1}{4}[13^2 \cdot 12 - (7 \cdot 11^2 + 2 \cdot 9^2 + 5^2 + 3^2 + 1)] = 246.$$

Korolar 4.5. *Neka je T stablo s n vrhova. Tada vrijedi*

$$W(T) = \frac{1}{4}\left[n(n-1) + \sum_{v\in V(T)} d_T(v) D_T(v)\right].$$



Slika 7: Stablo u kojemu je svakom bridu $e = uv$ pridružen broj $|n_u(e) - n_v(e)|$.

Dokaz. Neka je $N(v)$ skup svih susjeda vrha v u T. Jasno je da vrijedi $|N(v)| = d_T(v)$. Formulu iz Teorema 4.3 možemo zapisati na sljedeći način:

$$\begin{aligned} W(T) &= \frac{1}{4}\Big[n^2(n-1) - \sum_{e=uv\in E(T)} \big[D_T(v) - D_T(u)\big]^2\Big] \\ &= \frac{1}{4}\Big[n^2(n-1) - \frac{1}{2}\sum_{v\in V(T)}\sum_{u\in N(v)} (D_T(v)^2 - 2D_T(v)D_T(u) + D_T(u)^2)\Big] \\ &= \frac{1}{4}\Big[n^2(n-1) - \frac{1}{2}\sum_{v\in V(T)} \Big(D_T(v)^2 d_T(v) - 2\sum_{u\in N(v)} D_T(v)D_T(u) + D_T(v)^2 d_T(v)\Big)\Big] \end{aligned}$$

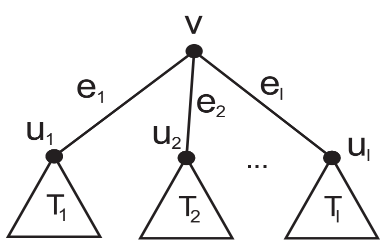
jer

$$\sum_{v\in V(G)}\sum_{u\in N(v)} D_T(v)^2 = \sum_{v\in V(G)}\sum_{u\in N(v)} D_T(u)^2 = d_T(v)D_T(v)^2.$$

Slijedi

$$W(T) = \frac{1}{4}\Big[n^2(n-1) - \sum_{v\in V(T)} D_T(v)\Big(D_T(v)d_T(v) - \sum_{u\in N(v)} D_T(u)\Big)\Big]. \tag{4.1.3}$$

Uzmimo proizvoljan $v \in V(T)$ i pretpostavimo da $d_T(v) = l$. Da bismo izračunali $D_T(u_i)$, $u_i \in N(v)$, $i = 1, \ldots, l$, promotrimo sljedeću sliku:



Slika 8

Znamo da vrijedi jednakost $D_T(u_i) - D_T(v) = n_v(e_i) - n_{u_i}(e_i)$ te da $n_v(e_i) + n_{u_i}(e_i) = n$. Prema Slici 8 imamo da je $n_{u_i}(e_i) = |V(T_i)|$ pri čemu smo uzeli da komponenta povezanosti T_i sadrži vrh u_i. Uočimo da vrijedi i $n_v(e_i) = n - |V(T_i)|$ pa dobivamo

$$D_T(u_i) = n + D_T(v) - 2|V(T_i)|.$$

Možemo pisati

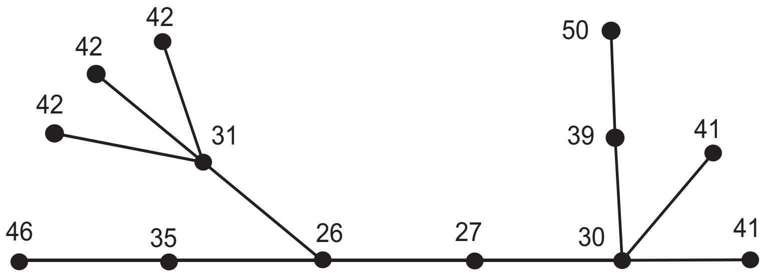
$$\sum_{u\in N(v)} D_T(u) = d_T(v)n + D_T(v)d_T(v) - 2(n-1)$$

pa uvrštavanjem u (4.1.3) slijedi

$$\begin{aligned} W(T) &= \frac{1}{4}\Bigg[n^2(n-1) - \sum_{v\in V(T)} (2(n-1)D_T(v) - nD_T(v)d_T(v))\Bigg] \\ &= \frac{1}{4}\Bigg[n^2(n-1) - 4(n-1)W(T) + n\sum_{v\in V(T)} D_T(v)d_T(v)\Bigg]. \end{aligned}$$

Rješavajući jednadžbu po nepoznanici $W(T)$ dolazimo do željenog izraza i time je dokaz teorema završen. □

Primjer 4.6. *Primjenimo Korolar 4.5 na stablo T sa slike 7.*



Slika 9: Stablo u kojemu je svakom vrhu v pridružen broj $D_T(v)$.

Dobivamo

$$W(T) = \frac{1}{4}[13\cdot 12 + (3\cdot 42 + 2\cdot 41 + 50 + 46 + 2\cdot(39+35+27) + 4\cdot(31+30) + 3\cdot 26)] = 246.$$

Napomena 4.7. *Primjeri 4.2-4.6 pokazuju da su formule za računanje Wienerovog indeksa iskazane u Teoremima 4.1 i 4.3 te u Korolaru 4.5 više od teoretskog nego od praktičnog značenja.*

4.1.1 Točke grananja, segmenti i Wienerov indeks

U nastavku ćemo predstaviti i dokazati formule za računanje Wienerova indeksa u kojima se koriste točke grananja i segmenti stabala. Prvu takvu formulu postavili su Doyle i Graver 1977. godine [7], a za nju će nam biti potrebna sljedeća definicija:

Definicija 4.8. *Neka je G povezan graf s $|V(G)| \geq 3$ vrhova. Za vrhove $v_1, v_2, v_3 \in V(G)$ kažemo da su* ***kolinearni*** *ako vrijedi*

$$d_G(v_i, v_j) + d_G(v_j, v_k) = d_G(v_i, v_k)$$

za neki izbor tri međusobno različita i, j, k iz skupa $\{1, 2, 3\}$.

Broj tročlanih podskupova od $V(G)$ koji se ne sastoje od kolinearnih vrhova označavamo s $\tau(G)$.

Teorem 4.9 (Doyle-Graverova formula)**.** *Neka je T stablo s n vrhova. Vrijedi*

$$W(T) = \binom{n+1}{3} - \sum_{v \in V(T)} \sum_{1 \leq i < j < k \leq d_T(v)} |V(T_i)||V(T_j)||V(T_k)| \tag{4.1.4}$$

pri čemu su T_i, T_j i T_k definirani kao u dokazu Korolara 4.5.

Dokaz. Neka je C skup svih kolinearnih tročlanih podskupova od $V(T)$. Obzirom da između svaka dva vrha u i v stabla T postoji točno jedan put, svaki vrh w za kojeg vrijedi $d_T(u,w) + d_T(w,v) = d_T(u,v)$ mora pripadati putu između vrhova u i v. To znači da za svaka dva vrha u i v postoji točno $d_T(u,v) - 1$ vrhova koji su kolinearni s njima. Slijedi

$$|C| = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(T)} (d_T(u,v) - 1) = W(T) - \binom{n}{2}. \tag{4.1.5}$$

Kako svaka trojka vrhova u, v, w može biti ili kolinearna ili nekolinearna, imamo

$$|C| + \tau(T) = \binom{n}{3}. \tag{4.1.6}$$

Kombiniranjem (4.1.5) i (4.1.6) dobivamo

$$W(T) = \binom{n}{3} + \binom{n}{2} - \tau(T) = \binom{n+1}{3} - \tau(T). \tag{4.1.7}$$

Ako postoji vrh v koji pripada putevima između svakog para vrhova iz skupa $\{u_1, u_2, u_3\}$, onda takav skup nije kolinearan. Za fiksan v takvih nekolinearnih podskupova ima ukupno

$$\sum_{1 \leq i < j < k \leq d_T(v)} |V(T_i)||V(T_j)||V(T_k)|$$

pa je

$$\tau(T) = \sum_{v \in V(T)} \sum_{1 \leq i < j < k \leq d_T(v)} |V(T_i)||V(T_j)||V(T_k)|.$$

Uvrštavanjem ove jednakosti u jednadžbu (4.1.7) dobivamo formulu iz iskaza teorema. □

Napomena 4.10. *Uočimo da prva sumacija u jednadžbi (4.1.4) zapravo ide po svim točkama grananja u T. Ako takvih točaka nema u stablu, onda je suma jednaka nuli pa ostaje samo prvi dio formule koji predstavlja Wienerov indeks puta duljine n.*

Primjer 4.11. *Stablo T prikazano na Slici 3 ima tri točke grananja v_3, v_4 i v_9. Kako je $d_T(v_3) = 3$, za vrh v_3 imamo samo jedan član u drugoj po redu sumi u Doyle-Graverovoj formuli. Vrhovi v_4 i v_9 su stupnja* 4 *pa će za svakog od njih biti $\binom{4}{3} = 4$ članova druge sume zbog četiri moguća izbora* 3 *podstabla od ukupno* 4*. Dobivamo*

$$W(T) = \binom{14}{3} - [\underbrace{2 \cdot 4 \cdot 6}_{v_3} + \underbrace{1 \cdot 1 \cdot 1 + 3 \times 1 \cdot 1 \cdot 9}_{v_4} + \underbrace{1 \cdot 1 \cdot 2 + 1 \cdot 1 \cdot 8 + 2 \times 1 \cdot 2 \cdot 8}_{v_9}] = 246.$$

Slijedi još nekoliko zanimljivih rezultata o Wienerovom indeksu [4].

Teorem 4.12. *Neka je T stablo s n vrhova. Tada*

$$W(T) = \sum_{S \ seg \ od \ T} n_1(S) n_{l_S+1}(S) l_S + \frac{1}{6} \sum_{S \ seg \ od \ T} l_S(l_S-1)(3n-2l_S+1), \tag{4.1.8}$$

gdje su $n_1(S)$ i $n_{l_S+1}(S)$ brojevi vrhova dviju komponenti povezanosti dobivenih brisanjem svih unutarnjih vrhova segmenta S i odgovarajućih bridova.

