نشریه علمی‌ترویجی محاسبات نرم

سال پنجم/ شمارۀ دوم/ پاییز و زمستان ۹۵/ صفحۀ ۲۸ـ۳۳

دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۰۹/۲۸

پذیرش مقاله: ۱۳۹۵/۰۵/۱۵

مجموع فاصله‌های بین رئوس یک گراف

غلامحسین فتح‌تبار[1*]، الهام محفوظ[2]

[1] دانشیار دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

fathtabar@kashanu.ac.ir

[2] دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

e_mahfooz@yahoo.com

چکیده

فرض کنید G=(V, E) یک گراف ساده با مجموعه رئوس V و مجموعه یال‌های E است. مجموع تمام فاصله‌های بین هر دو رأس از گراف G را پایای وینر گراف G گویند و با $W(G)$ نشان می‌دهند. در این مقاله، کران‌هایی برای پایای وینر گراف‌های k-همبند ارائه می‌شود.

واژه‌های کلیدی: گراف، گراف k-همبند، پایای وینر، پایای وینر یالی.

۱. مقدمه

زوج $G=(V, E)$ را که در آن V یک مجموعه ناتهی و E زیرمجموعه‌ای از تمام زیرمجموعه‌های دوعضوی V است، گراف ساده گویند. پایای یک گراف [۴، ۵، ۷، ۹، ۱۱]عددی است که به گراف نسبت داده می‌شود؛ طوری که نسبت‌به یکریختی گراف‌ها تغییر نمی‌کند. برای مثال، تعداد یال‌های یک گراف یک پایای گراف است. تعداد یال‌های کوتاه‌ترین مسیر بین دورأس u و v از گراف G فاصلهٔ بین این دو رأس گراف نامیده می‌شود و با $d_G(u,v)$ نشان داده می‌شود. پایای وینر[۱، ۲، ۳، ۶، ۷، ۸، ۹، ۱۰، ۱۲، ۱۳، ۱۷، ۱۸، ۱۹] گراف G

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

پایای وینر معرفی‌شده با نمادها و نام‌های متفاوت در علومی مانند علوم کامپیوتر، مکانیک، مواد، شیمی، داروسازی و ریاضی مورداستفاده قرار گرفته است که خوانندهٔ علاقه‌مند می‌تواند برای دیدن آن‌ها به[۸، ۱۱، ۱۴، ۱۵، ۱۶]مراجعه کند. آنچه مسلم است هارولد وینر [۱۹] اولین شیمی‌دان است که مجموع فاصله‌های بین هر دو زوج رأس گراف را در درخت‌ها، برای تخمین نقطهٔ ذوب آلکان‌ها در سال ۱۹۴۷، موردتوجه قرار داده است. وینر خودش از نام عدد مسیری برای این پایای گراف استفاده کرد و آن را با W نمایش داد. البته تعریفی که وینر یعنی مجموع فواصل بین رئوس، اولین بار توسط شیمی‌دان ژاپنی به نام هارو هوسیا ارائه شد. به‌نظر می‌رسد در نوشته‌های ریاضی مقدار وینر اولین بار در سال ۱۹۷۶ مطالعه شده است. آن‌طور که شواهد نشان می‌دهد ریاضی‌دانان برای یک مدت‌زمان طولانی از کاری که هارولد وینر در شیمی با استفاده از مجموع فواصل بین رئوس انجام داد، بی‌اطلاع بودند. مباحث و قضایای کتاب [۴] و نام‌هایی چون حالت انبوه، وضعیت کلی، که ریاضی‌دانان طی دوره‌های گوناگون برای این پایای گراف مورد استفاده قرار داده‌اند و هنوز نیز برخی به‌کار می‌برند، به‌وضوح گواه این مطلب است. باوجوداین، در مقالات و کتاب‌های اخیر ریاضی، نمایش W و نام وینر برای این پایای گراف به‌کار گرفته می‌شود. همچنین ریاضی‌دانان در مقالات فراوانی نیز پایای

