

UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
FACULTATEA DE MATEMATICĂ ȘI INFORMATICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

COORDONATOR:

Lect. dr. Tache Rozica-Maria

ABSOLVENT:

Procopie Doru-Gabriel

Februarie
2020

UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
FACULTATEA DE MATEMATICĂ ȘI INFORMATICĂ

INDICI TOPOLOGICI

COORDONATOR:
Lect. dr. Tache Rozica-Maria

ABSOLVENT:
Procopie Doru-Gabriel

Februarie
2020

Cuprins

1	Introducere	6
2	Noțiuni introductive	7
2.1	Notății generale	7
2.2	Familii speciale de grafuri. Notății	8
3	Indici topologici	10
3.1	Indicele Wiener	10
3.1.1	Introducere	10
3.1.2	Rezultate preliminare	11
3.1.3	Grafuri extremale	16
3.1.4	Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum	22
3.1.5	Tipuri de indici înrudiți	23
3.2	Indicele distanță - grad	24
3.2.1	Introducere	24
3.2.2	Rezultate preliminare	25
3.2.3	Grafuri extremale	26
3.2.4	Tipuri de indici înrudiți	30
3.3	Indicele Gutman	31
3.3.1	Introducere	31
3.3.2	Rezultate preliminare	32
3.3.3	Grafuri extremale	34
3.4	Indicele Harary	35
3.4.1	Introducere	35
3.4.2	Rezultate preliminare	36
3.4.3	Grafuri extremale	37
3.4.4	Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum	40
3.5	Indicele armonic	41
3.5.1	Introducere	41
3.5.2	Rezultate preliminare	42
3.5.3	Grafuri extremale	45
3.6	Indicele Merrifield-Simmons și Indicele Hosoya	46
3.6.1	Introducere	46
3.6.2	Rezultate preliminare	47
3.6.3	Grafuri extremale	49
3.7	Indicele sumă-conectivitate	51
3.7.1	Introducere	51
3.7.2	Rezultate preliminare	52

3.7.3	Grafuri extremale	55
3.7.4	Alte rezultate. Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum	57
3.8	Indicele Szeged	57
3.8.1	Introducere	57
3.8.2	Rezultate preliminare	58
3.8.3	Grafuri extremale	59
3.9	Indicele Zagreb	60
3.9.1	Introducere	60
3.9.2	Rezultate preliminare	61
3.9.3	Grafuri extremale	64
3.9.4	Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum	68
3.9.5	Tipuri de indici înrudiți	70
4	Indicele Randić	71
4.1	Introducere	71
4.2	Rezultate preliminare	72
4.3	Grafuri extremale	73
4.3.1	Arbore minimal	73
4.3.2	Arbore maximal	74
4.3.3	Grafuri unicyclice	78
4.4	Tipuri de indici înrudiți	83
5	Relații între indici topologici	84
5.1	Relația între indicele Wiener și indicele Szeged	84
5.2	Relația între indicele Wiener și primul indice Zagreb	86
5.3	Relația între indicele Harary și primul indice Zagreb	88
5.4	Relația între indicele armonic și primul indice Zagreb	89
5.5	Relația între indicele armonic și indicele Randić	89
5.6	Relația între primul indice Zagreb și al doilea indice Zagreb	90
6	Concluzii	92
	Index	94

Capitolul 1

Introducere

În cadrul acestei lucrări de licență sunt prezentate o serie de rezultate asupra indicilor topologici, descriptori matematici ce indică gradul de ramificare a unui graf. Noțiunea actuală de graf a avut ca punct de plecare noțiunea de "desen grafic" ce a fost folosită prima oară în chimie spre sfârșitul secolului al XVIII-lea pentru a descrie legăturile de tip carbon-carbon și carbon-hidrogen existente în hidrocarburi.

Vor fi prezentate rezultate despre o serie de indici topologici ce caracterizează anumite proprietăți fizico-chimice ale unor substanțe esențiale în chimia organică. Clasificarea indicilor topologici se realizează în principiu în funcție de contribuția pe care o au aceștia în chimia moleculară, având un rol important în construirea modelelor Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) sau Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR), utilizate pentru a furniza predicții despre proprietățile anumitor compuși chimici. Spre exemplificare, putem menționa un model QSAR format din 13 indici topologici ce are drept scop crearea unui nou imunosupresor. Modelul a fost folosit pentru a extrage dintr-o bază de date foarte variată de compuși chimici numai 5 dintre aceștia, care au fost sintetizați și testați clinic. Unul dintre acești compuși s-a dovedit a fi de 100 de ori mai bun decât orice imunosupresor existent pe piață ([2,4]). Avantajul utilizării unui astfel de model a fost acela că selecția celor 5 substanțe - candidat s-a realizat teoretic, prin calcul, evitându-se astfel costurile imense implicate în sintetizarea tuturor substanțelor din baza de date, la care se adaugă imposibilitatea de a testa clinic un număr atât de mare de compuși chimici.

Printre primii indici topologici introduși se numără indicele creat de chimistul Harry Wiener, ce are un rol important în descrierea dependenței reciproce între punctele de fierbere ale moleculelor hidrocarburilor saturate și nesaturate. Indicele Wiener a fost folosit și în cromatografia de gaze, ce reprezintă o metodă folosită în chimie pentru izolarea și descrierea unor substanțe care pot fi volatilizate fără descompunere sau pentru testarea purității unor substanțe.

Un rol esențial în studiul indicilor topologici îl au chimiștii Ivan Gutman și Milan Randić, ale căror studii au avut la bază ideea de a studia ramificarea unui graf, rezultând o serie de cercetări de referință pentru chimia computațională.

În prezent sunt creați și incluși în modele din ce în ce mai mulți indici topologici care încearcă să ofere soluții cât mai bune pentru a soluționa probleme variate precum distingerea între izomerii unei substanțe date, precizarea gradului de toxicitate pentru o anumită substanță, găsirea unor medicamente eficiente împotriva unor boli grave precum HIV sau tipuri de cancer care sunt generate de viruși, crearea de materiale rezistente la anumiți factori de mediu ce sunt folosite în armată sau industrie ([2,4]).

Capitolul 2

Noțiuni introductive

2.1 Notatii generale

Un graf G este o pereche ordonată $(V(G), E(G))$ formată dintr-o mulțime $V(G)$ de noduri și o mulțime $E(G)$ de legături (numite *muchii*), împreună cu o funcție de incidență π_G care asociază fiecărei legături $e \in E(G)$ o pereche neordonată de noduri (nu neaparat distincte) din $V(G)$. Astfel, pentru $\pi_G(e) = \{u, v\}$ vom spune că e este *incidentă* nodurilor u și v ce sunt numite *capetele* (sau *extremitățile*) muchiei e . De asemenea, vom spune că nodurile u, v sunt *adiacente*, iar nodurile u și v sunt incidente muchiei u, v . Pentru simplitate, vom scrie uv pentru perechea neordonată $\{u, v\}$. De asemenea, vom considera mulțimea de noduri și muchii ale grafului G ca fiind *ordinul*, respectiv *mărimea* grafului G .

O muchie cu capetele identice se numește *bucură*. Dacă două muchii au capetele identice, atunci vom numi *multimuchie* oricare dintre cele două muchii.

Două noduri din graful G se numesc *independente* dacă acestea nu sunt adiacente. O k -mulțime *independentă* a grafului G reprezintă o mulțime de k noduri neadiacente câte două. Vom nota cu $\sigma_G(k)$ numărul de k -mulțimi independente ale grafului G , unde $\sigma_G(0) = 1$.

Două muchii oarecare din graful G se numesc *independente* dacă acestea nu sunt adiacente în graful G . Un k -cuplaj al grafului G reprezintă o mulțime de k muchii care sunt independente două câte două. Vom nota cu $z_G(k)$ numărul de k -cuplaje ale grafului G , unde $z_G(0) = 1$.

Vom nota cu $\delta(G)$, *gradul minim* al nodurilor din $V(G)$ și cu $\Delta(G)$ *gradul maxim*. Un nod $v \in V(G)$ ce are gradul 1 se numește *nod pendant*, iar o muchie $e = xy$ incidentă unui nod pendant se numește *muchie pendantă*. Unui vecin al unui nod pendant îi vom spune *nod suport*. Vom numi un *nod claw*, un nod suport care conține un vecin de grad mai mare sau egal cu 2.

Vom considera grafurile G_1 și G_2 cu $V_1(G)$, $E_1(G)$ și $V_2(G)$, $E_2(G)$ mulțimile lor de noduri și muchii. Spunem că G_1 și G_2 sunt *izomorfe* (și notăm $G_1 \cong G_2$) dacă și numai dacă există o funcție bijectivă $\Psi : V_1 \rightarrow V_2$ care să conserve adiacența nodurilor.

Vom numi graful \overline{G} cu $V(\overline{G})$, $E(\overline{G})$ mulțimea nodurilor, respectiv muchiilor, *graf complementar* al grafului G dacă și numai dacă $V(\overline{G}) = V(G)$ și pentru fiecare pereche x, y în $V(G)$, $xy \in E(\overline{G})$ și $xy \notin E(G)$.

Fie două noduri $x, y \in V(G)$ ale grafului G . Vom defini prin $G - x$ graful obținut din G prin eliminarea nodului x și muchiilor incidente nodului x , iar prin $G - xy$ graful obținut din G prin eliminarea muchiei xy .

Un graf se numește *simplu* dacă nu are bucle sau multimuchii. Un *lanț* este o secvență de noduri în care orice două noduri consecutive în secvență sunt adiacente, cu excepția primului și a ultimului. Dacă primul și ultimul nod al unui lanț sunt de asemenea, adiacente, avem un *ciclu*. Lungimea unui lanț sau a unui ciclu este dat de numărul muchiilor sale. Un lanț/ciclu de lungime k se mai numește k -lanț (notat L_{k+1}), respectiv k -ciclu (notat C_k). Un *lanț/ciclu hamiltonian* este un lanț/ciclu care trece prin toate nodurile grafului.