Dokaz. Da bismo dokazali teorem, koristit ćemo formulu (4.1.1) tako da ćemo ju zapisati pomoću segmenata. Neka je $S = (v_1, v_2, \ldots, v_{l_S}, v_{l_S+1})$ segment stabla T i $e_i = v_i v_{i+1}$, $i = 1, \ldots, l_S$. Vrijedi

$$\begin{aligned} n_{v_i}(e_i) &= n_1(S) + (i-1), \\ n_{v_{i+1}}(e_i) &= n_{l_S+1}(S) + (l_S - i). \end{aligned}$$

pa zbrajanjem ovih jednakosti dobivamo $n_1(S) + n_{l_S+1}(S) + l_S - 1 = n$. Tako je doprinos bridova od S u $W(T)$ jednak

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{l_S} n_{v_i}(e_i) n_{v_{i+1}}(e_i) &= \sum_{i=1}^{l_S} (n_1(S) + i - 1)(n_{l_S+1}(S) + l_S - i) \\ &= \sum_{i=1}^{l_S} [n_1(S) n_{l_S+1}(S) + (n_1(S) - 1) l_S - \\ &\quad - n_{l_S+1}(S) + (n_{l_S+1}(S) - n_1(S) + l_S + 1) i - i^2] \\ &= l_S n_1(S) n_{l_S+1}(S) + (n_1(S) - 1) l_S^2 - n_{l_S+1}(S) l_S + \\ &\quad + (n_{l_S+1}(S) - n_1(S) + l_S + 1) \frac{l_S(l_S+1)}{2} - \frac{l_S(l_S+1)(2l_S+1)}{6} \\ &= l_S n_1(S) n_{l_S+1}(S) + \frac{1}{2}(n_1(S) + n_{l_S+1}(S))(l_S^2 - l_S) + \frac{1}{2}(l_S+1) l_S^2 \\ &\quad + \frac{1}{2}(l_S+1) l_S - \frac{1}{6}(2l_S^2 + 3l_S + 1) l_S \\ &= l_S n_1(S) n_{l_S+1}(S) + \frac{1}{6} l_S (3n l_S - 3n - 2l_S^2 + 3l_S - 1). \end{aligned}$$

Sumiranje ovog po svim segmentima od T vodi do željene jednadžbe. □

Primjer 4.13. *Stablo T prikazano na Slici 3 ima 9 segmenata $S_1 = v_1 v_2 v_3$, $S_2 = v_3 v_4$, $S_3 = v_4 v_5$, $S_4 = v_4 v_6$, $S_5 = v_4 v_7$, $S_6 = v_3 v_8 v_9$, $S_7 = v_9 v_{10} v_{11}$, $S_8 = v_9 v_{12}$ i $S_9 = v_9 v_{13}$ sa duljinama $l_{S_i} = 2$, $i = 1, 6, 7$ i $l_{S_j} = 1$, $j = 2, 3, 4, 5, 8, 9$.*
Za $j = 3, 4, 5, 8, 9$ imamo $n_1(S_j) n_{l_{S_j}+1}(S_j) l_{S_j} = 12$, zatim $n_1(S_2) n_{l_{S_2}+1}(S_2) l_{S_2} = 36$, za $i = 1, 7$ vrijedi $n_1(S_i) n_{l_{S_i}+1}(S_i) l_{S_i} = 22$ i $n_1(S_6) n_{l_{S_6}+1}(S_6) l_{S_6} = 70$. Prema jednadžbi 4.1.8 dobivamo

$$W(T) = 5 \cdot 12 + 2 \cdot 22 + 36 + 70 + \frac{1}{6}[3 \cdot 2 \cdot (3 \cdot 13 - 3)] = 246.$$

Teorem 4.14. *Neka je T stablo s n vrhova. Wienerov indeks od T možemo računati na sljedeći način:*

$$W(T) = \frac{1}{12}\left[(3n^2+1)(n-1) - 3 \sum_{S \ seg \ od \ T} \frac{1}{l_S} [D_T(v_1) - D_T(v_{l_S+1})]^2 - \sum_{S \ seg \ od \ T} l_S^3\right]$$

gdje su v_1 i v_{l_S+1} rubni vrhovi od S.

Dokaz. Koristit ćemo jednadžbu (4.1.8) pa moramo vidjeti kako izgleda $n_1(S)n_{l_S+1}(S)$. Neka su $T_1(S)$ i $T_{l_S+1}(S)$ podstabla od T sa redom $n_1(S)$ i $n_{l_S+1}(S)$ vrhova dobivena brisanjem svih unutarnjih vrhova od S. Imamo

$$\begin{aligned} D_T(v_1) - D_T(v_{l_S+1}) &= \sum_{x \in T_1(S)} \big(d_T(v_1, x) - d_T(v_{l_S+1}, x)\big) + \sum_{y \in T_{l_S+1}(S)} \big(d_T(v_1, y) - d_T(v_{l_S+1}, y)\big) \\ &= \sum_{x \in T_1(S)} (-l_S) + \sum_{y \in T_{l_S+1}(S)} l_S \\ &= l_S[n_{l_S+1}(S) - n_1(S)]. \end{aligned}$$

Nadalje, znamo da je $n_1(S) + n_{l_S+1}(S) = n - l_S + 1$. Slijedi

$$\begin{aligned} n_1(S)n_{l_S+1}(S) &= \frac{1}{4}\big([n_1(S) + n_{l_S+1}(S)]^2 - [n_1(S) - n_{l_S+1}(S)]^2\big) \\ &= \frac{1}{4}\left[(n - l_S + 1)^2 - \frac{[D_T(v_1) - D_T(v_{l_S+1})]^2}{l_S^2}\right] \end{aligned}$$

Uvrštavanjem u jednadžbu (4.1.8) dobivamo

$$\begin{aligned} W(T) &= \frac{1}{4} \sum_{S \ seg \ od \ T} (n - l_S + 1)^2 l_S - \frac{1}{4} \sum_{S \ seg \ od \ T} \frac{1}{l_S}[D_T(v_1) - D_T(v_{l_S+1})]^2 \\ &\quad + \frac{1}{6} \sum_{S \ seg \ od \ T} l_S(l_S - 1)(3n - 2l_S + 1) \\ &= \frac{1}{12}\left[\sum_{S \ seg \ od \ T} (3n^2 + 1)l_S - \sum_{S \ seg \ od \ T} l_S^3 - 3 \sum_{S \ seg \ od \ T} \frac{1}{l_S}[D_T(v_1) - D_T(v_{l_S+1})]^2\right] \\ &= \frac{1}{12}\left[(3n^2 + 1)(n - 1) - 3 \sum_{S \ seg \ od \ T} \frac{1}{l_S}[D_T(v_1) - D_T(v_{l_S+1})]^2 - \sum_{S \ seg \ od \ T} l_S^3\right]. \end{aligned}$$

□

Primjer 4.15. *Kako znamo da vrijedi $d_T(v_1) - d_T(v_{l_S+1}) = (n_{l_S+1}(S) - n_1(S))l_S$, za stablo na Slici 3 uz primjenu prethodnog teorema dobivamo*

$$W(T) = \frac{1}{12}[(3 \cdot 13^2 + 1) \cdot 12 - 3 \cdot (5 \cdot 11^2 + 5^2 + 4 \cdot 10^2 + 2 \cdot 4) - (6 \cdot 1^3 + 3 \cdot 2^3)] = 246.$$

Sada ćemo iskazati Korolar 4.5 pomoću segmenata i zvjezdolikih stabala. Potrebna nam je sljedeća definicija:

Definicija 4.16. ***Zvjezdoliko stablo*** *$S(m_1, \ldots, m_k)$ je stablo koje sadrži jedinstven vrh v stupnja $k > 2$, a čije komponente povezanosti (putevi) nakon uklanjanja vrha v imaju $m_1, \ldots, m_k$ vrhova.*

Svakom vrhu v stabla T možemo pridružiti zvjezdoliko stablo tako da se ono sastoji od v i svih segmenata s početkom u v. Sa q_v ćemo označiti broj bridova takvog podstabla u T. Sjetimo se da je S^* segment S bez jednog, a S^0 segment bez oba rubna vrha. Nadalje sa $SP(T)$ definiramo skup svih rubnih vrhova segmenata u stablu T.

Lema 4.17. *Neka je $S = (v_1, v_2, \ldots, v_{l_S+1})$ segment stabla T s n vrhova. Tada vrijedi*

$$\sum_{i=2}^{l_S} D_T(v_i) = \frac{1}{2}(l_S - 1)[D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1})] - \frac{1}{6} l_S(l_S^2 - 1).$$

Dokaz. Neka su $T_1(S), T_{l_S+1}(S), n_1(S), n_{l_S+1}(S)$ definirani kao u dokazu Teorema 4.14 i neka je $i \in \{2, 3, \ldots, l_S\}$. Udaljenost vrha v_i jednaka je

$$\begin{aligned} D_T(v_i) &= \sum_{x \in V(T_1(S))} [d_T(v_i, v_1) + d_T(v_1, x)] + \sum_{y \in V(T_{l_S+1}(S))} [d_T(v_i, v_{l_S+1}) + d_T(v_{l_S+1}, y)] + D_{S^0}(v_i) \\ &= \sum_{x \in V(T_1(S))} d_T(v_1, x) + \sum_{y \in V(T_{l_S+1}(S))} d_T(v_{l_S+1}, y) + n_1(S)(i-1) \\ &\quad + n_{l_S+1}(S)(l_S - i + 1) + D_{S^0}(v_i). \end{aligned}$$

Za rubne vrhove od S imamo

$$\begin{aligned} D_T(v_1) &= \sum_{x \in V(T_1(S))} d_T(v_1, x) + \sum_{y \in V(T_{l_S+1}(S))} [d_T(v_1, v_{l_S+1}) + d_T(v_{l_S+1}, y)] + D_{S^*}(v_1) \\ &= \sum_{x \in V(T_1(S))} d_T(v_1, x) + \sum_{y \in V(T_{l_S+1}(S))} d_T(v_{l_S+1}, y) + n_{l_S+1}(S) l_S + \binom{l_S}{2} \end{aligned}$$

i analogno

$$D_T(v_{l_S+1}) = \sum_{x \in V(T_1(S))} d_T(v_1, x) + \sum_{y \in V(T_{l_S+1}(S))} d_T(v_{l_S+1}, y) + n_1(S) l_S + \binom{l_S}{2}.$$

Zbrajanjem dobivamo

$$D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1}) = 2 \sum_{x \in V(T_1(S))} d_T(v_1, x) + 2 \sum_{y \in V(T_{l_S+1}(S))} d_T(v_{l_S+1}, y) + [n_1(S) + n_{l_S+1}(S)] l_S + l_S(l_S - 1)$$

iz čega slijedi

$$\sum_{x \in V(T_1(S))} d_T(v_1, x) + \sum_{y \in V(T_{l_S+1}(S))} d_T(v_{l_S+1}, y) = \frac{1}{2}[D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1}) - l_S(l_S - 1) - [n_1(S) + n_{l_S+1}(S)] l_S].$$

Konačno

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^{l_S} D_T(v_i) &= \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{l_S} [D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1}) - l_S(l_S - 1) - [n_1(S) + n_{l_S+1}(S)] l_S] \\ &\quad + n_1(S) \sum_{i=2}^{l_S} (i - 1) + n_{l_S+1}(S) \sum_{i=2}^{l_S} (l_S - i + 1) + \sum_{i=2}^{l_S} D_{S^0}(v_i) \\ &= \frac{1}{2}(l_S - 1)[D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1})] - \frac{1}{2} l_S (l_S - 1)^2 + 2W(S^0) \\ &\quad - \frac{1}{2} l_S (l_S - 1)[n_1(S) + n_{l_S+1}(S)] + [n_1(S) + n_{l_S+1}(S)] \binom{l_S}{2} \\ &= \frac{1}{2}(l_S - 1)[D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1})] - \frac{1}{2} l_S (l_S - 1)^2 + 2\binom{l_S}{3} \\ &= \frac{1}{2}(l_S - 1)[D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1})] - \frac{1}{6} l_S (l_S - 1)(3l_S - 3 - 2l_S + 4) \\ &= \frac{1}{2}(l_S - 1)[D_T(v_1) + D_T(v_{l_S+1})] - \frac{1}{6} l_S (l_S^2 - 1). \end{aligned}$$