$$\mu(G)=\frac{W(G)}{n(n-1)}$$

را که به نام فاصلهٔ میانگین یا فاصلهٔ میانی مشهور است، بررسی کرده‌اند. همان‌طور که واضح است، در رابطهٔ نزدیک با پایای وینرگراف است. یافتن روش‌هایی برای پی بردن به عدد وینر یک گراف، هم از نظر تئوری و هم از نظر کاربردی، همواره موردتوجه بوده است. ریاضی‌دانان تابه‌حال، اغلب دو گروه از مسائل را دربارهٔ مقدار عدد وینر گراف بررسی کرده‌اند. اول آنکه W چه رابطه‌ای با دیگر پایاهای گراف دارد یا به‌عبارت دیگر، W چگونه به ساختار یک گراف وابسته می‌شود. دراین‌باره می‌توان به رابطه‌های گوناگونی اشاره کرد که مابین عدد وینر با عدد استقلال، مجموعه غالب و عدد غالب شمارش زیر درخت‌های فراگیر مقادیر ویژه و مقادیر ویزه لاپلاسی [۲۰، ۲۱، ۲۲] یک گراف برخی ویژگی‌های متریک گراف‌ها و... وجود دارد. دومین نوع از بررسی‌ها درخصوص پایای وینر یافتن تکنیک‌هایی برای محاسبهٔ مستقیم W در درخت‌ها [۱۰]، سیستم‌های شش‌ضلعی [۱۱]، ضرب دکارتی گراف‌ها، نانوساختارها [۱۰] و... اشاره کرد.

۲. پایای وینر

در این بخش، به معرفی و بررسی پایای وینر می‌پردازیم. فرض کنید G یک گراف باشد. پایای وینر G به‌صورت زیر تعریف می‌شود.

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

که در آن، $d_G(u,v)$ فاصله بین رأس uو v در G است. اگر فاصلهٔ رأس V از G به‌صورت

$$d(v,G)=\sum_{u\in V(G)} d(u,v)$$

تعریف شود، آنگاه فرمول مربوط به پایای وینر را می‌توان بدین صورت بازنویسی کرد:

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

اکنون پایای وینر برخی از گراف‌های مهم را می‌توان به‌سادگی محاسبه کرد. برای مثال $W(K_n)=n(n-1)/2$، $W(K_n)=n(n^2-1)/2$، $W(K_{1,n-1})=(n-1)^2$ و

$$W(C_n)=\begin{cases}\frac{n(n^2-1)}{8} & n\equiv 1 \bmod 2\\ \frac{n^3}{8} & n\equiv 0 \bmod 2\end{cases}$$

اگر G گرافی با n رأس و m یال باشد، آن را با $G(n,m)$ نمایش می‌دهیم.

قضیهٔ ۱. فرض کنید در گراف $G(n, m)$ بیشترین درجه رأس‌ها $\Delta(G)=n-1$ باشد. در این صورت $W(G) = n^2-n-m$ [۲].

قضیهٔ ۲. فرض کنید $G(n, m)$ یک گراف باشد، گراف $G+v$ گرافی است که با اضافه کردن رأس v به G و متصل کردن آن به همهٔ رئوس G به‌وجود می‌آید، در این صورت $W(G) = n^2- m$ [۲].

قضیهٔ ۳ [۲۳]. فرض کنید در گراف $G(n, m)$، v رأسی از درجه $n-1$ باشد، به‌طوری‌که $G-v$ همبند باشد. در این صورت:

$$W(G-v)=(n-1)^2-m$$

قضیهٔ ۴ [۲]. فرض کنید $G_1=G(n_1,m_1)$ و $G_2=G(n_2,m_2)$ دو گراف همبند باشند. در این صورت شاخص وینر G_1+G_2 برابر است با:

$$W(G_1+G_2)=n_1(n_1-1)+n_2(n_2-1)+n_1n_2-m_1-m_2$$

فرض کنید G یک گراف با n رأس که $n>1$ باشد، عدد وینر میانگین (اندازهٔ میانگین) G به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu(G)=\frac{W(G)}{n(n-1)}$$

می‌توان دید که $\mu(G)$ میانگین حسابی همهٔ فاصله‌های ناصفر در گراف G است. بنابراین $\mu(G)>0$ و به‌علاوه تساوی برقرار است اگر و تنها اگر G یک گراف کامل یا یک گراف جهت‌دار کامل باشد. مفهوم عدد وینر میانگین در گراف، ابتدا توسط مارج استیدمن به‌عنوان ابزاری در مهندسی به‌کار رفته است. مقالات بسیاری دربارهٔ عدد وینر میانگین وجود دارد. برای مثال، دویل و گریور در [۱۳-۱۶] عدد وینر میانگین را برای گراف‌های وزن‌دار و جهت‌دار بررسی کردند. به‌وکلی در [۵] عدد وینر میانگین را برای گراف‌های خطی بررسی کرد.