Pentru $x, y \in V(G)$, vom nota $d_G^V(x, y)$ lungimea maximă a unui lanț de la nodul x la nodul y și $d_G(x, y)$ lungimea minimă a unui lanț de la nodul x la nodul y , numită *distanța* între cele două noduri.

Notăm prin $N_G(w)$ mulțimea nodurilor cu care se învecinează nodul w , cardinalul acestei mulțimi prin $d_G(w)$ și suma distanțelor de la w la toate celelalte noduri cu $D_G(w)$.

Se numește *excentricitatea nodului* $u \in V(G)$ lungimea drumului dintre nodul u și cel mai îndepărtat nod din graf față de u și se va nota $e(u)$.

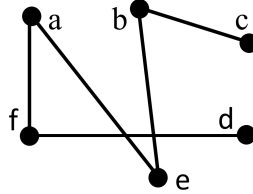


Fig. 1

Exemplu: pentru graful din Fig. 1 avem $e(d) = 5$ și $e(a) = 3$.

Pentru un graf G raza se notează cu $rad(G)$ și este definită ca $rad(G) = \min_{v \in V(G)} e(v)$.

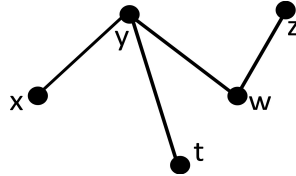


Fig. 2

Exemplu: în Fig. 2 avem un graf G cu raza egală cu $rad(G) = 2$.

Vom nota *diametrul lui G* cu $diam(G)$, definit ca $diam(G) = \max_{v \in V(G)} e(v)$. În Fig. 2 avem $diam(G) = 3$. Lungimea celui mai scurt ciclu din graful G se numește *circumferința grafului G* notată cu $g(G)$.

2.2 Familii speciale de grafuri. Notății

În continuare, vom prezenta principalele clase de grafuri importante în teoria grafurilor.

Vom nota cu $Unicl_n$ mulțimea grafurilor unicele, care au exact n muchii, iar cu $Bicl_n$ mulțimea grafurilor biciclice, ce au exact $n + 1$ muchii.

Spunem că G este un *graf hamiltonian* dacă și numai dacă G conține un ciclu hamiltonian.

Graful G se numește *separabil* dacă și numai dacă conține subgrafuri care să fie conectate între ele printr-un singur nod. Aceste subgrafuri se vor numi *blocuri* (Fig.3).

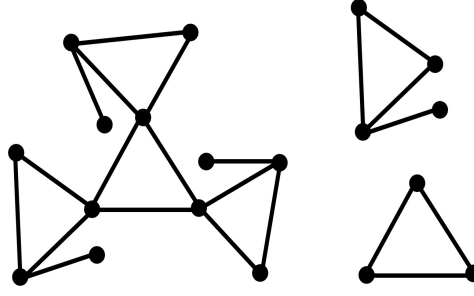


Fig. 3

Un graf este *bipartit* dacă mulțimea sa de noduri poate fi împărțită în două submulțimi disjuncte X și Y astfel încât fiecare muchie să aibă un capăt în X și celălalt în Y . O astfel de partiție $[X, Y]$ se numește o *bipartiție* a grafului G .

Graful G se numește *regulat* dacă și numai dacă toate nodurile sale au același grad.

Un *graf complet* este un graf simplu pentru care oricare două noduri sunt adiacente și va fi notat cu K_n . Dacă $G[X, Y]$ este graf bipartit simplu și fiecare nod din X este adiacent fiecărui nod din Y , atunci G este numit un *graf bipartit complet*, notat cu $K_{n,m}$ un graf bipartit complet, unde $|X| = n$ și $|Y| = m$.

Se numește *stea* un graf bipartit complet $G[X, Y]$ cu $|X| = 1$ sau $|Y| = 1$. Pentru simplitate, vom nota cu S_n mulțimea grafurilor stea cu n noduri.

Un graf este *conex* dacă între oricare două noduri există cel puțin un lanț. În caz contrar graful este *neconex*. Numim *componentă conexă* un subgraf conex maximal, iar numărul de componente conexe ale unui graf G se va nota $comp(G)$.

Graful G se numește *conex n -fold* ($n \geq 2$) dacă și numai dacă este conex și dacă nu există o mulțime de noduri mai mică decât n care să dividă graful. De exemplu, un graf complet K_n este conex n -fold oricare ar fi n . De asemenea, graful conex G se numește *k -conex* dacă și numai dacă acesta rămâne conex după ce am ștergere oricare k noduri din G .

Vom spune că G este un *arbore* dacă și numai dacă G este conex și fără cicluri. Pentru simplitate, vom nota cu \mathcal{T}_n mulțimea arborilor cu n noduri. Un arbore T se numește *arbore molecular* dacă și numai dacă fiecare nod are gradul cel mult 4. Vom nota cu M_n mulțimea arborilor moleculari.

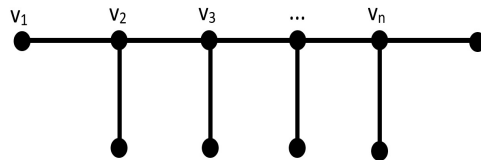


Fig. 4

Vom nota cu \mathcal{T}_{2n} mulțimea tuturor arborilor cu $2n$ noduri, fiecare de grad impar. Un arbore T este numit *caterpillar* dacă arborele obținut din T prin ștergerea tuturor nodurilor pendante este un lanț. Pentru simplitate, vom nota arborele caterpillar cu $2n$ noduri cu F_{2n} . În Fig. 4 este reprezentat un exemplu de graf $F_{2n} \in \mathcal{T}_{2n}$.

Capitolul 3

Indici topologici

3.1 Indicele Wiener

3.1.1 Introducere

Fie un graf G cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor. *Indicele Wiener al grafului G* reprezintă suma distanțelor dintre toate perechiile de noduri ale grafului G ([54]):

$$W(G) = \sum_{x,y \in V(G)} d_G(x,y)$$

Fie un arbore T și o muchie $m = xy$ a arborelui T . Atunci indicele Wiener este:

$$W(T) = \sum_{xy \in E(T)} n_{T_1}^1(xy) n_{T_2}^2(xy),$$

unde $n_{T_1}^1(xy)$, respectiv $n_{T_2}^2(xy)$ reprezintă numărul de noduri ale componentei $T - m$ care conține nodul x , respectiv y .

Indicele Wiener are un rol esențial în construcția compușilor chimici cu anumite proprietăți ce depind de structura moleculară și a apărut în urma cercetării corelației dintre punctele de fierbere ale hidrocarburilor saturate și structura lor moleculară. Studii ulterioare au arătat rolul indicelui Wiener în estimarea inhibării anumitor viruși de către benzimidazoli. Inhibarea virusului gripei de benzimidazoli este puternic corelată cu indicele Wiener. Structurile topologice ale diferitelor benzimidazole pot fi caracterizate convenabil prin intermediul unor indici topologici adecvați. O corelație excelentă este obținută între valorile indicelui Wiener și constantele de inhibiție ale unor benzimidazoli, așa cum este indicat prin analiza de regresie a datelor. S-a studiat relația indicelui Wiener între anumiți compuși chimici și activitatea lor împotriva ulcerului. Au fost determinate valorile indicelui Wiener și au fost identificate intervalele active. Activitatea atribuită fiecărui indice folosind acești descriptori topologici a fost ulterior comparată cu activitățile raportate în vitro împotriva enzimei adenozino-trifosfatază stimulată de o legătură hidrogen-potasiu. S-au obținut predicții cu o precizie de aproximativ 89% în ceea ce privește activitatea în vitro folosind acești indici topologici asociați fiecărui compus chimic.

9

9

Propoziția 5. Fie K_n , graful complet cu n noduri. Atunci $W(K_n) = \frac{n(n-1)}{2}$.

Demonstrație. Luând în considerare că distanța între cele n noduri este 1, atunci obținem:

$$W(K_n) = \binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

□

Notăție. Fie $k, z \in \mathbb{N}$ astfel încât $(k-1)|(z-1)$. Vom nota cu $S(z, k)$ clasa de grafuri ce conține $\frac{z-1}{k-1}$ blocuri și fiecare bloc este un graf complet K_k .

De asemenea, vom nota cu $S_{z,k}^*$ graful obținut prin unirea a $\frac{z-1}{k-1}$ grafuri complete K_{k-1} folosind un nod din fiecare graf complet. Vom nota cu $C_r \times L_t$ graful obținut prin conectarea unui nod al unui ciclu C_r cu un nod al unui lanț L_t .

Clasa de grafuri cu z noduri și circumferință k o vom nota cu $G(z, k)$. Este evident că $S(z, k) \subseteq G(z, k)$ și că $S_{z,k}^*$ este unicul graf în $S(z, k)$ cu diametrul 2.

În Fig. 6 avem reprezentat $S(7, 3)$, $S_{7,3}^*$ și $C_3 \times P_4$.

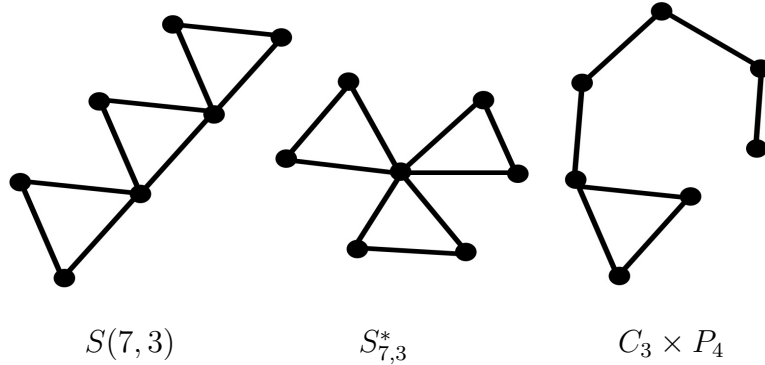


Fig. 6

Lema 1. ([18]) Fie un graf G cu z noduri, t muchii și cu $g(G) \leq s$. Atunci $t \leq \frac{(z-1)s}{2}$ cu egalitate dacă și numai dacă $(s-1)|(z-1)$ și $G \in S(z, s)$.