□

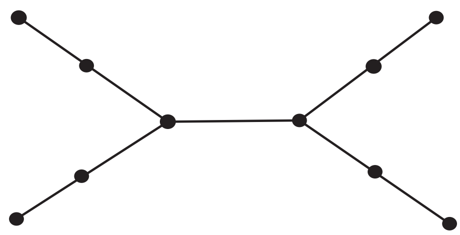
Teorem 4.18. *Neka je T stablo s n vrhova. Tada vrijedi*

$$W(T) = \frac{1}{12}\left[(3n+1)(n-1) + 3\sum_{v\in SP(T)} q_v D_T(v) - \sum_{S\ seg\ od\ T} l_S^3\right].$$

Dokaz. Kako vrh v može biti ili stupnja 2 (onda je unutarnji vrh nekog segmenta S) ili stupnja većeg od 2 (tada je rubni vrh od S) formulu iz Korolara 4.5 možemo zapisati na sljedeći način, uz primjenu Leme 4.17:

$$\begin{aligned}
W(T) &= \frac{1}{4}\left[n(n-1) + \sum_{v\in SP(T)} d_T(v)D_T(v) + \sum_{S\in T}\sum_{i=2}^{l_S} 2D_T(v_i)\right] \\
&= \frac{1}{4}\left[n(n-1) + \sum_{v\in SP(T)} d_T(v)D_T(v) + 2\sum_{S\in T}\left(\frac{1}{2}(l_S-1)[D_T(v_1)+D_T(v_{l_S+1})] - \frac{1}{6}l_S(l_S^2-1)\right)\right. \\
&= \frac{1}{12}\left[3n(n-1) + 3\sum_{v\in SP(T)} d_T(v)D_T(v) + 3\sum_{S\in T}(l_S-1)[D_T(v_1)+D_T(v_{l_S+1})]\right. \\
&\quad \left. - \sum_{S\in T} l_S^3 + \sum_{S\in T} l_S\right] \\
&= \frac{1}{12}\left[3n(n-1) + 3\sum_{v\in SP(T)} d_T(v)D_T(v) + 3\sum_{v\in SP(T)} (q_v - d_T(v))D_T(v) - \sum_{S\in T} l_S^3 + (n-1)\right] \\
&= \frac{1}{12}\left[(3n+1)(n-1) + 3\sum_{v\in SP(T)} q_v D_T(v) - \sum_{S\in T} l_S^3\right].
\end{aligned}$$

□



Slika 10

Primjer 4.19. *Promotrimo stablo T prikazano na Slici 10. Ono se sastoji od pet segmenata, a skup svih rubnih vrhova segmenata sadrži vrhove samo dvije 'vrste'. Prema Teoremu 4.18 dobivamo:*

$$W(T) = \frac{1}{12}[(3\cdot 10+1)\cdot 9 + 3\cdot(2\cdot 5\cdot 17 + 4\cdot 2\cdot 31) - (1 + 4\cdot 2^3)] = 125.$$

4.1.2 Spektar Laplaceove matrice i Wienerov indeks

Sada ćemo pokazati nimalo trivijalan način za računanje Wienerova indeksa: pomoću svojstvenih vrijednosti pridružene *Laplaceove matrice*. Osnovni rezultati o ovoj temi objavljeni su negdje oko 1990. godine. Vidi npr. [10]. Prije nego iskažemo i dokažemo glavni teorem u ovom odjeljku, navest ćemo definiciju Laplaceove matrice, navesti nekoliko njenih svojstava te iskazati i dokazati neke pomoćne tvrdnje.

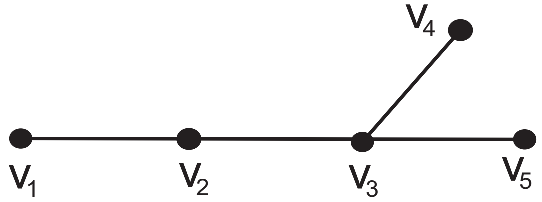
Definicija 4.20. *Neka je G graf sa skupom vrhova $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Laplaceova ili Kirchhoffova matrica $L(G)$ grafa G je kvadratna matrica reda n s elementima l_{ij} takvim da*

$$l_{ij} = \begin{cases} d(i), & i = j \\ -1 & v_i v_j \in E(G) \\ 0, & v_i v_j \notin E(G). \end{cases}$$

Vrijedi $L(G) = D(G) - A(G)$, pri čemu je $D(G)$ dijagonalna matrica reda n sa stupnjevima vrhova na dijagonali, a $A(G)$ je *matrica susjedstva*, tj. matrica koja na presjeku i-tog retka i j-tog stupca sadrži broj bridova koji spajaju vrhove v_i i v_j.
Laplaceova matrica je simetrična pozitivno semidefinitna matrica. Suma elemenata u proizvoljnom retku, odnosno stupcu jednaka je nuli iz čega proizlazi da je jedna svojstvena vrijednost te matrice jednaka nuli, a odgovarajući svojstveni vektor je $\mathbf{1}^\tau = (1, 1, \dots, 1)$. Korištenjem osnovnih svojstava determinanti može se pokazati da su svi kofaktori $cof(i, j)$ matrice $L(G)$ međusobno jednaki, a iznose

$$cof(i, j) = \frac{1}{n} \prod_{i=2}^{n} \lambda_i, \tag{4.1.9}$$

pri čemu $\lambda_i \neq 0\ \forall i = 2, \dots, n$.



Slika 11

Primjer 4.21. *Neka je T stablo prikazano na Slici 11. Laplaceova matrica stabla T je*

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

Od izuzetne je važnosti takozvani *Matrični teorem o stablima* ili *Kirchhoffov teorem* nazvan prema Gustavu Kirchhoffu koji ga spominje 1847.godine.

Teorem 4.22 (Matrični teorem o stablima)**.** *Neka je G proizvoljan graf bez petlji. Broj razapinjujućih stabala grafa G jednak je proizvoljnom kofaktoru matrice $L(G)$.*

Za dokaz teorema vidi [9].

Definicija 4.23. *Neka je G prozvoljan graf sa skupom vrhova $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ i skupom bridova $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$. Matrica incidencije $M(G)$ grafa G je $n \times m$ matrica sa elementima m_{ij}, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$, koji broje koliko puta je vrh v_i incidentan s bridom e_j.*

Lema 4.24. *Neka je G graf sa skupom vrhova $V(G) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ i orijentiranim skupom bridova $E(G) = \{e_1, e_2, \ldots, e_m\}$ te neka je $Q(G) = (q_{ij})$ orijentirana matrica incidencije definirana na sljedeći način:*

$$q_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{, ako je } v_i \text{ početak brida } e_j \\ -1 & \text{, ako je } v_i \text{ kraj brida } e_j \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

Tada je $L(G) = QQ^\tau$.

Dokaz. Neka je $R = (r_{ij}) = QQ^\tau$ matrica na desnoj strani. Tada $r_{ij} = \sum_{k=1}^{m} q_{ik}q_{jk}$.
Slučaj $i \neq j$: Umnožak $q_{ik}q_{jk}$ nije 0 ako su i v_i i v_j krajevi od e_k. Zbog usmjerenosti od G dobivamo $q_{ik}q_{jk} = -1$ stoga je $r_{ij} = -1$.
Slučaj $i = j$: Ovdje dobivamo $r_{ii} = \sum_{k=1}^{m} q_{ik}^2$ uz $q_{ik}^2 = 1$ ako je v_i incidentan s e_k, a $q_{ik}^2 = 0$ inače. U tom slučaju je $r_{ii} = d_G(v_i)$. □

Napomena 4.25. *Iz dokaza Leme 4.24 posve je jasno da Laplaceova matrica $L(G)$ ne ovisi o načinu na koji smo orijentirali bridove u stablu.*

Za razliku od $QQ^\tau (= L(G))$, matrica $K(G) = Q^\tau Q$ ovisi o orijentaciji bridova. Zbog singularne dekompozicije matrice Q vrijedi da se sve svojstvene vrijednosti koje nisu nula matrica $K(G)$ i $L(G)$ podudaraju.
Svojstvene vrijednosti od $L(G)$ ćemo označiti sa $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n = 0$.

Napomena 4.26. *Vrijedi da je $\lambda_{n-1} > 0$ ako i samo ako je G povezan. Prema Teoremu 4.22 zaključujemo da je kofaktor Laplaceove matrice jednak nuli za nepovezane grafove. To je jasno jer nepovezan graf ne može sadržavati razapinjujuće stablo. Također je jasno da ako promatramo Laplaceovu matricu nekog stabla, onda su nužno svi njeni kofaktori jednaki 1 jer je broj razapinjujućih stabala grafa koji je stablo jednak 1.*

Lema 4.27. *Neka je T stablo s n vrhova. Tada je*

$$\det(K(T)) = n.$$

Dokaz. Kako smo ranije i zaključili, svaka svojstvena vrijednost od $L(T) = QQ^\tau$ koja nije nula ujedno je i svojstvena vrijednost od matrice $K(T) = Q^\tau Q$. Jer je matrica $K(T)$ dimenzije $(n-1) \times (n-1)$ slijedi

$$\det(K(T)) = \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i.$$

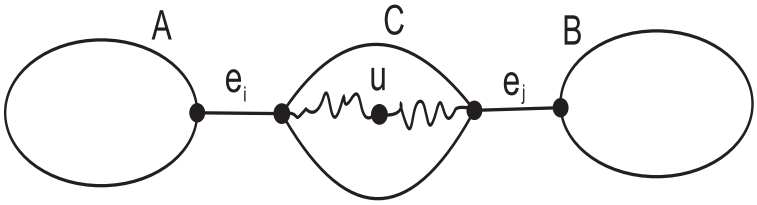
Iz formule (4.1.9) slijedi

$$\prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i = n \cdot cof(i, j),$$

pri čemu je $cof(i, j)$ (i, j)-ti kofaktor od $L(T)$. No, znamo da vrijedi $cof(i, j) = 1$ za proizvoljne $i, j \in \{1, \ldots, n\}$ pa dobivamo

$$\det(K(T)) = n.$$

□



Slika 12

Neka je T stablo i neka su e_i i e_j dva njegova brida. Nadalje, neka je T' šuma s tri komponente povezanosti A, B i C pri čemu put u T od proizvoljnog vrha u A do proizvoljnog vrha u B sadrži e_i i e_j (vidi Sliku 12). Definiramo $n(e_i, e_j) := |A||B|$ i $n(e_i) := n_u(e_i)n_v(e_i)$ za $e_i = uv$. Za vrh u iz C kažemo da je između bridova e_i i e_j ako svaki put od vrha u A do vrha u B prolazi kroz u. Broj vrhova između e_i i e_j označavamo sa s_{ij}.