۳. پایای وینر گراف‌های k-همبند

گوتمن و ژانگ در [۱۸] کران‌های پایینی برای گراف k-همبند G ارائه کردند که در ادامه به آن اشاره می‌شود:

قضیهٔ ۵. فرض کنید G یک گراف k-همبند با n رأس باشد که k از یک تا $n-2$ تغییر می‌کند. در این صورت:

$$W(G)\geq \frac{1}{2}n(n+1)-(k+1)$$

به‌علاوه تساوی برقرار است اگر و تنها اگر G اتصال K_k با اجتماع K_1 و K_{n-k-1} باشد.

قضیهٔ ۶. فرض کنید G یک گراف k-یال همبند با n رأس باشد باشد که k از یک تا $n-2$ تغییر می‌کند. در این صورت:

$$W(G)\geq \frac{1}{2}n(n-1)+(n-k-1)$$

به‌علاوه تساوی برقرار است اگر و تنها اگر G اتصال K_k با اجتماع K_1 و K_{n-k-1} باشد.

در ادامهٔ این بخش کران بالایی برای پایای وینر گراف k-همبند ارائه می‌دهیم.

فرض کنید v یک رأس دلخواه از گراف G باشد. عدد وینر v را به‌شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$W(v)=\sum_{x\in V(G)} d(x,v)$$

لم ۷. فرض کنید G یک گراف k-همبند و v یک رأس دلخواه از گراف G باشد. در این صورت اگر

$$V_i=\{x\in V(G)\,|\,d(x,v)=i\}$$

$|V_i|$ حداقل k است.

اثبات. فرض کنید بیشترین مقدار $d(v, y)$ برابر با s باشد و

این ماکزیمم برای رأسی مانند v رخ دهد، یعنی $d(v,\ y)=s$ پس $V(G)$ اجتماع V_0 و ... و V_s است. اگر u و w دو رأس مجاور در G باشند که u در V_i و w در V_j آنگاه $|i-j|<2$؛ زیرا اگر مثلاً $i>j+1$ و p_i و p_j به‌ترتیب دو مسیر از v_0 به u و از v_0 به w باشند، مسیر

$$v_{\cdot} \xrightarrow{P_j} w \rightarrow u$$

کوتاه‌تر از مسیر P_j از v_0 به w است که این تناقض با $d(u,v_0)=I$ دارد. بنابراین اگر P مسیری بین x متعلق به V_i و x' متعلق به V_j باشد که $i<j$، آنگاه اشتراک $V(P)$ و V_k به‌ازای هر $i<j<k$ برابر تهی است. پس به‌طور خاص هر مسیر بین v در V_0 و y در V_s با تمام V_iها اشتراک دارد. لذا برای هر $1\leq i\leq s-1$، با حذف V_i از $V(G)$ گرافی حاصل می‌شود که در آن، هیچ مسیری بین v و y وجود ندارد؛ یعنی v_i، $0<i<s$ یک برش رأسی برای G است. چون G، k-همبند است، پس $|V_i|>k-1$.

قضیهٔ ۸ فرض کنید G گرافی k-همبند با n رأس باشد. در این صورت، برای هر رأس v از G داریم:

$$W(v)\leq t(n-1)-\frac{t(t-1)}{2}k$$

که در آن، $t=[(n-1)/2]+1$. همچنین اگر در نامساوی فوق تساوی رخ دهد، درجهٔ v برابر با k است.

اثبات. فرض کنید بیشترین مقدار $d(x,y)$ برای x از $V(G)$ برابر با s باشد و این ماکزیمم برای رأسی مانند y رخ دهد، یعنی $d(v,\ y)=s$ قرار دهید

$$V_i=\{x\in V(G)\,|\,d(x,v)=i\}$$

و $a_i=|V_i|$. درنتیجه

$$V(G)=V_0\cup V_1\cdots\cup V_s$$

طبق لم ۷، داریم $a_i=|V_i|>k-1$. بنابراین مسئلهٔ ماکزیمم کردن عبارت

$$W(v)=a_1+2a_2+\cdots+sa_s$$

با دو شرط

$$a_1+a_2+\cdots+a_s=n-1$$

و $a_i>k-1$ است. واضح است که این ماکزیمم زمانی رخ می‌دهد که $a_1=a_2=\ldots=a_{s-1}=k$ و $a_s=n-1-(s-1)k$ باشند. بنابراین:

$$\begin{aligned}W(v) &= a_1+2a_2+\ldots+sa_s\\ &\leq(1+2+\ldots+s-1)k+s(n-1-k(s-1))\\ &=s(n-1)-s(s-1)k/2\end{aligned}$$