Demonstrație. Cazul $z = 1$ este în mod evident adevărat. Dacă $1 < z \leq s$ și $G \in S(z, s)$, atunci

$$t \leq \frac{z(z-1)}{2} \leq \frac{(z-1)s}{2}.$$

Egalitatea este valabilă atunci când G este un graf complet K_s . Prin urmare, lema este adevărată doar pentru $z \leq s$.

Presupunem că există z' astfel încât $z' > s$ și lema este adevărată pentru orice $z < z'$. În acest caz, lema va fi adevărată și pentru z' . Fie $G \in S(z', s)$.

Cazul 1. Cum G este neconex, fie componentele $G_1, G_2, G_3 \dots G_p$ ($p \geq 2$) astfel încât $|V(G_i)| = n_i$. Atunci $n_1 + \dots + n_p = z', n_i < z'$ și $G_i \in G(n_i, s)$ ($i = 1, \dots, p$).

Prin urmare, luând în considerare ipoteza noastră

$$\begin{aligned} t &= |E(G)| = |E(G_1)| + |E(G_2)| + \dots + |E(G_p)| \\ &\leq \frac{(n_1-1)s}{2} + \frac{(n_2-1)s}{2} + \dots + \frac{(n_p-1)s}{2} = \frac{(z'-p)s}{2} < \frac{(z'-1)s}{2}. \end{aligned}$$

Cazul 2. Dacă luăm în considerare că G este conex, dar nu este conex 2-fold, atunci vom nota componentele conexe ale lui G cu G_1, G_2 astfel încât $G_2 = G - G_1$, $|V(G_1)| = n_1$, $|V(G_2)| = n_2$, $z' = n_1 + n_2 - 1$ ($n_1 < z'$, $n_2 < z'$), $G_1 \in S(n_1, s)$ și $G_2 \in S(n_2, s)$.

Luând în considerare ipotezele noastre atunci

$$t = |E(G)| = |E(G_1)| + |E(G_2)| \leq \frac{(n_1 - 1)s}{2} + \frac{(n_2 - 1)s}{2} = \frac{(z' - 1)s}{2}.$$

cu egalitate dacă și numai dacă $(s - 1)|(n_1 - 1)$ și $(s - 1)|(n_2 - 1)$. Dar atunci și $(s - 1)|(z' - 1)$

Cazul 3. Fie G un graf conex 2-fold. Vom arăta că G are un nod P' de grad mai mic sau egal cu $\frac{s}{2}$. Dacă nu există asemenea nod, atunci $d_G(P') \geq k + 1$ pentru orice nod P' dacă $s = 2k$ sau $s = 2k + 1$. Dacă $s = 2k$, atunci $|V(G)| > 2k$, caz în care dacă $|V(G)| \geq 2k + 1$, atunci G conține un ciclu de lungime $t \geq 2k + 2$, sau dacă $|V(G)| = 2k + 1$, atunci G conține un lanț hamiltonian și prin urmare conține un ciclu de lungime $2k + 1$. Dacă $s = 2k + 1$, atunci $|V(G)| > 2k + 1$ și G conține un ciclu de lungime $t \geq 2k + 2$. Așadar, am obținut o contradicție în fiecare din cazurile de mai sus.

În acest caz, dacă $d_G(P') \leq \frac{s}{2}$ și fie $G' = G - P'$, atunci $G' \in S(z' - 1, s)$, G' este conex și $d_G(P') \geq 2$. Folosind ipotezele, obținem că:

$$|E(G)| = |E(P')| + |E(G')| < \frac{s}{2} + \frac{(z' - 2)s}{2} = \frac{(z' - 1)s}{2}$$

Astfel, demonstrația este încheiată. □

Lema 2. ([35]) Fie G un graf conex astfel încât G' și G'' sunt două subgrafuri conexe ale lui G care au un singur nod comun w . Dacă $r_1 = |V(G')|$ și $r_2 = |V(G'')|$, atunci:

$$W(G) = W(G') + W(G'') + (r_1 - 1) \sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(w, v) + (r_2 - 1) \sum_{u \in V(G')} d_{G'}(w, u)$$

Demonstrație. Din definiția indicelui Wiener rezultă:

$$\begin{aligned} W(G) &= \sum_{u, v \in V(G)} d_G(u, v) = \sum_{u, v \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u, v) + \sum_{u, v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(u, v) \\ &\quad + \sum_{u \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u, w) + \sum_{v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(v, w) + \sum_{\substack{u \in V(G') \setminus \{w\} \\ v \in V(G'') \setminus \{w\}}} d_G(u, v) \\ &= \sum_{u, v \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u, v) + \sum_{u, v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(u, v) + \sum_{u \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u, w) + \\ &\quad \sum_{v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(v, w) + \sum_{\substack{u \in V(G') \setminus \{w\} \\ v \in V(G'') \setminus \{w\}}} d_{G'}(u, w) + d_{G''}(w, v) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= W(G') + W(G'') + \sum_{\substack{u \in V(G') \setminus \{w\} \\ v \in V(G'') \setminus \{w\}}} d_{G'}(u, w) + d_{G''}(w, v) \\
&= W(G') + W(G'') + (r_2 - 1)d_{G'}(x_1, w) + \cdots + (r_2 - 1)d_{G'}(x_{r_1-1}, w) \\
&\quad \underbrace{\sum_{v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(w, v) + \cdots + \sum_{v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(w, v)}_{\text{de } r_1 - 1 \text{ ori}} \\
&= W(G') + W(G'') + (r_2 - 1) \sum_{u \in V(G')} d_{G'}(w, u) + (r_1 - 1) \sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(w, v)
\end{aligned}$$

□

Lema 3. ([35]) Fie două numere întregi pozitive z și k astfel încât $z > k$. Atunci:

$$W(C_k \times L_{z-k}) = p^3 + \binom{z-2p+2}{3} + \frac{(z-2p)(z-2p+1)(2p-1)}{2} + (z-2p)p^2,$$

dacă $k = 2p$ ($p \geq 2$).

$$W(C_k \times L_{z-k}) = \frac{(p+1)(2p+1)p}{2} + \binom{z-2p+1}{3} + (z-2p-1)(zp-p^2+p),$$

dacă $k = 2p+1$ ($p \geq 1$).

Demonstrație. Presupunem că w este unicul nod din $C_k \times L_{z-k}$ cu gradul 3. Vom nota cu $G' = C_k$ și $G'' = L_{z-k+1}$. Deoarece G' și G'' sunt două subgrafuri conexe ale grafului $C_k \times L_{z-k}$, acestea au un singur nod comun, w , iar $G' \cup G'' = C_k \times L_{z-k}$. Din Lema 2, știm că:

$$W(G) = W(G') + W(G'') + (r_2 - 1) \sum_{u \in V(G')} d_{G'}(w, u) + (r_1 - 1) \sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(w, v).$$

Cazul 1. Considerând $k = 2p$, din Propoziția 2 avem:

$$W(G') = W(C_{2p}) = \frac{(2p)^3}{8}.$$

Conform Propoziției 1, deducem că:

$$W(G'') = W(L_{z-2p+1}) = \binom{z-2p+2}{3}$$

și $r_1 = |V(G')| = 2p$, $r_2 = |V(G'')| = z - 2p + 1$,

$$\sum_{u \in V(G')} d_{G'}(w, u) = 2(1 + 2 + 3 + \cdots + p - 1) + p = p(p-1) + p = p^2$$

$$\sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(w, v) = 1 + 2 + 3 + \cdots + z - 2p = \frac{(z-2p)(z-2p+1)}{2}$$

Conform Lemei 2, deducem:

$$W(C_{2p} \times L_{z-2p+1}) = p^3 + \binom{z-2p+2}{3} + \frac{(z-2p)(z-2p+1)(2p-1)}{2} + (z-2p)p^2$$

Cazul 2. Pentru $k = 2p + 1$, folosind Propoziția 3 obținem:

$$W(G') = \frac{(p+1)(2p+1)p}{2}$$

Conform Propoziției 1, deducem că:

$$W(G'') = \binom{z-2p+1}{3}$$

și $r_1 = |V(G')| = 2p + 1$, $r_2 = |V(G'')| = z - 2p$,

$$\sum_{u \in V(G')} d_{G'}(w, u) = 2(1 + 2 + 3 + \dots + p) = 2 \frac{p(p+1)}{2} = p(p+1)$$

$$\sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(w, v) = 1 + 2 + 3 + \dots + z - 2p - 1 = \frac{(z-2p-1)(z-2p)}{2}$$

Conform Lemei 2, deducem:

$$W(C_k \times L_{z-k}) = \frac{(p+1)(2p+1)p}{2} + \binom{z-2p+1}{3} + (z-2p-1)(zp - p^2 + p)$$

□

3.1.3 Grafuri extremale

Teorema 1. ([35]) Fie un graf $G \in G(z, k)$, unde $z > k$. Atunci

$$z(z-1) - \frac{(z-1)k}{2} \leq W(G),$$

$$W(G) \leq p^3 + \binom{z-2p+2}{3} + \frac{(z-2p)(z-2p+1)(2p-1)}{2} + (z-2p)p^2,$$

dacă $k = 2p$ ($p \geq 2$),

$$W(G) \leq \frac{(p+1)(2p+1)p}{2} + \binom{z-2p+1}{3} + (z-2p-1)(zp - p^2 + p),$$

dacă $k = 2p + 1$ ($p \geq 1$).

Limita inferioară este atinsă dacă și numai dacă $(k-1)|(z-1)$ și $G \cong S_{z,k}^*$, iar limita superioară este atinsă dacă și numai dacă $G \cong C_k \times L_{z-k}$.