Lema 4.28. *Neka je T stablo s n vrhova pri čemu su mu bridovi orijentirani tako da je $K(T)$ nenegativna matrica. Neka je $X = (x_{ij})$ adjunkta od $K(T)$. Tada*

$$x_{ij} = \begin{cases} n(e_i), & \textit{ako je } i = j, \\ (-1)^{s_{ij}} n(e_i, e_j), & \textit{inače.} \end{cases}$$

Za dokaz leme vidi [10].
Sada imamo sve što nam je potrebno za dokazivanje sljedeće tvrdnje:

Teorem 4.29. *Neka je T stablo s n vrhova i neka su $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_{n-1} \geq \lambda_n = 0$ svojstvene vrijednosti odgovarajuće Laplaceove matrice. Tada je Wienerov indeks moguće izračunati pomoću sljedeće formule:*

$$W(T) = n \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\lambda_i}.$$

Dokaz. Orijentiramo bridove u T tako da $K(T)$ bude nenegativna matrica. Prema Lemi 4.28 trag adjunkte X od $K(T)$ jednak je

$$tr(X) = \sum_{i=1}^{n-1} x_{ii} = \sum_{e \in E(T)} n(e).$$

Kako je pokazano u Teoremu 4.1, zadnja suma je jednaka Wienerovom indeksu od T. Za sve λ_i, $i = 1, \ldots, n-1$, vrijedi da je $n\frac{1}{\lambda_i}$ svojstvena vrijednost od $X = nK^{-1}(T)$ [1]. Trag matrice možemo računati na osnovu poznavanja njenih svojstvenih vrijednosti, stoga je

$$tr(X) = \sum_{i=1}^{n-1} n \frac{1}{\lambda_i},$$

što dokazuje teorem. □

[1]Za svaku invertibilnu matricu A vrijedi $adj(A) = det(A) \cdot A^{-1}$

Primjer 4.30. *Neka je T stablo sa Slike 11. Sve svojstvene vrijednosti od $L(T)$ različite od nule su približno*

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 4.170086486626033, \\ \lambda_2 &= 2.311107817465982, \\ \lambda_3 &= 1, \\ \lambda_4 &= 0.518805695907984. \end{aligned}$$

Prema prethodnom teoremu dobivamo $W(T) = 5\sum_{i=1}^{4} \frac{1}{\lambda_i} = 18.$

4.2 Rekurzivne formule

U prethodnom odjeljku smo se bavili raznim direktnim formulama za računanje Wienerova indeksa. U nekim slučajevima je ipak jednostavnije računati Wienerove indekse specijalnih podstabala zadanog stabla pa na osnovu toga računati Wienerov indeks cijelog stabla. Ova metoda je pogodna npr. kod stabla koje je dobiveno povezivanjem nekoliko kopija stabla $T^{'}$ sa vrhom u. Pritom sa vrhom u spajamo uvijek isti vrh $v^{'} \in V(T^{'})$. U nastavku rada bavit ćemo se sa rekurzivnim formulama za računanje Wienerova indeksa.

Najprije ćemo proučiti vezu između Wienerovog indeksa stabla T i Wienerovog indeksa njegovog podstabla dobivenog brisanjem jednog proizvoljnog lista.

Teorem 4.31. *Neka je T stablo s $n \geq 2$ vrhova i neka je $v \in V(T)$ list. Ako je $\{u, v\} \in E(T)$ i $T^{'} = T - v$ podstablo od T dobiveno uklanjanjem vrha v, onda je*

$$W(T) = W(T^{'}) + D_{T^{'}}(u) + n - 1.$$

Dokaz. Neka su x i y dva vrha u T. Ako je $v \neq x$ i $v \neq y$, onda se udaljenost između x i y ne mijenja nakon uklanjanja vrha v. Stoga je suma svih udaljenosti među takvim vrhovima Wienerov indeks od $T^{'}$. Ako je jedan od vrhova x, y jednak v, npr. $x = v$, tada je $d_T(x, y) = d_{T^{'}}(u, y) + 1$. Suma udaljenosti između vrha x i $n - 1$ preostalih vrhova u T jednaka je $D_{T^{'}}(u) + n - 1$ pa je time dokaz završen. □

Primjer 4.32. *Promotrimo stablo T s n vrhova dobivenog tako da proizvoljan list u zvijezde S_{n-1} spojimo bridom sa novim vrhom v. Prema Teoremu 4.31 lako je izračunati Wienerov indeks od T:*

$$\begin{aligned} W(T) &= W(S_{n-1}) + D_{S_{n-1}}(u) + n - 1 \\ &= (n-2)^2 + 1 + 2 \cdot (n-3) + n - 1 \\ &= n^2 - n - 2. \end{aligned}$$

Valja uočiti da je u prethodnom teoremu pretpostavka da je T stablo upotrijebljena samo za računanje sume udaljenosti vrha $v = x$ do svih ostalih vrhova. Stoga tvrdnju teorema možemo lako preoblikovati u tvrdnju koja će vrijediti za proizvoljan povezan graf u kojem postoji vrh stupnja jedan.

Teorem 4.33. *Neka je G povezan graf i $v \in V(G)$ list. Ako je $\{u, v\} \in E(G)$ i $G^{'} = G - v$ podgraf od G dobiven uklanjanjem vrha v, tada*

$$W(G) = W(G^{'}) + D_{G^{'}}(u) + |V(G^{'})|.$$

Generalizacija Teorema 4.33 tako da uklanjamo proizvoljan vrh, a ne nužno list, dana je u [2].

Teorem 4.34. *Neka je T stablo s $n \geq 2$ vrhova zadano kao na Slici 8. Tada vrijedi*

$$W(T) = \sum_{i=1}^{m} [W(T_i) + (n - |V(T_i)|)D_{T_i}(u_i) - |V(T_i)|^2] + n(n-1).$$

Dokaz. Za računanje udaljenosti $d_T(x, y)$ između vrhova x i y pri čemu je $x \in T_i$ unaprijed odabran vrh, moramo uzeti u obzir dva slučaja: $y \in T_i$ i $y \notin T_i$. Ako je $y \in T_i$, imamo $d_T(x, y) = d_{T_i}(x, y)$ pa je suma udaljenosti za sve takve parove jednaka $W(T_i)$.
Ako je $y \in T_j, i \neq j$, onda

$$d_T(x, y) = d_{T_i}(x, u_i) + d_T(u_i, v) + d_T(v, u_j) + d_{T_j}(u_j, y).$$

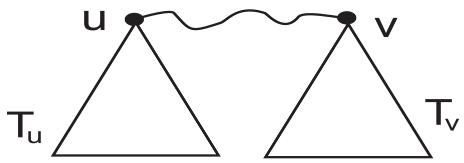
Dobivamo

$$\begin{aligned}
W(T) &= \sum_{i=1}^{m} \left[W(T_i) + \frac{1}{2} \sum_{x \in T_i} \sum_{\substack{y \in T_j \\ j \neq i}} \big(d_{T_i}(x, u_i) + d_T(u_i, v) + d_T(v, u_j) + d_{T_j}(u_j, y) \big) \right] \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left[W(T_i) + \sum_{x \in T_i} \sum_{\substack{y \in T_j \\ j \neq i}} \big(d_{T_i}(x, u_i) + d_T(u_i, v) \big) \right] \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left[W(T_i) + \sum_{x \in T_i} \big(d_{T_i}(x, u_i) + d_T(u_i, v) \big) \big(n - |V(T_i)| \big) \right] \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left[W(T_i) + \big(n - |V(T_i)| \big) \big(D_{T_i}(u_i) + |V(T_i)| \big) \right] \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left[W(T_i) + \big(n - |V(T_i)| \big) D_{T_i}(u_i) - |V(T_i)|^2 \right] + n \sum_{i=1}^{m} |V(T_i)| \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left[W(T_i) + \big(n - |V(T_i)| \big) D_{T_i}(u_i) - |V(T_i)|^2 \right] + n(n-1).
\end{aligned}$$

□

Primjer 4.35. *Neka je T stablo s n vrhova koje se sastoji od puta P_{l+1} i $n - l - 1$ vrhova spojenih bridom sa jednim od njegovih listova koji ćemo označiti s v. Za računanje $W(T)$ koristit ćemo Teorem 4.34 tako da će podstabla od T biti uzeta obzirom na vrh v, tj. imat ćemo $n - l - 1$ podstabala koja se sastoje od samo jednog vrha i jednog podstabla koje je put P_l. Dobivamo*

$$\begin{aligned}
W(T) &= \sum_{i=1}^{n-l-1} [0 + (n-1) \cdot 0 - 1^2] + \binom{l+1}{3} + (n-l)\binom{l}{2} - l^2 + n(n-1) \\
&= \binom{l+1}{3} + (n-l)\binom{l}{2} - (n-1-l) - l^2 + n(n-1) \\
&= \binom{l}{3} + (n-l-1)\binom{l}{2} + (n-1)^2.
\end{aligned}$$



Slika 13

U [5] predstavljena je formula za Wienerov indeks stabla nastalog spajanjem dvaju stabala putem određene duljine:

Teorem 4.36. *Neka su T_u i T_v dva stabla pri čemu $n_u = |V(T_u)|$ i $n_v = |V(T_v)|$. Neka su $u \in V(T_u)$ i $v \in V(T_v)$ dva vrha. Ako je stablo T nastalo iz T_u i T_v spajanjem vrhova u i v putem sa k novih vrhova (vidi Sliku 13), tada vrijedi*

$$\begin{aligned} W(T) &= W(T_u) + W(T_v) + (n_u + k)D_{T_v}(v) + (n_v + k)D_{T_u}(u) + (k+1)n_u n_v \\ &\quad + \frac{1}{2}(k^2 + k)(n_u + n_v) + \frac{1}{6}(k^3 - k). \end{aligned}$$

Dokaz. Neka su x i y dva vrha iz T. Razlikujemo sljedeće slučajeve:
1. slučaj: $x, y \in V(T_i), i = u, v$. Očito je da $d_T(x, y) = d_{T_i}(x, y)$.
2. slučaj: $x \in V(T_u), y \in V(T_v)$, tada je $d_T(x, y) = d_{T_u}(x, u) + \underbrace{d_T(u, v)}_{=k+1} + d_{T_v}(v, y)$.
3. slučaj: x, y su novi vrhovi. Suma udaljenosti među svim takvim vrhovima je Wienerov indeks puta duljine $k - 1$.
4. slučaj: $x \in V(T_i), i = u, v$ i y je jedan od novih vrhova. Vrijedi

$$d_T(x, y) = d_{T_i}(x, i) + d_T(i, y).$$

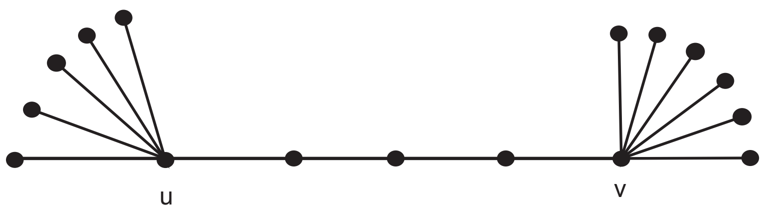
Dobivamo

$$\begin{aligned} W(T) &= \sum_{\{x,y\}\subseteq V(T_u)} d_{T_u}(x, y) + \sum_{\{x,y\}\subseteq V(T_v)} d_{T_v}(x, y) \\ &\quad + \sum_{x\in V(T_u)} \sum_{y\in V(T_v)} (d_{T_u}(x, u) + k + 1 + d_{T_v}(v, y)) + \binom{k+1}{3} \\ &\quad + \sum_{y \text{ novi vrh}} \left(\sum_{x\in V(T_u)} (d_{T_u}(x, u) + d_T(u, y)) + \sum_{x\in V(T_v)} (d_{T_v}(x, v) + d_T(v, y)) \right) \\ &= W(T_u) + W(T_v) + (n_u + k)D_{T_v}(v) + (n_v + k)D_{T_u}(u) + (k+1)n_u n_v \\ &\quad + \frac{1}{2}(k^2 + k)(n_u + n_v) + \frac{1}{6}(k^3 - k), \end{aligned}$$