قرار دهید:

$$f(s)=s(n-1)-\frac{s(s-1)k}{2}$$

در این صورت $f(s)$ یک تابع درجه دوم برحسب s است و بیشترین مقدار f در اعداد صحیح، در نزدیک‌ترین اعداد صحیح به $(n-1)/2+1/2$ رخ می‌دهد که این عدد وقتی $(n-1)/k$ عدد صحیح نباشد، برابر است با:

$$[\frac{n-1}{k}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}]=[\frac{n-1}{k}]+1$$

و اگر $(n-1)/k$ عدد صحیح باشد، این عدد می‌تواند $(n-1)/k$ یا $(n-1)/k+1$ باشد. اما اگر $s=(n-1)/k+1$، آنگاه $a_s=0$ که تناقض با $d(v,\ y)=s$ دارد. پس اگر $(n-1)/k$ صحیح باشد، $s=(n-1)/k$؛ بنابراین $s=[(n-2)/2]+1$ که قسمت اول حکم را ثابت می‌کند. درنهایت، اگر در این نامساوی، تساوی رخ دهد، $d(v)=a_1=k$.

نتیجهٔ ۹. فرض کنید G یک گراف k-همبند با n رأس باشد،

$$W(G)\leq[\frac{n}{2}(t(n-1)-\frac{t(t-1)}{2}k)]$$

که در آن $t=[(n-2)/2]+1$. به‌علاوه تساوی رخ می‌دهد اگر و تنها اگر G، k-منظم باشد. در حالت کلی اگر k-منظم باشد که طول بزرگ‌ترین مسیر در آن $s=[(n-2)/2]+1$ و تعداد $\{x,\ y\}$هایی که $d(x,\ y)=[(n-2)/2]+1$ برابر $a_s=n-1-k(s-1)$ باشد، آنگاه در نامساوی مربوط به $w(G)$ تساوی رخ می‌دهد.

نتیجهٔ ۱۰. اگر G یک گراف دوهمبند باشد، $W(v)<[n^2/4]$ و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر G دور باشد.

اثبات. شرایط قضیهٔ ۸ برقرار است. لذا به‌ازای هر v داریم $W(v)<[n^2/4]$. حال می‌توان نوشت

$$W(G)=\sum_{\{u,v\}\subset V(G)} d(u,v)=\frac{1}{2}\sum_{v\in V(G)} d(v,G)\le \frac{1}{2}[\frac{n^2}{4}]n=\frac{n}{2}[\frac{n^2}{4}]$$

فرض کنید G یک گراف است، شاخص وینر یالی گراف را به‌صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$W_e(G)=\sum_{\{e,e'\}\subseteq E(G)} d(e,e')$$

که در آن، $d(e,e')$ برای یال‌های $e=u_1v_1$ و $e'=u_2v_2$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$d(e,e')=min\{d(u_1,u_2),d(u_1,v_2),d(v_1,u_2),d(v_1,v_2)\}$$

فرض کنید G یک گراف و e یالی از G باشد. شاخص وینر e را به‌صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$W(e)=\sum_{e'\in E(G)} d(e,e')$$

لم ۱۰. فرض کنید G یک گراف دو یال همبند و e یال دلخواهی از G باشد. تعریف کنید:

$$E_i=\{e'\in E(G)\mid d(e,e')=i\}$$

و قرار دهید $a_i=|E_i|$. در این صورت به‌ازای هر $0<i<s-2$، $a_i>1$.

اثبات. همانند آنچه در لم ۶ دیدیم، هر عضو مجموعه E_i یک یال برشی برای G خواهد بود و ازآنجاکه G دو یال همبند است، باید داشته باشیم: $a_i>1$.

قضیهٔ ۱۱. فرض کنید G یک گراف دو یال همبند با n رأس و m یال باشد. در این صورت:

$$W_e(G)\le m/2[(m-2)^2/4]$$

اثبات. فرض کنید بیشترین مقدار $d(e,e')$ برای e از $E(G)$ برابر با s باشد. قرار دهید

$$V_i=\{x\in V(G)\mid d(x,v)=i\}$$

و $a_i=|E_i|$. داریم:

$$E(G)=E_0\cup E_1\cdots\cup E_s$$

طبق لم ۱۰ داریم $a_i>1$. بنابراین مسئلهٔ ماکزیمم کردن عبارت

$$W(e)=a_1+2a_2+\cdots+sa_s$$

با دو شرط

$$a_0+a_1+a_2+\cdots+a_s=m$$

و $a_i>1$ است. اما چون G دو یال همبند است، درجهٔ هر رأس در آن، بزرگ‌تر یا مساوی دو خواهد بود، بنابراین حداقل مقدار a_0 برابر سه می‌شود. پس:

$$a_1+2a_2+\cdots+sa_s=m-3$$

اکنون مشابه استدلالی که در قضیهٔ ۸ داشتیم، ماکزیمم مقدار $W(e)$ برابر با $[(m-2)^2/4]$ و درنتیجه:

$$W_e(G)\le m/2[(m-2)^2/4]$$

سپاسگزاری

نفر اول این مقاله تحت حمایت دانشگاه کاشان با شماره پژوهانهٔ ۶۸۲۴۱۰/۴ در این تحقیق مشارکت داشته است.

مراجع

[1] Baskar Babujee, J., Senbagamalar, J., *Wiener index of graphs using degree sequence*, Appl. Math. Sci., vol. 88, PP. 4387-4395, 2012.

[2] Dobrynin, A., Entringer, R. , Gutman, I., *Wiener index of trees: theory and applications*, Acta Appl. math., Vol. 66, PP. 211-249, 2001.

[3] Dobrynin, A., Gutman, I., Klavzar, S., Zigert, P., *Wiener index of hexagonal systems*, Acta Appl. math., Vol. 72, PP. 247-294, 2002.

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

[5] Entringer, R.C., Jackson, D. E., Snyder, D. A., *Distance in graphs*, Czech. Math. J., Vol. 26, PP. 283-296, 1976.

[6] Gutman, I., Zhang, S., *Graph connectivity and Wiener index*, Bull. Acad. Serbe Sci. Arts Cl. Math. Natur., Vol. 133 PP. 1-5, 2006.

[7] Gutman, I., *On distances in some bipartite graphs,* Publ. Inst. Math. (Beograd), Vol. 43 PP. 3-8, 1988.

[8] Harary, F., *Status and contrastatus*, Sociometry, Vol. 22, PP. 23-43, 1959.

[9] Hosoya, H., Topological index, a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structure isomers of saturated hydrocarbons, Bull. Chem. Soc. Jpn., Vol. 44, PP. 2332-2339, 1971.

[10] Khadikar, P. V., Joshi, S., Gutman, I., *Estimation of protonation constants ofsalicylhydroxamic acids by means of the Wiener topological index,* J. Serb. chem. Soc., Vol. 61, PP. 89-95, 1996.

[11] Khalifeh, M. H., Yousefi-azari, H., Ashrafi, A. R., Wagner, S., *Some new results on distance-based graph invariants,* European J. Combin., Vol. 30, PP. 1149–1163, 2009.

[12] Klavzar, S., Gutman, I., *Wiener number of vertex-weighted graphs and a chemical application,* Discrete Appl. Math., Vol. 80, PP.73-81, 1997.

[13] Klavzar, S., Rajapakse, A., Gutman, I., *The Szeged and the Wiener index of graphs,* Appl. Math. Lett., Vol. 9, PP. 45-49, 1996.

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

[15] Merris, R., *The distance spectrume of a tree,* J. Graph Theory, Vol. 14, PP. 365-369, 1990.

[16] Merris, *R., Laplacian matices of graphs: A survey,* Linear Algebra Appl., Vol. 197-198, PP. 143-176, 1994.

[17] Nadjafi-arani, M. J., Khodashenas, H., Ashrafi, A. R., *On the differences between Szeged and Wiener indices of graphs,* Discrete Math., Vol. 311, PP. 2233-2237, 2011.

[18] Wiener, H., *Structureal determination of the paraffin boiling ppoints,* J. Am. Chem., Soc., Vol.69, PP. 17-20, 1947.

[19] Yeh, Y. N., Gutman, I., *On the sum of all distances in composite graphs,* Discrete Math., Vol. 135, PP. 359-365, 1994.

[20] Fath-Tabar, G.H., Ashrafi, A.R., *New upper bounds for Estrada index of bipartite graphs,* Linear Algebra Appl., Vol. 435, no, 10, PP. 2607-2611, 2011.

[21] Yarahmadi, Z., Fath-Tabar, G.H., The Wiener, Szeged, PI, vertex PI, the first and second Zagreb indices of N-branched phenylacetylenes dendrimers, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., Vol. 65, no. 1, PP. 201-208, 2011.

[22] Fath-Tabar, G.H., Došlić, T., Ashrafi, A.R., *On the Szeged and the Laplacian Szeged spectrum of a graph,* Linear Algebra Appl., Vol. 433, no, 3, PP. 662-671, 2010.