Demonstrație. Presupunem că numărul de muchii al grafului G este m și diametrul lui G este d . În acest caz, indicele Wiener al grafului G se poate scrie astfel:

$$W(G) = \sum_{t=1}^d t \cdot p_G(t),$$

unde $p_G(t)$ reprezintă numărul de perechi de noduri la distanța t . Este evident că numărul de perechi de noduri la distanța 1 reprezintă numărul de muchii ale grafului G și anume m . Prin urmare

$$\begin{aligned} W(G) &= m + \sum_{t=2}^d t \cdot p_G(t) \geq m + 2 \sum_{t=2}^d t \cdot p_G(t) = m + 2 \left[\sum_{t=1}^d t \cdot p_G(t) - p_G(1) \right] \\ &= m + 2 \left[\binom{z}{2} - m \right] = m - 2m + 2 \frac{z!}{2!(z-2)!} = z(z-1) - m \geq z(z-1) - \frac{(z-1)k}{2} \end{aligned}$$

Este evident că prima inegalitate de mai sus devine egalitate dacă și numai dacă diametrul grafului G este 2. Conform Lemei 1, a doua inegalitate de mai sus devine egalitate dacă și numai dacă $(k-1)|(z-1)$ și $G \in S(z, k)$. Luând în considerare că $S_{z,k}^*$ este unicul graf în $S(z, k)$ cu diametrul 2, atunci $W(G) \geq z(z-1) - \frac{(z-1)k}{2}$, egalitatea având loc dacă și numai dacă $(k-1)|(z-1)$ și $G \cong S_{z,k}^*$.

Limita superioară a lui $W(G)$ o vom demonstra folosind inducția după z . Fie H un graf cu indicele Wiener maxim în clasa $G(z, k)$ și C un ciclu de lungime k în H .

Luând în considerare că $z > k$ și că H are valoarea indicelui Wiener maximă, atunci există un nod $u \in V(H) \setminus V(C)$ astfel încât nodul u să fie de grad 1 în H . În acest caz putem împărți perechile de noduri ale lui H în două categorii: cele care nu îl conțin pe u și cele care îl conțin pe u . Suma distanțelor între perechile de noduri din prima categorie reprezintă indicele Wiener al lui $H - u$. Putem scrie că:

$$W(H) = W(H - u) + \sum_{x \in V(H)} d_H(x, u)$$

Fie v nodul pendant al grafului $C_k \times L_{z-k}$, atunci

$$\begin{aligned} W(C_k \times L_{z-k}) &= W(C_k \times L_{z-k} - v) + \sum_{y \in V(C_k \times L_{z-k})} d_{C_k \times L_{z-k}}(y, v) \\ &= W(C_k \times L_{z-k-1}) + \sum_{y \in V(C_k \times L_{z-k})} d_{C_k \times L_{z-k}}(y, v) \end{aligned}$$

Se observă că $H - u \in G(z-1, k)$ și $C_k \times L_{z-k-1} \in G(z-1, k)$. Folosind ipoteza de inducție, deducem că $W(H - u) \leq W(C_k \times L_{z-k-1})$.

De asemenea, avem $\sum_{x \in V(H)} d_H(x, u) \leq \sum_{y \in V(C_k \times L_{z-k})} d_{C_k \times L_{z-k}}(y, v)$, luând în considerare că L_{z-k} este un lanț.

Deci $W(H) \leq W(C_k \times L_{z-k})$, egalitatea având loc dacă și numai dacă $H \cong C_k \times L_{z-k}$. Din Lema 3 rezultă concluzia. \square

Notăție. Vom nota cu G^* , graful cu diametrul $3 \leq d \leq 4$ și cu $n \geq d+2$ noduri care îndeplinește proprietatea că $d_{G^*}(x, y) = 1$ sau $d_{G^*}(x, y) = 2$ pentru orice noduri $x \in V(G^*) \setminus V(L_{d+1})$ și $y \in V(G^*) (y \neq x)$. În Fig. 7 este reprezentat un astfel de graf.

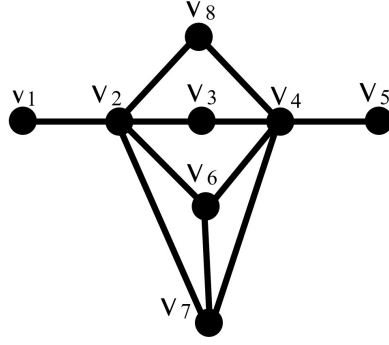


Fig. 7

Teorema 2. ([14]) Dacă vom considera un graf conex G care are $n \geq 2$ noduri, m muchii și diametrul d . Atunci

$$W(G) \geq \frac{d(d-1)(d-2)}{6} + (n-1)n - m, \quad (1)$$

$$W(G) \leq \frac{n(n-1)d}{2} - \frac{d(d-1)(d-2)}{3} + (1-d)m \quad (2)$$

În particular, prima egalitate are loc dacă și numai dacă G este un graf cu diametrul cel puțin 2 sau $G \cong L_n$ sau $G \cong G^*$, iar a doua egalitate are loc dacă și numai dacă G este un graf cu diametrul cel puțin 2 sau $G \cong L_n$.

Demonstrație. Pornim de la ipoteza că G are diametrul d și lanțul L_{d+1} aparține grafului G , deducem că există $\frac{n(n-1)}{2}$ perechi de noduri la distanță cel puțin 1, iar numărul perechilor de nodurilor la distanță 1 este m . Știind că $W(L_n) = \frac{(n-1)n(n+1)}{6}$, atunci:

$$W(G) \geq W(L_{d+1}) - d + m + \left[\frac{n(n-1)}{2} - \frac{d(d+1)}{2} - (-d + m) \right] 2, \quad (3)$$

$$W(G) \leq W(L_{d+1}) - d + m + \left[\frac{n(n-1)}{2} - \frac{d(d+1)}{2} - (-d + m) \right] d \quad (4)$$

Dacă inegalitatea (2) devine egalitate, atunci inegalitatea (4) devine egalitate dacă și numai dacă diametrul grafului G este cel mult 2. Dacă $d \geq 3$, atunci vom considera $n \geq d+1$. Astfel, se disting două cazuri:

Cazul 1. $n = d+1$

În acest caz, este evident că $G \cong L_n$.

Cazul 2. $n \geq d+2$

Fie L_{d+1} lanțul cu $d+1$ noduri conținut în graful G . Din egalitatea relației (4), rezultă că pentru orice nod $x \in V(G) \setminus V(L_{d+1})$ și $y \in V(L_{d+1})$ ($y \neq x$), $d_G(x, y) = 1$ sau $d_G(x, y) = 2$. Deci, diametrul grafului G este cel puțin egal cu 4 și $G \cong G^*$.

Dacă considerăm inegalitatea (3) ca fiind egalitate, atunci inegalitatea (5) devine de asemenea egalitate dacă și numai dacă diametrul grafului G este cel mult 2. Dacă $d \geq 3$, atunci inegalitatea (5) devine egalitate dacă și numai dacă $\frac{n(n-1)}{2} - \frac{(d+1)d}{2} - (-d + m) = 0$. Astfel,

$$\frac{n(n-1)}{2} - \frac{d(d+1)}{2} = -d + m = |E(G) \setminus E(L_{d+1})|. \quad (5)$$

În acest caz, $m \geq d$. Dacă $d = m$ atunci $n - 1 = d$ și $G \cong L_n$, iar pentru $m > d$, din relația (5), rezultă că există un nod $x \in V(G) \setminus V(L_{d+1})$ astfel încât x este adiacent cu toate nodurile rămase. Contradicția se obține cunoscând că diametrul grafului G este cel mult 2.

În concluzie, observăm că inegalitatea (1) devine egalitate dacă și numai dacă G are diametrul cel mult 2, $G \cong L_n$ sau $G \cong G^*$, iar inegalitatea (3) devine egalitate dacă și numai dacă G este un graf cu diametrul cel mult 2 sau $G \cong L_n$. \square

În continuare, vom arăta care este valoarea indicelui Wiener pentru unele clase de arbori.

Teorema 3. ([35]) *Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Atunci*

$$(n - 1)^2 \leq W(T) \leq \frac{n(n - 1)(n + 1)}{6},$$

unde valoarea minimă este obținută dacă și numai dacă $T \cong S_n$ și cea maximă dacă și numai dacă $T \cong L_n$.

Demonstrație

Fie $T \in \mathcal{T}_n$, cu mulțimea de noduri $V(T)$. Atunci în suma $\sum_{x,y \in V(T)} d_T(x, y)$ sunt exact $2(n - 1)$ termeni care sunt 1 și restul termenilor care nu sunt 0 sunt mai mari sau egali cu 2. Dacă graful T este un graf stea atunci toți termenii diferă de 0 (pentru $x = y$) și unul dintre ei este egal 2. Dacă T nu este un graf stea, atunci există în sumă cel puțin un termen egal cu 3 și prin urmare minimul dorit este obținut doar pentru un arbore $K_{1,n-1}$. Pentru a găsi maximul din această sumă trebuie să arătăm că $D_T(x)$ atinge valoarea maximă luând în considerare toată mulțimea de noduri terminale ale unui arbore, doar când arborele este un lanț și x este unul din nodurile sale terminale. Dacă L este un lanț cu n noduri și x este unul din nodurile sale terminale, atunci $D_L(x) = 1 + 2 + \dots + (n - 1)$.

Dacă T este un arbore și x este un nod terminal astfel încât $e(x) = d$, atunci va exista cel puțin un nod la distanța 1, 2, ..., d de x . Din definiția sumei $D_T(x)$, rezultă că:

$$D_T(x) = 1 + 2 + \dots + d + d_T(x, y_1) + \dots + d_T(x, y_{n-1-d})$$

unde $d_T(x, y_1), \dots, d_T(x, y_{n-1-d}) \leq d$.