što dokazuje teorem. □

Primjer 4.37. *Neka je T stablo nastalo od S_6 i S_7 povezivanjem njihovih središnjih vrhova u iz S_6 i v iz S_7 putem sa 3 vrha. Vidi Sliku 14. Vrijedi $D_{S_6}(u) = 5$ i $D_{S_7}(v) = 6$. Znamo da vrijedi $W(S_l) = (l - 1)^2$. Dobivamo*

$$\begin{aligned} W(T) &= 5^2 + 6^2 + (6 + 3) \cdot 6 + (7 + 3) \cdot 5 + 4 \cdot 6 \cdot 7 \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot (3^2 + 3)(6 + 7) + \frac{1}{6} \cdot (3^3 - 3) = 415. \end{aligned}$$



Slika 14

Napomena 4.38. *Kako nigdje u dokazu Teorema 4.36 nije korištena pretpostavka da su T_u i T_v stabla, jasno je da formula ostaje ista i za proizvoljne grafove T_u i T_v.*

Korolar 4.39. *Ako u Teoremu 4.36 pretpostavimo da su vrhovi stabala T_u i T_v spojeni bridom, tj. $k = 0$, onda vrijedi*

$$W(T) = W(T_u) + W(T_v) + n_u D_{T_v}(v) + n_v D_{T_u}(u) + n_u n_v.$$

□

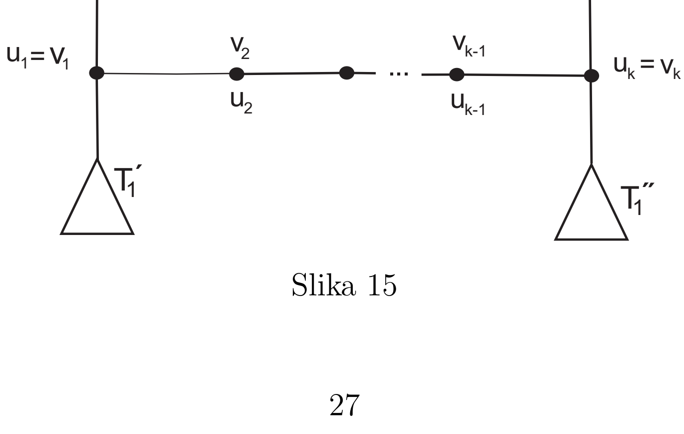
U istom radu [5] dana je formula za Wienerov indeks stabla nastalog od neka dva stabla povezana na nešto drugačiji način:

Teorem 4.40. *Neka su T_1 i T_2 dva stabla, pri čemu $n_1 = |V(T_1)|$ i $n_2 = |V(T_2)|$. Neka je $P_1 = (u_1, u_2, \ldots, u_k)$ put u T_1 i $P_2 = (v_1, v_2, \ldots, v_k)$ put u T_2 pri čemu su svi vrhovi puta P_1 stupnja 2 u T_1 i svi vrhovi puta P_2 su stupnja 2 u T_2. Wienerov indeks stabla T nastalog identificiranjem vrhova u_i i v_i, $i = 1, \ldots, k$, možemo računati na sljedeći način:*

$$\begin{aligned} W(T) \;&=\; W(T_1) + W(T_2) + (n_1 - k)D_{T_2}(v_1) + (n_2 - k)D_{T_1}(u_1) \\ &+2 \cdot (k-1)[n_{u_k}(P_1) + n_{v_k}(P_2) - n_{u_k}(P_1)n_{v_k}(P_2)] \\ &-\frac{1}{2}k(k-1)(n_1 + n_2) + \frac{1}{6}(k-1)(5k^2 - k - 12). \end{aligned}$$

Broj $n_{u_k}(P_1)$ predstavlja broj vrhova u komponenti povezanosti od T_1 koja sadrži u_k nakon brisanja brida $u_{k-1}u_k$ sa puta P_1. Analogno se definira $n_{v_k}(P_2)$.

Dokaz. Neka su $T_1^{'}, T_1^{''}, T_2^{'}$ i $T_2^{''}$ definirani kao na Slici 15. Tada $|V(T_1^{''})| = n_{u_k}(P_1) - 1, |V(T_2^{''})| = n_{v_k}(P_2) - 1$ i time trivijalno dobivamo $|V(T_1^{'})| = n_1 - n_{u_k}(P_1) - k + 1, |V(T_2^{'})| = n_2 - n_{v_k}(P_2) - k + 1$.



Slika 15

Za računanje Wienerovog indeksa od T opet ćemo razlikovati nekoliko tipova parova vrhova. Sve udaljenosti između vrhova u T_1 su jednake i nakon spajanja sa T_2 pa je iz tog razloga njihov doprinos Wienerovom indeksu jednak $W(T_1)$. Pod istim uvjetima je doprinos parova vrhova iz T_2 jednak $W(T_2)$. Kako su svi vrhovi u P_1 i P_2 identični u T, moramo oduzeti njihove međusobne udaljenosti (brojali smo ih jednom u $W(T_1)$ i jednom u $W(T_2)$), što je ukupno $\binom{k+1}{3}$.

Dalje računamo udaljenosti unutar T između vrhova u T_1' i vrhova u $T_2 - P_2$. Svaki vrh u T_1' doprinosi Wienerovom indeksu za $D_{T_2}(v_1) - \binom{k}{2}$ (moramo oduzeti udaljenosti do vrhova puta P_2 jer smo to već računali). Na isti način dobivamo $D_{T_1}(u_1) - \binom{k}{2}$ za udaljenosti unutar T između vrhova iz T_2' i svih vrhova u $T_1 - P_1$.

Udaljenosti unutar T između vrhova iz T_1'' i svih vrhova iz $T_2 - P_2$ doprinose s

$$D_{T_2}(v_1) - \binom{k}{2} - (k-1)(n_{v_k}(P_2) - 1).$$

Treći izraz se javlja zbog toga što je za sve vrhove iz T_2'' put između v_1 i v_k uračunat u $D_{T_2}(v_1)$. Analogno dobivamo

$$D_{T_1}(u_1) - \binom{k}{2} - (k-1)(n_{u_k}(P_1) - 1)$$

za udaljenosti unutar T između vrhova iz T_2'' i svih vrhova u $T_1 - P_1$.

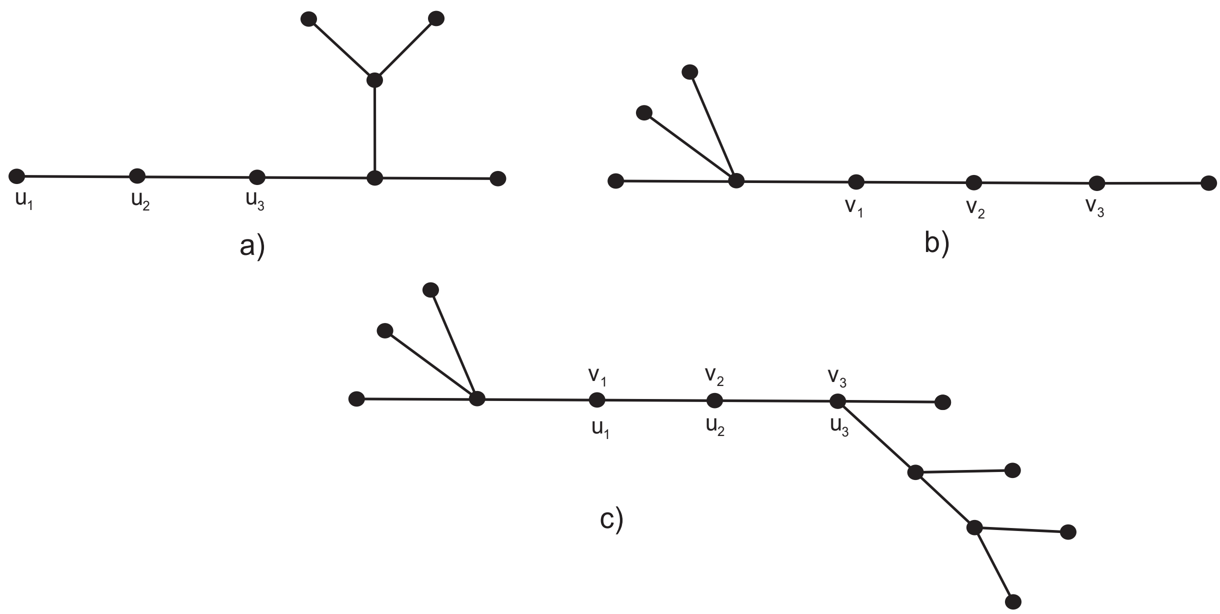
Kombiniranjem svih slučajeva dobivamo

$$\begin{aligned}
W(T) &= W(T_1) + W(T_2) - \binom{k+1}{3} + (n_1 - n_{u_k}(P_1) - k + 1)\left(D_{T_2}(v_1) - \binom{k}{2}\right) \\
&\quad + (n_2 - n_{v_k}(P_2) - k + 1)\left(D_{T_1}(u_1) - \binom{k}{2}\right) \\
&\quad + (n_{u_k}(P_1) - 1)\left(D_{T_2}(v_1) - \binom{k}{2} - (k-1)(n_{v_k}(P_2) - 1)\right) \\
&\quad + (n_{v_k}(P_2) - 1)\left(D_{T_1}(u_1) - \binom{k}{2} - (k-1)(n_{u_k}(P_1) - 1)\right) \\
&= W(T_1) + W(T_2) - \frac{1}{6}(k-1)(k^2+k) + (n_1 - k)D_{T_2}(v_1) + (n_2 - k)D_{T_1}(u_1) \\
&\quad - \frac{1}{2}k(k-1)(n_1 + n_2 - 2k) - 2(k-1)(n_{u_k}(P_1) - 1)(n_{v_k}(P_2) - 1) \\
&= W(T_1) + W(T_2) + (n_1 - k)D_{T_2}(v_1) + (n_2 - k)D_{T_1}(u_1) \\
&\quad + 2(k-1)[n_{u_k}(P_1) + n_{v_k}(P_2) - n_{u_k}(P_1)n_{v_k}(P_2)] \\
&\quad - \frac{1}{2}k(k-1)(n_1 + n_2) + \frac{1}{6}(k-1)\underbrace{(-k^2 - k + 6k^2 - 12)}_{=5k^2-k-12},
\end{aligned}$$

pa je dokaz teorema gotov. □

Primjer 4.41. *Neka su T, T_1 i T_2 stabla prikazana na Slici 16.*
Stavimo $P_1 = (u_1, u_2, u_3)$ i $P_2 = (v_1, v_2, v_3)$. Imamo $n_1 = 8, n_2 = 8, k = 3, D_{T_1}(u_1) = 24$, $D_{T_2}(v_1) = 13, n_{u_3}(P_1) = 6$ i $n_{v_3}(P_2) = 2$. Lako računamo $W(T_1) = 64$ i $W(T_2) = 71$ koristeći tzv. Doyle-Graverovu formulu. Prema prethodnom teoremu dobivamo

$$W(T) = 70 + 71 + (8-3)\cdot 13 + (8-3)\cdot 24 + 2\cdot 2\cdot(6+2-12) - \frac{1}{2}\cdot 3\cdot 2\cdot(8+8) + \frac{1}{6}\cdot 2\cdot(45-3-12) = 272.$$

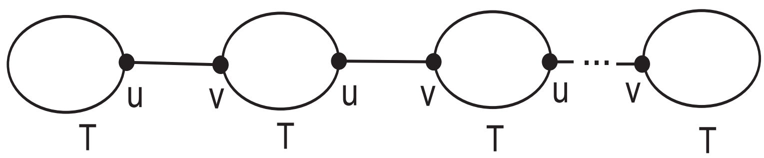


Slika 16: a) Stablo T_1, b) stablo T_2 i c) stablo T dobiveno identificiranjem vrhova u_i i v_i, $i = 1, 2, 3$.

Korolar 4.42. *Neka su T_1 i T_2 stabla redom s n_1 i n_2 vrhova te neka vrijedi $u \in V(T_1)$ i $v \in V(T_2)$. Ako je stablo T nastalo od T_1 i T_2 identificiranjem vrhova u i v, onda vrijedi*

$$W(T) = W(T_1) + W(T_2) + (n_1 - 1)D_{T_2}(v_1) + (n_2 - 1)D_{T_1}(u_1).$$

Dokaz. Ovu formulu dobivamo direktno iz Teorema 4.40 za $k = 1$. □



Slika 17

U prethodnih nekoliko teorema iskazali smo formule za računanje Wienerovog indeksa stabla dobivenog iz neka dva unaprijed zadana stabla. U sljedećem teoremu, koji se može naći u [11], promotrit ćemo stablo F dobiveno povezivanjem kopija istog stabla T u lanac tako da je vrh u iz jedne kopije stabla T spojen bridom sa vrhom v sljedeće kopije od T. Primjer tzv. *lančanog stabla* F je prikazan na Slici 17.

Teorem 4.43. *Neka je F lančano stablo dobiveno od m kopija stabla T s $n = |V(T)|$ vrhova, $m, n \geq 1$ te neka su $u, v \in V(T)$ vrhovi pomoću kojih su povezane kopije od T. Tada vrijedi*

$$W(F) = mW(T) + \frac{1}{2}nm(m-1)[D_T(u) + D_T(v)] + \frac{1}{6}n^2m(m-1)[(m-2)d_T(u,v) + m + 1].$$

Dokaz. Dvije su vrste parova vrhova u stablu F, oni kod kojih se oba vrha nalaze u istoj kopiji od T i oni kod kojih jedan vrh leži u jednoj kopiji, a drugi u nekoj drugoj kopiji od

T. Ako se par vrhova nalazi u istoj kopiji od T, onda je ukupan doprinos takvih parova Wienerovom indeksu jednak $mW(T)$.
Označimo kopije stabla T redom slijeva na desno s T_1, T_2, …, T_m.
Neka je x vrh iz T_i, a y iz T_{i+j}. Udaljenost između x i y je

$$d_F(x,y) = d_T(x,u) + j + (j-1)d_T(v,u) + d_T(v,y),$$

gdje drugi izraz na desnoj strani jednakosti predstavlja broj bridova koji povezuju sve kopije od T na putu od T_i do T_{i+j}. Treći izraz opisuje broj bridova kroz koje se mora proći unutar preostalih $j-1$ kopija od T na putu od x do y.

Zajedno dobivamo

$$\begin{aligned}
W(T) &= mW(T) + \sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=1}^{m-i}\sum_{x\in V(T_i)}\sum_{y\in V(T_{i+j})}[d_T(x,u) + j + (j-1)d_T(v,u) + d_T(v,y)] \\
&= mW(T) + n\sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=1}^{m-i}[D_T(u) + D_T(v)] + n^2\sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=1}^{m-i} j \\
&\quad + n^2\sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=1}^{m-i}(j-1)d_T(u,v) \\
&= mW(T) + n[D_T(u) + D_T(v)]\sum_{i=1}^{m-1}(m-i) + n^2\sum_{i=1}^{m-1}\frac{(m-i+1)(m-i)}{2} \\
&\quad + n^2 d_T(u,v)\sum_{i=1}^{m-1}\frac{(m-i)(m-i-1)}{2} \\
&= mW(T) + n\frac{m(m-1)}{2}[D_T(u) + D_T(v)] + n^2\sum_{i=1}^{m-1}\binom{i+1}{2} \\
&\quad + n^2 d_T(u,v)\sum_{i=1}^{m-2}\binom{i+1}{2} \\
&= mW(T) + \frac{1}{2}nm(m-1)[D_T(u) + D_T(v)] + n^2\binom{m+1}{3} + n^2 d_T(u,v)\binom{m}{3} \\
&= mW(T) + \frac{1}{2}nm(m-1)[D_T(u) + D_T(v)] + \frac{1}{6}n^2 m(m-1)[(m-2)d_T(u,v) + m + 1].
\end{aligned}$$

□

Napomena 4.44. *U dokazu Teorema 4.43 ne koristimo pretpostavku da je T stablo. Stoga tvrdnja teorema vrijedi i za proizvoljan povezan graf.*

Primjer 4.45. *Kako bismo ilustrirali prethodni teorem, promotrimo lančano stablo $F_{n,m}$ dobiveno spajanjem m kopija zvijezde S_n pri čemu je u središnji vrh i $u = v$. Dobivamo*

$$\begin{aligned}
W(F_{n,m}) &= m(n-1)^2 + \frac{1}{2}nm(m-1)2(n-1) + \frac{1}{6}n^2 m(m-1)(m+1) \\
&= m[(n-1)(nm-1) + \frac{1}{6}n^2(m^2-1)].
\end{aligned}$$

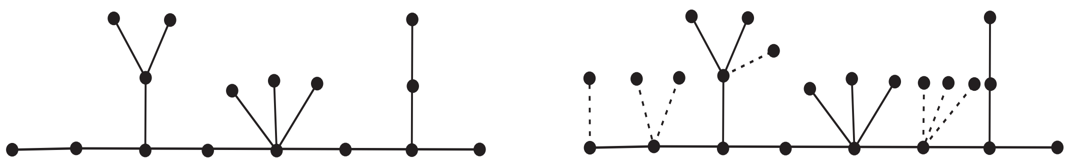
4.2.1 Wienerov indeks trnovitog stabla

Potpuno drugačiji koncept računanja Wienerovog indeksa stabla T_1 pomoću Wienerova indeksa manjeg stabla T_2 je dodavanjem nekoliko novih listova stablu T_2. Bavit ćemo se sa posebnom vrstom stabala koje ćemo zvati *trnovita stabla.* Slijedi definicija:

Definicija 4.46. *Neka je T stablo s n vrhova. Stablo T^* zovemo* ***trnovito stablo*** *od T ako je T^* nastalo od T spajanjem novih n_i vrhova sa vrhom $v_i \in V(T)$, $n_i \geq 0$, $i = 1, 2, \ldots, n$.*

Napomena 4.47.

- *Broj vrhova od T^* jednak je $n^* = n + \sum_{i=1}^{n} n_i$ te vrijedi $D_{T^*}(v_i) = D_T(v_i) + n_i$.*
- *Konstrukcija trnovitog stabla iz nekog stabla nije jedinstvena, kao što nije jedinstveno niti stablo dobiveno od trnovitog stabla uklanjanjem određenog broja listova.*



Slika 18

Primjer 4.48. *Primjer stabla T i nekog njegovog trnovitog stabla T^* prikazani su na Slici 18. Iscrtkani bridovi predstavljaju nove bridove u T^*. Kao što možemo vidjeti, ne moraju svi vrhovi od T biti povezani sa novim vrhom.*

Ivan Gutman je 1998. godine [8] izveo formulu za računanje Wienerovog indeksa trnovitog stabla T^* koristeći Wienerov indeks pripadajućeg stabla T:

Teorem 4.49. *Neka je T stablo s n vrhova i T^* pripadno trnovito stablo. Tada vrijedi*

$$\begin{aligned} W(T^*) &= W(T) + \sum_{1\leq i<j\leq n}(n_i+n_j)d_T(v_i,v_j) + \sum_{1\leq i<j\leq n} n_i n_j d_T(v_i,v_j) \\ &\quad + \left(\sum_{i=1}^{n} n_i\right)^2 + (n-1)\sum_{i=1}^{n} n_i \\ &= \sum_{1\leq i<j\leq n}(n_i+1)(n_j+1)d_T(v_i,v_j) + \left(\sum_{i=1}^{n} n_i\right)^2 + (n-1)\sum_{i=1}^{n} n_i \end{aligned}$$

pri čemu je n_i broj novih vrhova povezanih bridom sa v_i.

Dokaz. Neka je $V(T) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Za svaki par vrhova $x, y \in V(T^*)$ razlikujemo četiri slučaja:
1. slučaj: $x \in V(T)$ i $y \in V(T)$. Vrijedi $d_{T^*}(x,y) = d_T(x,y)$ pa je doprinos svih takvih parova Wienerovom indeksu od T^* jednak $W(T)$.
2. slučaj: $x \in V(T)$, npr. $x = v_j$, i $y \in V(T^*) \setminus V(T)$ pri čemu je y spojen s vrhom v_i. Tada za svih n_i parova $\{x,y\}$ dobivamo $d_{T^*}(x,y) = d_T(x,v_i) + 1$.
3. slučaj: $x, y \in V(T^*) \setminus V(T)$ gdje je x spojen sa vrhom v_i, a y sa vrhom v_j, $i \neq j$. Tada je $d_{T^*}(x,y) = d_T(v_i,v_j) + 2$ te imamo točno $n_i n_j$ parova $\{x,y\}$.