Comparând această sumă cu expresia lui $D_T(x)$ în cazul lanțului L , vom găsi că valoarea maximă a sumei $D_T(x)$ este atinsă doar când $d = n - 1$. Acest lucru se întâmplă doar dacă T este un lanț și x este unul dintre nodurile sale terminale.

Aplicăm inducția după n pentru demonstra că $\sum_{x,y \in V(T)} d_T(x, y)$ are valoarea maximă pentru un lanț.

Pentru $1 \leq n \leq 3$ proprietatea este imediată deoarece în acest caz orice arbore cu n noduri este un lanț.

Presupunem că proprietatea este adevărată pentru orice arbore T cu $n - 1$ noduri și fie T_1 un arbore cu n noduri care fac parte din mulțimea V . Dacă u este un nod pendent în arborele G , atunci

$$\sum_{x,y \in V(T_1)} d_{T_1}(x, y) = 2D_{T_1}(u) + \sum_{x,y \in V(T)} d_T(x, y),$$

unde $V(T_1) = V(T) - u$.

Astfel, $D_{T_1}(u)$ este maximă doar dacă T_1 este un lanț și u este unul din nodurile terminale ale acestuia. Folosind ipoteza de inducție pentru un subarbore cu $n - 1$ noduri, suma $\sum_{x,y \in V(T)} d_T(x, y)$ este maximă. \square

Teorema 4. ([48]) Fie $T \in \mathcal{T}_{2n}$ cu valoarea indicelui Wiener maximă. Atunci T este un arbore caterpilar.

Demonstrație Prin reducere la absurd, fie F arborele cu valoarea maximă a indicelui Wiener, ce nu este un arbore caterpilar. În acest caz, numărul de noduri ale lui F este mai mare sau egal cu 4. Vom nota cu $L = u_1 u_2 \dots u_k$ ($k > 3$), cel mai lung lanț din F . Cum F nu este un arbore caterpilar, atunci există un număr z ($1 < z < k$) și un nod v ($v \notin L$) astfel încât $vu_z \in E(F)$ și $N_F(v) = \{u_z, t_1, t_2, \dots, t_r\}$ ($r \geq 1$).

Fără a pierde generalitatea, vom considera F_1 ca fiind subarboarele care conține nodul u_z în $F - \{u_z u_{z+1}, u_z v\}$, F_2 ca fiind subarboarele care conține nodul u_{z+1} și F_3 ca fiind subarboarele care conține nodul v . Notăm $X = V(F_3) \setminus \{v\}$. Atunci $V(F) = V(F_1) \cup V(F_2) \cup X \cup \{v\}$, deci că $V(F_1) > V(F_2)$ (în caz contrar putem considera $F - \{u_z u_{z-1}, u_z v\}$).

Putem construi arborele F' , pornind de la arborele F prin ștergerea muchiilor vt_1, vt_2, \dots, vt_r din F și adăugând muchiile $u_k t_1, u_k t_2, \dots, u_k t_r$.

Șirul gradelor lui F' îndeplinește proprietățile unui arbore, $V(F) = V(F')$ și avem relațiile:

$$\begin{aligned}
\sum_{x,y \in V(X)} d_F(x, y) &= \sum_{x,y \in V(X)} d_{F'}(u, v), \quad \sum_{x,y \notin V(X)} d_F(x, y) = \sum_{x,y \notin V(X)} d_{F'}(x, y), \\
\sum_{x \in V(X)} d_F(v, x) + \sum_{x \in V(X)} d_F(u_k, x) &= \sum_{x \in V(X)} d_{F'}(v, x) + \sum_{x \in V(X)} d_{F'}(u_k, x), \\
\sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_1) \cup V(F_2) \setminus \{u_k\}}} d_F(x, y) &= \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_1) \cup V(F_2) \setminus \{u_k\}}} (d_F(x, v) + d_T(v, y)) \\
&= \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in F_1}} [d_F(x, v) + d_F(v, y)] + \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_2) \setminus \{u_k\}}} [d_F(x, v) + d_F(v, y)] \\
&\leq \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_1)}} [d_{F'}(x, u_k) + d_{F'}(u_k, y) - d_L(u_k, u_z) + 1] \\
&\quad + \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_2) \setminus \{u_k\}}} [d_{F'}(x, u_k) + d_{F'}(u_k, y) - d_L(u_k, u_z) - 1] \\
&= \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_1) \cup V(F_2) \setminus \{u_k\}}} [d_{F'}(u_k, x) + d_{F'}(u_k, y)] - |V(X)|(d_L(u_k, u_z) - 1)[|V(F_1)| - |V(F_2)|] \\
&< \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_1) \cup V(F_2) \setminus \{u_k\}}} d_{F'}(x, y).
\end{aligned}$$

Conform ipotezei, știm că

$$\sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_1) \cup V(F_2) \setminus \{u_k\}}} d_F(x, y) > \sum_{\substack{x \in V(X) \\ y \in V(F_1) \cup V(F_2) \setminus \{u_k\}}} d_{F'}(x, y)$$

pentru că arborele F are valoarea maximă a indicelui Wiener, obținându-se contradicția ce încheie demonstrația. \square

Teorema 5. (*[40]*) Fie $T \in \mathcal{T}_{2n}$. Atunci

$$W(T) \leq W(F_{2n}),$$

cu egalitate dacă și numai dacă $T \cong F_{2n}$.

Demonstrație. Vom considera T_M arborele cu indicele Wiener maxim în mulțimea de arbori \mathcal{T}_{2n} . Conform Teoremei 4, T_M este un arbore caterpillar.

Fie $L = l_0 l_1 \dots l_r l_{r+1}$ lanț maximal în T_M . Presupunând că $T_M \neq F_{2n}$, atunci există un nod l_p ($1 \leq p \leq r$) astfel încât $d_{T_M}(l_p) = 2t + 1 \geq 5$. Fie $l_{p-1}, l_{p+1}, x_1, x_2, \dots, x_{2t-1}$ vecinii nodului l_p . Construim arborele $T' \neq T_M$ astfel încât $T' \in \mathcal{T}_{2n}$ și $W(T') > W(T_M)$. Se vor elimina nodurile pendante x_{2t-1} , muchiile $l_p x_1, l_p x_2, \dots, l_p x_{2t-2}$ din T_M , se va despărți nodul l_p în două noduri adiacente l'_p, l''_p și se vor adăuga muchii între nodurile $x_1, x_2, \dots, x_{2t-3}$ și l'_p, x_{2t-2} și l''_p . Arborele astfel obținut îl vom nota cu T' . În Fig. 8 se află transformarea aplicată arborelui T_M , obținându-se arborele T' .

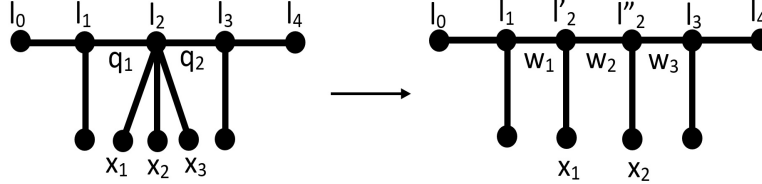


Fig. 8

Este evident că $T' \in \mathcal{T}_{2n}$. Vom nota cu q_1, q_2, \dots, q_{r-1} și w_1, w_2, \dots, w_r muchiile consecutive ale lanțului $L_1 = l_1 l_2 \dots l_p \dots l_r$ din T_M și lanțului $L_2 = l_1 l_2 \dots l'_p l''_p \dots l_r$ din T_M pornind de la l_1 până la l_r . Observăm că T_M are $|E(T_M)| - (r - 1) = (2n - 1) - (r - 1) = 2n - r$ muchii pendante și T' are $|E(T')| - r = (2n - 1) - r$ muchii pendante. Calculăm indicele Wiener:

$$\begin{aligned} W(T_M) &= \sum_{e \in E(T_M)} n_{T_M}^1(e) n_{T_M}^2(e) = \sum_{e=\text{pendantă}} n_{T_M}^1(e) n_{T_M}^2(e) + \sum_{e \neq \text{pendantă}} n_{T_M}^1(e) n_{T_M}^2(e) \\ &= (2n - r)(2n - 1) + \sum_{k=1}^{r-1} n_{T_M}^1(e_k) n_{T_M}^2(e_k) \end{aligned}$$

$$W(T') = \sum_{e \in E(T')} n_{T'}^1(e) n_{T'}^2(e) = \sum_{e=\text{pendantă}} n_{T'}^1(e) n_{T'}^2(e) + \sum_{e \neq \text{pendantă}} n_{T'}^1(e) n_{T'}^2(e)$$

$$= (2n - r - 1)(2n - 1) + \sum_{k=1}^r n_{T'}^1(w_k) n_{T'}^2(w_k)$$

Este ușor de observat că $n_{T_M}^1(q_j) \cdot n_{T_M}^2(q_j) = n_{T'}^1(w_j) \cdot n_{T'}^2(w_j)$ pentru orice $j \in \{1, 2, \dots, p-1\}$ și $n_{T_M}^1(q_r) \cdot n_{T_M}^2(q_r) = n_{T'}^1(w_{r+1}) \cdot n_{T'}^2(w_{r+1})$ pentru orice $r \in \{p, p+1, \dots, r-1\}$. Din calculul indicilor Wiener asociați arborilor T_M și T' obținem:

$$\begin{aligned} W(T') - W(T_M) &= n_{T'}^1(w_p) \cdot n_{T'}^2(w_p) - (2n - 1) \\ &= n_{T'}^1(w_p) \cdot n_{T'}^2(w_p) - n_{T'}^1(w_p) - n_{T'}^2(w_p) + 1 \quad (\text{deoarece } n_{T_1'}(w_p) + n_{T_2'}(w_p) = 2n) \\ &= [n_{T'}^1(w_p) - 1][n_{T'}^2(w_p) - 1] > 0 \quad (\text{deoarece } n_{T_1'}(w_p) > 1, n_{T_2'}(w_p) > 1). \end{aligned}$$

Dar acest fapt contrazice alegerea arborelui T_M , ceea ce încheie demonstrația. \square

3.1.4 Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum

Teorema 6. ([14]) Fie G graf conex de ordinul n , $n \geq 2$ și diametru d . Atunci

$$W(G) + W(\overline{G}) \geq \frac{3(n-1)n}{2} + \frac{d(d-1)(d-2)}{6}. \quad (6)$$

Egalitate este valabilă dacă și numai dacă G este un graf care are diametrul 2 sau $G \cong L_n$ sau G este izomorf cu un graf G^* și \overline{G} are diametrul 2.