4. slučaj: $x, y \in V(T^*) \setminus V(T)$ gdje su oba vrha spojena sa vrhom v_i. Tada je $d_{T^*}(x, y) = 2$ i broj takvih parova jednak je $\binom{n_i}{2}$. Dobivamo

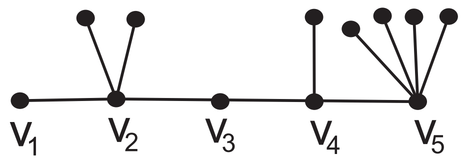
$$\begin{aligned}
W(T^*) &= W(T) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} n_i(d_T(v_i, v_j) + 1) + \sum_{1\leq i<j\leq n} n_i n_j (d_T(v_i, v_j) + 2) + \sum_{i=1}^{n} 2\binom{n_i}{2} \\
&= W(T) + \sum_{1\leq i<j\leq n} (n_i + n_j) d_T(v_i, v_j) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} n_i + \sum_{1\leq i<j\leq n} n_i n_j d_T(v_i, v_j) \\
&\quad + \Big(\sum_{i=1}^{n} n_i\Big)^2 - \sum_{i=1}^{n} n_i^2 + \sum_{i=1}^{n} n_i(n_i - 1) \\
&= W(T) + \sum_{1\leq i<j\leq n} (n_i + n_j) d_T(v_i, v_j) + \sum_{1\leq i<j\leq n} n_i n_j d_T(v_i, v_j) \\
&\quad + \Big(\sum_{i=1}^{n} n_i\Big)^2 + (n-1)\sum_{i=1}^{n} n_i
\end{aligned}$$

Kako je $W(T) = \sum_{1\leq i<j\leq n} d_T(v_i, v_j)$, Wienerov indeks od T^* možemo zapisati kao

$$W(T^*) = \sum_{1\leq i<j\leq n} (n_i + 1)(n_j + 1) d_T(v_i, v_j) + \Big(\sum_{i=1}^{n} n_i\Big)^2 + (n-1)\sum_{i=1}^{n} n_i$$

pa je dokaz završen. $\square$

Primjer 4.50. *Promotrimo trnovito stablo T^* prikazano na Slici 19. Da bismo koristili*



Slika 19

prethodni teorem za računanje Wienerovog indeksa od T^* uzet ćemo da je put $(v_1, v_2, v_3, v_4, v_5)$ stablo T pa je $n_1 = 0$, $n_2 = 2$, $n_3 = 0$, $n_4 = 1$, $n_5 = 4$. Dobivamo

$$W(T^*) = \sum_{i=1}^{4}\sum_{j=i+1}^{5} (n_i + 1)(n_j + 1)|j - i| + \Big(\sum_{i=1}^{5} n_i\Big)^2 + 4\sum_{i=1}^{5} n_i = 190.$$

Napomena 4.51. *Teorem 4.49 vrijedi i ako umjesto stabla T uzmemo proizvoljan konačan povezan jednostavan graf.*

U nastavku ćemo promotriti neke specijalne slučajeve prethodnog teorema.

Korolar 4.52. *Neka je T stablo s n vrhova $v_1, v_2, \ldots, v_n$ i neka je T^* trnovito stablo s $n_i = k, i = 1, 2, \ldots, n$. Tada vrijedi*

$$W(T^*) = (k + 1)^2 W(T) + nk(nk + n - 1).$$

Dokaz. Jednostavno uvrštavanjem dobijemo

$$\begin{aligned} W(T^*) &= W(T) + \sum_{1\le i<j\le n} 2kd_T(v_i,v_j) + k^2 \sum_{1\le i<j\le n} d_T(v_i,v_j) \\ &\quad + \Big(\sum_{i=1}^{n} k\Big)^2 + (n-1)\sum_{i=1}^{n} k \\ &= (1+2k+k^2)W(T) + k^2n^2 + kn(n-1) \\ &= (k+1)^2 W(T) + nk(nk+n-1). \end{aligned}$$

□

Primjer 4.53. *Nek je T^* nastalo od stabla T prikazanog na Slici 19 spajanjen tri nova vrha sa svakim vrhom od T. Prema Primjeru 4.50 Wienerov indeks od T je* 190. *Slijedi*

$$W(T^*) = 16 \cdot 190 + 12 \cdot 3(12 \cdot 3 + 11) = 4732.$$

Za iskaz i dokaz naredna dva korolara trebat će nam sljedeća lema:

Lema 4.54. *Neka je T stablo sa skupom vrhova $V(T) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Tada vrijedi*

$$\sum_{1\le i<j\le n} \Big(D_T(v_i)+D_T(v_j)\Big) d_T(v_i,v_j) = 4W(T) - n(n-1) \tag{4.2.1}$$

$$i$$

$$\sum_{1\le i<j\le n} D_T(v_i)D_T(v_j) d_T(v_i,v_j) = 4W(T) - (n-1)(2n-1). \tag{4.2.2}$$

Dokaz. Da bismo dokazali ove dvije jednadžbe koristimo formulu (4.1.1) u generaliziranom obliku i to tako da svakom paru vrhova v_i, v_j pridružimo težinu ω_{ij}. Obzirom da formulu (4.1.1) možemo zapisati i na ovaj način

$$W(T) = \sum_{e=v_a v_b \in E(T)} \sum_{v_i \in V(T_a)} \sum_{v_j \in V(T_b)} 1,$$

gdje T_a i T_b predstavljaju podstabla od T dobivena uklanjanjem brida $v_a v_b$. Podstablo T_a sadrži vrh a, a T_b sadrži vrh b. Dobivamo da vrijedi

$$W_\omega(T) := \sum_{1\le i<j\le n} \omega_{ij} d_T(v_i,v_j) = \sum_{e=v_a v_b \in E(T)} \sum_{v_i \in V(T_a)} \sum_{v_j \in V(T_b)} \omega_{ij}.$$

Neka je

$$\omega_{ij} = D_T(v_i) + D_T(v_j).$$

Tada vrijedi

$$\begin{aligned}
\sum_{1\le i<j\le n} & \Big(D_T(v_i)+D_T(v_j)\Big)d_T(v_i,v_j) = \\
= & \sum_{e=v_av_b\in E(T)} \Bigg(\sum_{v_i\in V(T_a)}\sum_{v_j\in V(T_b)} D_T(v_i)+\sum_{v_i\in V(T_a)}\sum_{v_j\in V(T_b)} D_T(v_j)\Bigg) \\
= & \sum_{e=v_av_b\in E(T)} \Bigg(n_{v_b}(e)\sum_{v_i\in V(T_a)} D_T(v_i)+n_{v_a}(e)\sum_{v_j\in V(T_b)} D_T(v_j)\Bigg) \\
= & \sum_{e=v_av_b\in E(T)} \Big(n_{v_b}(e)[2(n_{v_a}(e)-1)+1]+n_{v_a}(e)[2(n_{v_b}(e)-1)+1]\Big) \\
= & \sum_{e=v_av_b\in E(T)} \Big[4n_{v_a}(e)n_{v_b}(e)-\Big(n_{v_a}(e)+n_{v_b}(e)\Big)\Big] \\
= & \ 4W(T)-n(n-1).
\end{aligned}$$

U ovom računu smo koristili tvrdnju $\sum\limits_{v\in V(G)} D_G(v)=2|E(G)|$ koja vrijedi za sve konačne grafove G te činjenicu da $D_T(v)=D_{T_l}(v)$ za sve vrhove $v\in V(T_l\backslash\{v_l\})$ i $D_T(v_l)=D_{T_l}(v_l)+1$, $l=a,b$.

Neka je ovaj put $\omega_{ij}=D_T(v_i)D_T(v_j)$. Vrijedi

$$\begin{aligned}
\sum_{1\le i<j\le n} & D_T(v_i)D_T(v_j)d_T(v_i,v_j) \\
= & \sum_{e=v_av_b\in E(T)} \Bigg(\sum_{v_i\in V(T_a)} D_T(v_i)\sum_{v_j\in V(T_b)} D_T(v_j)\Bigg) \\
= & \sum_{e=v_av_b\in E(T)} \Big[2\Big(n_{v_a}(e)-1\Big)+1\Big]\Big[2\Big(n_{v_b}(e)-1\Big)+1\Big] \\
= & \sum_{e=v_av_b\in E(T)} \Big[4n_{v_a}(e)n_{v_b}(e)-2\Big(n_{v_a}(e)+n_{v_b}(e)\Big)+1\Big] \\
= & \ 4W(T)-(n-1)(2n-1).
\end{aligned}$$

□

Korolar 4.55. *Neka je T stablo s n vrhova i T^* trnovito stablo s parametrima $n_i=D_T(v_i)$, $i=1,2,\dots,n$. Tada vrijedi*

$$W(T^*)=9W(T)+(n-1)(3n-5).$$

Dokaz. Koristeći Teorem 4.49 i Lemu 4.54 dobivamo

$$\begin{aligned}
W(T^*) &= W(T) + \sum_{1\le i<j\le n} \Big(D_T(v_i) + D_T(v_j) \Big) d_T(v_i, v_j) \\
&\quad + \sum_{1\le i<j\le n} D_T(v_i) D_T(v_j) d_T(v_i, v_j) + \Big(\sum_{i=1}^{n} D_T(v_i) \Big)^2 \\
&\quad +(n-1) \sum_{i=1}^{n} D_T(v_i) \\
&= W(T) + 4W(T) - n(n-1) + 4W(T) - (n-1)(2n-1) \\
&\quad +4(n-1)^2 + 2(n-1)^2 \\
&= 9W(T) + (n-1)(3n-5).
\end{aligned}$$

□

Korolar 4.56. *Neka je T stablo s n vrhova i T^* trnovito stablo s parametrima $n_i = m - D_T(v_i) \ge 0$, $i = 1, 2, \dots, n$. Tada vrijedi*

$$W(T^*) = (m-1)^2 W(T) + [(m-1)n + 1]^2.$$

Dokaz. Dokaz ćemo provesti slično kao u Korolaru 4.55. Imamo

$$\begin{aligned}
W(T^*) &= W(T) + \sum_{1\le i<j\le n} \Big(2m - D_T(v_i) - D_T(v_j) \Big) d_T(v_i, v_j) \\
&\quad + \sum_{1\le i<j\le n} \Big(m - D_T(v_i) \Big) \Big(m - D_T(v_j) \Big) d_T(v_i, v_j) \\
&\quad + \Big(\sum_{i=1}^{n} (m - D_T(v_i)) \Big)^2 + (n-1) \sum_{i=1}^{n} (m - D_T(v_i)) \\
&= W(T) + 2mW(T) - \Big(4W(T) - n(n-1) \Big) + m^2 W(T) \\
&\quad -m\Big(4W(T) - n(n-1) \Big) + 4W(T) - (n-1)(2n-1) \\
&\quad +\Big(mn - 2(n-1) \Big)^2 + (n-1)\Big(mn - 2(n-1) \Big) \\
&= (m-1)^2 W(T) + (mn)^2 - 2mn(n-1) + (n-1)^2 \\
&= (m-1)^2 W(T) + \Big[(m-1)n + 1 \Big]^2.
\end{aligned}$$

□

Još jedan zanimljiv specijalan slučaj trnovitog stabla je gusjenica. U radu [1] je predstavljena formula za regularne gusjenice.

Definicija 4.57. ***Gusjenica*** *je trnovito stablo puta.*

Gusjenicu označavamo s $T^*(a, b)$ ako svi vrhovi koji nisu listovi imaju isti stupanj koji je jednak $a > 1$. Broj $b > 0$ predstavlja ukupan broj svih vrhova koji nisu listovi. Za takvu gusjenicu kažemo da je regularna.