Demonstrație. Folosim inegalitatea (1) din Teorema 2, obținem relația

$$W(G) + W(\overline{G}) \geq 2n(n-1) - (m + \overline{m}) + \frac{d(d-1)(d-2)}{6} + \frac{\overline{d}(\overline{d}-1)(\overline{d}-2)}{6} \quad (7)$$

unde \overline{m} și \overline{d} sunt numărul de muchii, respectiv diametrul lui \overline{G} . Din $m + \overline{m} = \frac{n(n-1)}{2}$ și $(\overline{d}-2)(\overline{d}-1)\overline{d} \geq 0$, vom obține relația (6) folosind relația (7). Vom presupune că toate inegalitățile de mai sus sunt egalități. Atunci, din egalitatea (7) rezultă că G este un graf care are diametrul 2 sau $G \cong L_n$ sau G este izomorf cu un graf G^* și \overline{G} este un graf care are diametrul 2 sau $\overline{G} \cong L_n$ sau \overline{G} este izomorf cu un graf G^* . Din egalitatea (6) obținem că $\overline{d} \leq 2$. Deci graful G are diametrul 2 sau $G \cong L_n$ sau G este izomorf cu un graf G^* și \overline{G} este un graf care are diametrul 2.

Dacă G și \overline{G} sunt două grafuri care au diametrul 2, atunci $d = \overline{d} = 2$ și

$$W(G) + W(\overline{G}) = n(n-1) - m + n(n-1) - \overline{m} = \frac{3}{2}n(n-1)$$

pentru că $m + \overline{m} = \frac{n(n-1)}{2}$.

Dacă $G \cong L_n$ și \overline{G} este un graf care are diametrul 2, atunci pentru $\overline{d} = 2$ obținem

$$W(G) + W(\overline{G}) = \frac{n(n-1)(n+1)}{6} + n(n-1) - \overline{m} = \frac{3(n-1)n}{2} + \frac{(n-1)(n-2)(n-3)}{6}.$$

Dacă G este izomorf cu un graf G^* și \overline{G} este un graf care are diametrul 2, atunci pentru $\overline{d} = 2$ și $d = 3$ obținem

$$W(G) + W(\overline{G}) = (n-1)n + 1 - m + (n-1)n - \overline{m} = \frac{3(n-1).n}{2} + (n-1)n + 1,$$

și pentru $\bar{d} = 2$ și $d = 4$ obținem

$$W(G) + W(\bar{G}) = (n-1)n - m + 4 + (n-1)n - \bar{m} = \frac{3(n-1)n}{2} + 4.$$

□

Teorema 7. ([14]) Fie G un graf conex de ordinul n , $n \geq 2$ cu graful complementar \bar{G} conex. Dacă $t = \max\{d, \bar{d}\}$, atunci:

$$W(G) + W(\bar{G}) \leq \frac{(t+1)n(n-1)}{2} - \frac{(k-2)(k-1)k}{3} \quad (8)$$

unde d și \bar{d} reprezintă diametrul lui G , respectiv \bar{G} . Egalitatea este valabilă dacă și numai dacă G și \bar{G} au diametrul 2.

Demonstrație. Vom începe prin a folosi inegalitatea (2), luând în calcul că grafurile G și \bar{G} sunt două grafuri conexe cu $d, \bar{d} \geq 2$.

Fără a pierde generalitatea, putem spune că $d \geq \bar{d}$ și că $d = k$. Dacă \bar{m} este numărul de muchii al grafului \bar{G} , atunci

$$\begin{aligned} W(G) + W(\bar{G}) &\leq \frac{(n-1)n}{2}(\bar{d} + d) - \frac{d(d-1)(d-2)}{3} - \frac{\bar{d}(\bar{d}-1)(\bar{d}-2)}{3} \\ &\quad + (1-d)m - \bar{m}(\bar{d}-1) \\ &= \frac{(d + \bar{d} + 1)n(n-1)}{2} - \frac{d(d-1)(d-2)}{3} - \frac{\bar{d}(\bar{d}-1)(\bar{d}-2)}{3} - dm - \bar{d}\left(\frac{n(n-1)}{2} - m\right) \end{aligned} \quad (9)$$

pentru că $m + \bar{m} = \frac{n(n-1)}{2}$

$$\begin{aligned} &= \frac{n(d+1)(n-1)}{2} - \frac{d(d-1)(d-2)}{3} - \frac{\bar{d}(\bar{d}-1)(\bar{d}-2)}{3} - m(d - \bar{d}) \\ &\leq \frac{n(k+1)(n-1)}{2} - \frac{k(k-1)(k-2)}{3} \end{aligned} \quad (10)$$

pentru că $d \geq \bar{d}$ și că $d = k$.

Dacă presupunem că inegalitatea (8) este egalitate, atunci inegalitatea (9) și (10) sunt de asemenea egalități.

Din egalitatea (9), deducem că G este fie un graf cu diametrul cel mult 2, fie $G \cong L_n$ și \bar{G} este un graf cu diametrul cel mult 2, fie $\bar{G} \cong L_n$.

Din egalitatea (10), vom observa că trebuie să avem $k = d = \bar{d}$ și $\bar{d} \leq 2$ pentru că grafurile G și \bar{G} au diametrul 2.

Așadar, egalitatea (8) este valabilă dacă și numai dacă G și \bar{G} au diametrul 2.

□

3.1.5 Tipuri de indici înrudiți

Indicele de polaritate Wiener

Fie grafurile G , un graf conex. Indicele de polaritate Wiener al grafului G notat prin $W_P(G)$ este definit ([54]) ca:

$$W_P(G) = |\{\{u, v\} | d_G(u, v) = 3, u, v \in V(G)\}|$$

Indicele de polaritate Wiener a fost introdus pentru a descrie moleculele aciclice. Folosind indicele de polaritate Wiener, Lukovits și Linert ([6]) au demonstrat o serie de relații structură-proprietate pentru hidrocarburi aciclice.

Indicele Hyper-Wiener

Fie graful G , conex molecular. *Indicele Hyper-Wiener al grafului G* îl vom nota cu $HW(G)$ și îl vom defini ([46]) ca:

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

Din punct de vedere chimic, Indicele Hyper-Wiener codifică „compactitatea” unei structuri moleculare. Indicele Hyper-Wiener este utilizat ca descriptor pentru a prezice proprietățile fizico-chimice ale compușilor organici având un rol esențial în farmaceutică, agricultură și în protecția mediului.

3.2 Indicele distanță - grad

3.2.1 Introducere

Fie un graf conex G cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor. Definim *indicele distanță - grad* al unui nod al grafului G ([24, 16]) astfel:

$$DD'(u) = d_G(u)D_G(u) = d_G(u) \sum_{v \in V(G)} d_G(u,v).$$

Indicele distanță - grad al grafului G îl vom nota cu $DD'(G)$ și îl vom defini ([24,16]) ca:

$$DD'(G) = \sum_{x \in V(G)} DD'(x) = \sum_{u \in V(G)} [d_G(u) \sum_{v \in V(G)} d_G(u,v)].$$

Indicele distanță - grad și indici înrudiți bazați pe distanțele dintre nodurile unui graf sunt utilizați pe scară largă în chimia teoretică pentru a stabili relațiile între structura și proprietățile moleculelor. Aceștia furnizează corelații cu parametrii fizici, chimici și termodinamici ai compușilor chimici.

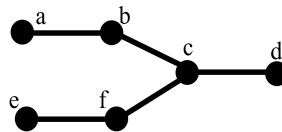


Fig. 9

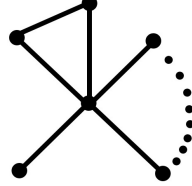
Exemplu. Fie graful G din Fig. 9.

$$\begin{aligned} D'(G) &= \sum_{u \in V(G)} [d_G(u) \sum_{v \in V(G)} d_G(u,v)] = (1 + 2 + 3 + 3 + 4) + 2(1 + 1 + 2 + 2 + 3) \\ &+ 3(2 + 1 + 1 + 1 + 2) + (1 + 2 + 3 + 2 + 3) + 2(3 + 2 + 2 + 1 + 1) \\ &+ (4 + 3 + 2 + 3 + 1) = 13 + 18 + 21 + 11 + 18 + 13 = 94. \end{aligned}$$

3.2.2 Rezultate preliminare

Vom prezenta rezultate asupra valorii indicelui distanță - grad pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui subcapitol.

Notăție Vom nota cu $K_{1,n-1}^+$ graful obținut din graful stea S_n prin adăugarea unei muchii care să unească două noduri pendante (Fig.10).



$K_{1,n-1}^+$

Fig. 10

Propoziția 6. Fie graful G de ordinul n . Dacă $G \cong K_{1,n-1}^+$, atunci $DD'(G) = 3n^2 - 3n - 6$.