Korolar 4.58. *Neka je $T^*(a, b)$ regularna gusjenica. Tada vrijedi*

$$W(T^*(a, b)) = \frac{(a-1)b}{6} \Big[(a-1)(b-1)(b+7) + 6(a+1) \Big] + 1.$$

Dokaz. Uvrštavajući u formulu iz Korolara 4.56 dobivamo

$$\begin{aligned} W(T^*(a,b)) &= (a-1)^2 W(P_b) + \Big[(a-1)b+1\Big]^2 \\ &= (a-1)^2\binom{b+1}{3} + (a-1)^2b^2 + 2(a-1)b + 1 \\ &= (a-1)b\Big[(a-1)\Big(\frac{b^2-1}{6}+b\Big)+2\Big]+1 \\ &= \frac{(a-1)b}{6}\Big[(a-1)(b^2+6b-1)+12\Big]+1 \\ &= \frac{(a-1)b}{6}\Big[(a-1)(b-1)(b+7)+6(a+1)\Big]+1. \end{aligned}$$

□

4.2.2 K-subdivizija stabla i Wienerov indeks

Povećavajući duljinu segmenata dobivamo novi način za rekurzivno računanje Wienerova indeksa stabala (vidi [5]):

Definicija 4.59. *Stablo $T^{'}$ zovemo k-**subdivizija stabla** T ako je $T^{'}$ dobiven zamjenom svakog brida u T putem duljine $k+1$.*

Ako u stablu T imamo n vrhova, onda je broj vrhova stabla $T^{'}$ jednak $n^{'} = k(n-1)+n$. Stupanj svakog novog vrha je jednak 2, dok je $D_{T^{'}}(v) = D_T(v)$ za svaki $v \in V(T)$.

Teorem 4.60. *Neka je T stablo s n vrhova i $T^{'}$ njegova k-subdivizija. Tada vrijedi*

$$W(T^{'}) = (k+1)^3 W(T) + \binom{n^{'}+1}{3} - (k+1)^3\binom{n+1}{3},$$

gdje je $n^{'}$ broj vrhova od $T^{'}$.

Dokaz. Primjenom formule iz Teorema 4.9 dobivamo

$$\begin{aligned} W(T^{'}) &= \binom{n^{'}+1}{3} - \sum_{v\in V(T^{'})}\ \sum_{1\le i<j<l\le d_{T^{'}}(v)} |V(T_i^{'})||V(T_j^{'})||V(T_l^{'})| \\ &= \binom{n^{'}+1}{3} - \sum_{v\in V(T)}\ \sum_{1\le i<j<l\le d_T(v)} (k+1)^3|V(T_i)||V(T_j)||V(T_l)| \\ &= \binom{n^{'}+1}{3} + (k+1)^3W(T) - (k+1)^3\binom{n+1}{3}. \end{aligned}$$

□

Primjer 4.61. *Neka je T stablo prikazano na Slici 3 i $T^{'}$ njegova 3-subdivizija. Kao što već znamo $W(T) = 246$ pa lako možemo izračunati Wienerov indeks od $T^{'}$ koristeći prethodni teorem. Tako dobivamo*

$$W(T^{'}) = 4^3\cdot 246 + \binom{50}{3} - 4^3\binom{14}{3} = 31648.$$

U [11] O.E. Polansky i D. Bonchev promatraju stablo T_1 dobiveno od zadanog stabla T 1-subdivizijom samo jednog brida $e = uv$:

Teorem 4.62. *Neka je T stablo sa n vrhova i $e = uv \in E(T)$. Vrijedi*

$$W(T_1) = W(T) + \frac{1}{2}\Big[D_T(u) + D_T(v) + n_u(e) + 2n_u(e)n_v(e) + n_v(e)\Big].$$

Dokaz. Označimo s w novi vrh između u i v. Uzimajući u obzir proizvoljna dva vrha x i y u T_1, imamo tri slučaja:
1. slučaj: ako je $x, y \in V(T_l), l = u, v$ imamo $d_{T_1}(x, y) = d_T(x, y)$.
2. slučaj: ako je $x \in V(T_u)$ i $y \in V(T_v)$, imamo $d_{T_1}(x, y) = d_T(x, y) + 1$.
3. slučaj: ako je $x \in V(T_l), l = u, v$ i $y = w$, dobivamo $d_{T_1}(x, y) = d_T(x, l) + 1$
Vrijedi i

$$D_T(u) = D_{T_u}(u) + \sum_{x \in V(T_v)} d_T(u, v) = D_{T_u}(u) + D_{T_v}(v) + n_v(e)$$

i analogno

$$D_T(v) = D_{T_u}(u) + D_{T_v}(v) + n_u(e).$$

Slijedi

$$\begin{aligned}
W(T_1) &= \sum_{\{x,y\} \subseteq V(T_u)} d_T(x, y) + \sum_{\{x,y\} \subseteq V(T_v)} d_T(x, y) + \sum_{x \in V(T_u)} \sum_{y \in V(T_v)} (d_T(x, y) + 1) \\
&\quad + \sum_{x \in V(T_u)} (d_T(x, u) + 1) + \sum_{x \in V(T_v)} (d_T(x, v) + 1) \\
&= W(T) + n_u(e)n_v(e) + D_{T_u}(u) + n_u(e) + D_{T_v}(v) + n_v(e) \\
&= W(T) + n_u(e)n_v(e) + \frac{1}{2}\Big[D_T(u) + D_T(v) - n_u(e) - n_v(e)\Big] + n_u(e) + n_v(e) \\
&= W(T) + \frac{1}{2}\Big[D_T(u) + D_T(v) + n_u(e) + 2n_u(e)n_v(e) + n_v(e)\Big].
\end{aligned}$$

$\square$

Primjer 4.63. *Uzmimo T kao na Slici 3. Neka je T_1 stablo dobiveno 1-subdivizijom brida $e = v_3v_8$. Kako je $D_T(v_3) = 26$, $D_T(v_8) = 27$, $n_{v_3}(e) = 7$ i $n_{v_8}(e) = 6$, dobivamo*

$$W(T_1) = 246 + \frac{1}{2}(26 + 27 + 7 + 2 \cdot 7 \cdot 6 + 6) = 321.$$

prema prethodnom teoremu.

5 Zaključak

U ovom radu bavimo se računanjem Wienerovog indeksa grafova sa naglaskom na stabla. Definiramo ga kao zbroj udaljenosti između svih vrhova grafa. Osim u kemiji, gdje je i nastao, Wienerov indeks od velike je važnosti i u drugim područjima, naročito u teoriji kompleksnih mreža i to pri računanju raznih indeksa centralnosti. Za neke specijalne tipove grafova kao što su potpun graf K_n, ciklus C_n, put P_n, zvijezda S_n i potpuni bipartitni graf $K_{m,n}$ nije teško računati Wienerov indeks jer takvi grafovi imaju lijepu strukturu. Problem nastaje kod nekih općenitijih tipova grafova kao što su npr. stabla.
Budući smo rekli da je stablo povezan aciklički graf, to postoji jedinstven put između dva proizvoljna vrha. Zbog takvih svojstava, Wienerov indeks je lakše računati za stabla nego za proizvoljne povezane grafove. U tu svrhu iskazali smo i dokazali nekoliko teorema u kojima navodimo formule za direktno računanje Wienerovog indeksa uključujući i one formule koje koriste točke grananja i segmente stabla. Za svaku formulu ponudili smo primjer sa odgovarajućom sličicom stabla.
Zatim smo ustanovili ne tako očitu vezu između Wienerovog indeksa i Laplaceovih svojstvenih vrijednosti. Naposljetku smo se bavili raznim rekurzivnim formulama za računanje Wienerovog indeksa pri čemu smo promatrali slučaj izbacivanja nekog lista u stablu, zatim smo proučavali stablo dobiveno spajanjem neka dva stabla putem fiksne duljine pa stablo dobiveno identifikacijom određenih vrhova neka dva stabla. Izveli smo i rekurzivnu formulu za računanje Wienerovog indeksa trnovitog stabla i onog stabla koje je dobiveno k-subdivizijom nekog drugog stabla.

Sažetak

U kemijskoj literaturi Wienerov indeks je topološki indeks molekule. Nazvan je po znanstveniku H. Wieneru koji je 1947. godine ustanovio postojanje korelacije između točke vrenja parafina i strukture molekula. Wienerov indeks grafa definira se kao zbroj udaljenosti svih vrhova u grafu. U ovom radu bavimo se različitim načinima računanja Wienerovog indeksa stabala. Najprije ga računamo za neke specijalne tipove grafova kao što su potpuni grafovi, zvijezde, putevi itd. Glavni dio rada odnosi se na izvođenje direktnih i rekurzivnih formula za računanje Wienerovog indeksa stabla. Neke od tih formula vrijede i za povezane grafove.

Summary

In chemistry, Wiener index is a well known topological index of a molecule. It was named after the scientist H. Wiener who in 1947. established the existence of a correlation between the boiling points of paraffin and the structure of molecules. Wiener index of a graph is defined as the sum of the distances between all pairs of vertices. In this paper we deal with different ways of calculating the Wiener index of trees. First we deal with some special types of graphs, such as a complete graph, stars, paths etc. The main part of the thesis involves direct and recursive formulas for calculating the Wiener index of a tree. Some of those formulas can be applied to connected graphs.

6 Literatura

[1] D. Bonchev and D.J. Klein, *On the Wiener number of thorn trees, stars, rings, and rods*, Croatica Chemica Acta, 75:613–620, 2002.

[2] E.R. Canfield, R. Robinson and D.H. Rouvray, *Determination of the Wiener molecular branching index for the general tree*, J. Comput. Chem., 6:598–609, 1985.

[3] R. Diestel, *Graph Theory*, Electronic Edition 2000, Springer-Verlag, New York, 1997, 200.

[4] A. Dobrynin, *Branchings in trees and the calculation of the Wiener index of a tree*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 41:119–134, 2000.

[5] A. Dobrynin, R. Entringer and I. Gutman, *Wiener index of trees: theory and application*, Acta Appl. Math., 66:211–249, 2001.

[6] A. Dobrynin, I. Gutman, *On a graph invariant related to the sum of all distances in a graph*, Publ. Inst. Math. (Beograd), 56:18–22, 1994.

[7] J. Doyle, J. Graver, *Mean distance in a graph*, Discrete Math., 17:147–154, 1977.

[8] I. Gutman, *Distance of thorny graphs*, Publ. Inst. Math. (Beograd), 63:31–36, 1998.

[9] W. Kocay, D. L. Kreher, *Graphs, algorithms and optimization*, Chapman and Hall / CRC, 2005.

[10] R. Merris, *An edge version of the matrix-tree theorem and the Wiener index*, Linear and Multilinear Algebra, 25:291–296, 1989.

[11] O.E. Polansky and D. Bonchev, *The Wiener number of graphs. I. General theory and changes due to some graph operations*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 21:133–186, 1986.

[12] H. Wiener, *Structural determination of paraffin boiling points*, J. Amer. Chem. Soc., 1947. 69, 17-20.

Životopis

Zovem se Ivona Markulov i živim u Čađavici. Rođena sam 16. lipnja 1991. godine u Virovitici. Obrazovanje sam započela u Osnovnoj školi Davorin Trstenjak u Čađavici. Srednjoškolsko obrazovanje nastavila sam u Općoj gimnaziji srednje škole Marka Marulića u Slatini. Tijekom svog obrazovanja sudjelovala sam na mnogim natjecanjima iz raznih područja i ostvarila značajne uspjehe. Nakon srednje škole upisala sam integrirani preddiplomski i diplomski studij nastavničkog smjera matematike i informatike na Odjelu za matematiku u Osijeku.