Demonstrație. Calculăm valoarea indicelui distanță-grad:

$$\begin{aligned}
 DD'(K_{1,n-1}^+) &= 2[2 + 2(n-3)] + 2[2 + 2(n-3)] + (n-1)^2 \\
 &\quad + \underbrace{[2(n-2) + 1] + \dots + [2(n-2) + 1]}_{\text{de } n-3 \text{ ori}} \\
 &= 8(n-2) + (n-1)^2 + [2(n-1) + 1](n-3) \\
 &= (n-2)(2n+2) + (n-1)^2 + (n-3) \\
 &= 2n^2 - 2n - 4 + n^2 - 2n + 1 + (n-3) = 3n^2 - 3n - 6.
 \end{aligned}$$

□

Propoziția 7. Fie un graf G de ordinul n . Dacă $G \cong K_{1,n-1}$, atunci $DD'(G) = 3n^2 - 7n + 4$.

Demonstrație. Pentru cazurile în care $n = 3, 4, 5$ este evident că $DD'(K_{1,n-1})$ este egal cu 10, 24, 44. Pentru $n > 5$ vom calcula:

$$\begin{aligned}
 DD'(K_{1,n-1}) &= (n-1)^2 + \underbrace{2(n-2) + \dots + 2(n-2)}_{\text{de } n-1 \text{ ori}} \\
 &= (n-1)^2 + 2(n-1)(n-2) = (n-1)(3n-4) = 3n^2 - 7n + 4.
 \end{aligned}$$

□

Notăție. Vom nota cu $N_k(y) = \{w \in V(G) | d_G(y, w) = k, 0 \leq k \leq e(y)\}$.

Lema 4. ([36]) Fie un graf G conex de ordinul n , cu m muchii și $u \in V(G)$ astfel încât $e(u) = k$. Atunci:

$$DD'(u) \geq d_G(u)[2n - d_G(u) + \frac{k^2 - 3k}{2} - 1],$$

$$DD'(u) \leq d_G(u)[d_G(u) + k(n - d_G(u)) - \frac{k^2 - k}{2} - 1].$$

Egalitatea din prima relație are loc dacă și numai dacă $k = 1$ sau $k = 2$ sau $k \geq 3$ $|N_3(u)| = |N_4(u)| = \dots = |N_k(u)| = 1$, iar egalitate din a doua relație are loc dacă și numai dacă $k = 1$ sau $k = 2$ sau $p \geq 3$ și $|N_2(u)| = |N_3(u)| = \dots = |N_{k-1}(u)| = 1$.

Demonstrație. Pentru $k = 1$ și $k = 2$, $DD'(u) = (n - 1)^2$ și $DD'(u) = d_G(u)[2n - 2 - d_G(u)]$ care sunt de asemenea egalitățile căutate.

Dacă $k \geq 3$, atunci valoarea minimă a lui $DD'(u)$ este atinsă doar pentru $|N_2(u)| = n - d_G(u) - k + 1$ și $|N_j(u)| = 1$ pentru orice $3 \leq j \leq k$ și acea valoare este $DD'(u) \geq d_G(u)[d_G(u) + 2(n - d_G(u) - k + 1) + 3 + 4 + \dots + k] = d_G(u)(2n - d_G(u) + \frac{k^2 - 3k}{2} - 1)$

Valoarea maximă lui $DD'(u)$ este atinsă doar pentru $|N_k(u)| = n - d_G(u) - k + 1$ și $|N_j(u)| = 1$ pentru orice $2 \leq j \leq k - 1$. Astfel, $DD'(u) \geq d_G(u)[d_G(u) + 2 + 3 + 4 + \dots + (k - 1) + k(n - k - d_G(u) + 1)] = d_G(u)[d_G(u) + k(n - d_G(u)) - \frac{k^2 - k}{2} - 1]$. □

Lema 5. ([36]) Fie un graf G de ordinul n . Atunci

$$\text{diam}(G) + \Delta(G) \leq n + 1.$$

Demonstrație. Fie $u \in V(G)$, astfel încât $\Delta(G) = d_G(u)$. În acest caz, există cel puțin un lanț L în G de lungime $\text{diam}(G)$. Prin urmare, avem următoarele 3 posibilități:

- (1) nodul u este un nod pendent al lanțului L .
- (2) nodul u este unul dintre nodurile lanțului L , dar nu se află la vreo extremitate a acestuia.
- (3) nodul u nu este un nod al lanțului L .

(1) Când nodul u este nod pendent al lanțului L , atunci $e(x) = \text{diam}(G)$. Dacă luăm în considerare lanțul cel mai scurt de lungime $\text{diam}(G)$ care pornește din nodul u , atunci acesta are $\text{diam}(G) + 1$ noduri. Prin urmare $\text{diam}(G) + 1 + \Delta(G) - 1 \leq n$. Așadar, $\text{diam}(G) + \Delta(G) \leq n$.

(2) Dacă nodul u este unul dintre nodurile lanțului L care nu se află la vreo extremitate a acestuia, atunci acesta este adiacent cu exact 2 noduri ale lanțului L că altfel lungimea diametrului va scădea. Prin urmare, $\Delta(G) \leq n - [\text{diam}(G) + 1] + 2$. Deci, $\Delta(G) + \text{diam}(G) \leq n + 1$.

(3) Dacă nodul u nu este un nod al lanțului L , atunci acesta poate fi adiacent doar cu 3 noduri consecutive ale lanțului L . Prin urmare, $\Delta(G) \leq n - [\text{diam}(G) + 1 - 3] - 1$. Deci, $\Delta(G) + \text{diam}(G) \leq n + 1$. □

3.2.3 Grafuri extremale

Teorema 8. ([36]) Fie un graf conex G de ordinul n , cu m muchii și diametrul d . Atunci

$$DD'(G) \leq (1 - d) \sum_{x \in V(G)} d_G^2(x) + dnm - m(2 - d + d^2). \quad (11)$$

În particular, egalitatea are loc dacă și numai dacă $G \cong K_n$ sau graful G este izomorf cu un graf care are diametrul 2.

Demonstrație. Vom nota cu $\psi(w) = -\frac{w^2}{2} + w(n - d_G(x) + \frac{1}{2}) - 1$.

Această funcție este strict crescătoare pentru $w \in [1, n - d_G(x) + \frac{1}{2}]$. Pentru orice valoare întreagă a lui w , funcția atinge 2 valori maxime pentru $w = n - d_G(x)$ și pentru $w = n - d_G(x) + 1$.

Conform Lemei 5, pentru orice nod u , vom considera că $d + d_G(u) \leq d + \Delta(G) \leq n + 1$. Prin urmare, $d \leq n - d_G(u) + 1$ pentru orice $u \in V(G)$. Luând în considerare că $e(u) \leq d$ pentru orice $u \in V(G)$, atunci $\psi(e(u)) \leq \psi(d)$ pentru orice $u \in V(G)$. Conform celei de a doua relații din Lemei 4, obținem:

$$DD'(u) \leq d_G(u)(d_G(u) + d[n - d_G(u)] - \frac{d^2 - d}{2} - 1). \quad (12)$$

Din relația (12), deducem că:

$$DD'(G) = \sum_{u \in V(G)} DD'(u) \leq \sum_{u \in V(G)} d_G^2(u)(1 - d) + \sum_{u \in V(G)} d_G(u)(nd - \frac{d^2 - d}{2} - 1),$$

inegalitate ce implică relația (11), știind că $\sum_{u \in V(G)} d_G(u) = 2m$. Vom presupune că egalitatea este valabilă în relația (11). Dacă egalitatea din relația (12) este valabilă pentru orice $u \in V(G)$, atunci aceste noduri ale grafului G vor avea excentricitatea $e(u) = d$.

Conform Lemei 4, dacă $d \geq 3$, atunci $|N_2(u)| = |N_3(u)| = \dots = |N_{d-1}(u)| = 1$ pentru orice $u \in V(G)$. Dacă $d \geq 4$, vom considera un lanț mai scurt în G și, $u_1 u_2 \dots u_5$. În acest caz $d_G(u_3, u_1) = d_G(u_3, u_5) = 2$, fapt ce implică $|N_2(u_3)| \geq 2$, ceea ce este o contradicție.

Considerăm cazul $1 \leq d \leq 3$. Vom presupune că $d = 3$ și $u_1 u_2 \dots u_4$ este cel mai mic lanț de lungime 3. Prin urmare $|N_2(u_1)| = \{u_3\}$, fapt ce implică că $e(u_2) = 2$, ceea ce este o contradicție. Cazurile rămase sunt pentru $d = 1$, când $G \cong K_n$ și $d = 2$, când G este un graf care are diametrul 2. Dacă $d = 1$ sau $d = 2$, atunci egalitatea din relația (12) are loc pentru orice $u \in V(G)$, fapt ce implică că egalitatea din relația (11) este valabilă. □

Teorema 9. ([36]) Fie G graf conex de ordinul n , cu m muchii și gradul minim $\delta(G) = \delta$. Atunci

$$DD'(G) \leq m(n^2 + n + 2) + n\delta(\frac{\delta^2}{2} - n\delta + \frac{\delta}{2}) \quad (13)$$

Egalitatea are loc dacă și numai dacă $G \cong K_n$.

Demonstrație. Valoarea maximă a funcției $\psi(w)$ folosită în demonstrația Teoremei 8 pentru valori întregi ale lui w este egală cu:

$$\psi(n - d_G(u)) = \frac{n^2 + n}{2} + \frac{d_G^2(u) - d_G(u)}{2} - nd_G(u) - 1.$$

Dacă considerăm că cel mai mic lanț de lungime $e(u)$ care pleacă din u are exact $e(u) + 1$ noduri, atunci $e(u) + 1 + d_G(u) - 1 \leq n$. Prin urmare pentru orice $u \in V(G)$

$$e(u) + d_G(u) \leq n \quad (14)$$

Conform Lemei 4 și relației (14), vom obține:

$$DD'(G) \leq d_G(u) \left[\frac{n^2}{2} + \frac{n}{2} - 1 + \frac{d_G^2(u)}{2} - nd_G(u) - \frac{d_G(u)}{2} \right]. \quad (15)$$

Dacă luăm în considerare funcția $\lambda(r) = \frac{r^3}{3} - r^2(n - \frac{1}{2})$ care este strict descrescătoare pentru $r \in [1, n - 1]$, atunci pentru orice $u \in V(G)$ vom obține:

$$d_G(u) \left(\frac{d_G^2(u)}{2} - nd_G(u) + \frac{d_G(u)}{2} \right) \leq \delta \left(\frac{\delta^2}{2} + n\delta + \frac{\delta}{2} \right)$$

În final, din relația (15) obținem că:

$$\begin{aligned} DD'(G) &= \sum_{u \in V(G)} DD'(u) \leq \left(\frac{n^2}{2} + \frac{n}{2} - 1 \right) \sum_{u \in V(G)} d_G(u) + n\delta \left(\frac{\delta^2}{2} - n\delta + \frac{n}{2} \right) \\ &= (n^2 + n - 2)m + n\delta \left(\frac{\delta^2}{2} - n\delta + \frac{\delta}{2} \right) \end{aligned}$$

Presupunem că egalitatea din relația (13) este valabilă. În acest caz $d_G(u) = \delta$ pentru orice $u \in V(G)$. Prin urmare graful G este regulat de ordin δ și $e(u) = n - d_G(u)$ pentru orice $u \in V(G)$. Deci, toate nodurile grafului G au excentricitatea egală cu $k = n - \delta$.

Conform Lemei 4, dacă $k \geq 3$, atunci $|N_2(u)| = |N_3(u)| = \dots = |N_{k-1}(u)| = 1$ pentru orice $u \in V(G)$. Dacă $k \geq 4$, vom considera un lanț mai scurt în G și anume $t_1 t_2 \dots t_5$. În acest caz $d_G(t_3, t_1) = d_G(t_3, t_5) = 2$, fapt ce implică $|N_2(t_3)| \geq 2$, ceea ce este o contradicție.

În continuare, vom considera cazul $1 \leq k \leq 3$. Vom presupune că $k = 3$ și $t_1 t_2 \dots t_4$ este cel mai mic lanț de lungime 3. Prin urmare $|N_2(t_1)| = \{t_3\}$, fapt ce implică că $e(t_2) = 2 < k$, ceea ce este o contradicție. Cazurile rămase sunt pentru $k = 1$, când $G \cong K_n$ sau $k = 2$. □

Teorema 10. ([36]) Fie un graf conex G de ordinul n , cu m muchii și raza $rad(G)$. Atunci:

$$DD'(G) \geq m[2n - 2 + rad(G)^2 - rad(G)]. \quad (16)$$

Egalitatea are loc dacă și numai dacă $G \cong K_n$.

Demonstrație. Luând în considerare relația (14) și Lema 4, deducem că $n - d_G(u) \geq e(u)$ și că $DD'(u) \geq d_G(u)(n - 1 + \frac{e^2(u) - e(u)}{2}) \geq d_G(u)(n - 1 + \frac{rad(G)^2 - rad(G)}{2})$. Prin urmare $DD'(G) \geq (2n - 2 + rad(G)^2 - rad(G))m$.

Presupunem că egalitatea din relația (16) este valabilă. În acest caz, fie egalitatea din prima relație a Lemei 4 este valabilă, fie $n - d_G(u) = e(u)$ și $e(u) = rad(G)$ pentru orice $u \in V(G)$ (i.e. graful G este un graf regulat de grad $n - r$ și diametrul egal cu $rad(G)$). În plus, dacă $rad(G) \geq 3$, atunci $|N_3(u)| = \dots = |N_{rad(G)}(u)| = 1$ pentru orice $u \in V(G)$. De asemenea, $|N_2(u)| = n - rad(G) - d_G(u) + 1 = 1$ pentru orice $u \in V(G)$.

Dacă $rad(G) \geq 4$, vom considera un lanț mai scurt în G și anume $y_1 y_2 \dots y_5$. În acest caz $d_G(y_3, y_1) = d_G(y_3, y_5) = 2$, fapt ce implică $|N_2(y_3)| \geq 2$, ceea ce este o contradicție.

În continuare, vom considera cazul $1 \leq \text{rad}(G) \leq 3$. Vom presupune că $\text{rad}(G) = 3$ și $s_1 s_2 \dots s_4$ este cel mai mic lanț de lungime 3. Prin urmare $|N_2(s_1)| = \{s_3\}$, fapt ce implică că $e(s_2) = 2$, ceea ce este o contradicție. Cazurile rămase sunt pentru $\text{rad}(G) = 1$, când $G \cong K_n$ și $\text{rad}(G) = 2$, când G este un graf de rază 2. Dacă $\text{rad}(G) = 1$ sau $\text{rad}(G) = 2$, atunci egalitatea din relația (16) are loc pentru orice $u \in V(G)$. □

Teorema 11. ([49]) Fie un graf conex G de ordinul n , $n \geq 4$, cu diametrul 2 și diferit de $K_{1,n-1}$. Atunci:

$$DD'(G) \geq 3n^2 - 3n - 6.$$

Egalitatea are loc dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}^+$.

Demonstrație.

Conform Propoziției 6, $DD'(K_{1,n-1}^+) = 3n^2 - 3n - 6$.

Dacă considerăm că $n \geq 4$ și un graf conex G cu diametrul 2, atunci pentru orice nod $u \in V(G)$ avem că $1 \leq e(u) \leq 2$. Prin urmare, luând în considerare Lema 4 obținem că:

$$DD'(G) = q(n-1)^2 + \sum_{x \in V(G), e(x)=2} d_G(x)(2n-2-d_G(x)),$$

unde q reprezintă numărul de noduri care au excentricitatea egală cu 1, iar suma are exact $n - q$ termeni.

Vom presupune că $q = 0$. Dacă nodul $u \in V(G)$ are $d_G(u) = 1$, atunci unicul nod v care este adiacent cu u are excentricitatea egală cu 1, ceea ce este o contradicție cu ipoteza. Așadar $2 \leq d_G(u) \leq n-2$ pentru orice $u \in V(G)$. Prin urmare, expresia $d_G(x)(2n-2-d_G(x))$ are o valoare minimă egală cu $2(2n-4)$, ceea ce implică că $DD'(G) \geq 2n(2n-4) > 3n^2 - 3n - 6$ pentru orice $n \geq 4$.

În acest caz, graful conex G cu $n \geq 4$ noduri, cu diametrul 2 și diferit de $K_{1,n-1}$ are valoarea indicelui distanță-grad minimă pentru $q \geq 1$. Funcția $d_G(x)(2n-2-d_G(x))$ este strict crescătoare pentru $d_G(x) = 1, \dots, n-1$ având valoarea maximă egală cu $(n-1)^2$. Prin urmare, dacă graful G este un graf cu $n \geq 4$ noduri, cu diametrul 2 și diferit de $K_{1,n-1}$, atunci $DD'(G)$ are o valoare minimă doar dacă $q = 1$. Așadar graful G conține exact un nod u cu excentricitatea egală cu 1, 2 noduri cu gradul 2 și alte noduri de grad 1, ceea ce înseamnă că $G \cong K_{1,n-1}^+$. □

Teorema 12. ([50]) Fie un graf conex G de ordinul n , $n \geq 2$. Atunci:

$$DD'(G) \geq 3n^2 - 7n + 4.$$

Egalitatea are loc dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}$.

Demonstrație. Pentru $n = 2$ este evident, astfel vom considera $n \geq 3$ și vom nota cu r_i numărul de noduri de grad i ale grafului G pentru orice $1 \leq i \leq n-1$. Deducem că $\sum_{i=1}^{n-1} r_i = n$ și $\sum_{i=1}^{n-1} ir_i \geq 2(n-1)$. Dacă $d_G(x) = k$, atunci:

$$\sum_{y \in V(G)} d_G(x, y) \geq k + 2(n - k - 1) = 2n - k - 2,$$

$$DD'(G) = \sum_{y \in V(G)} d_G(y) \sum_{y \in V(G)} d_G(x, y) \geq \sum_{k=1}^{n-1} kr_k(2n - k - 2).$$

Vom nota cu $\Lambda(r_1, r_2, \dots, r_{n-1}) = \sum_{k=1}^{n-1} kr_k(2n - k - 2)$ și vom arăta care este valoarea minimă a funcției $\Lambda(r_1, r_2, \dots, r_{n-1})$ oricare ar fi $r_1, r_2, \dots, r_{n-1} \geq 0$ cu proprietățile $\sum_{i=1}^{n-1} r_i = n$ și $\sum_{i=1}^{n-1} ir_i \geq 2(n-1)$.

Pentru început, vom arăta că valorile numerelor naturale $(r_1, r_2, \dots, r_{n-1})$ pentru care valoarea min $\Lambda(r_1, r_2, \dots, r_{n-1})$ există și trebuie să îndeplinească următoarele condiții: (1) $r_1 + r_2 + \dots + r_{n-1} = n$

(2) $r_1 + 2r_2 + \dots + (n-1)r_{n-1} = 2n - 2$

De asemenea, vom presupune că $r_1 + 2r_2 + \dots + (n-1)r_{n-1} > 2n - 2$. Prin urmare, există o cea mai mică valoare $2 \leq m \leq n-1$ astfel încât $r_m > 0$.

Vom defini $(q_1, q_2, \dots, q_{n-1})$ astfel încât $q_{m-1} = r_{m-1} + 1$, $q_m = r_m - 1$ și $q_i = r_i$ pentru orice $i \neq m-1, m$. În acest caz, $\sum_{i=1}^{n-1} q_i = n$, $\sum_{i=1}^{n-1} iq_i = \sum_{i=1}^{n-1} ir_i - 1 \geq 2(n-1)$ și $\Lambda(r_1, r_2, \dots, r_{n-1}) - \Lambda(q_1, q_2, \dots, q_{n-1}) = 2(n-m) - 1 > 0$. Deci, Λ nu poate să fie minimă pentru $(r_1, r_2, \dots, r_{n-1})$ pentru care $\sum_{i=1}^{n-1} ir_i > 2n - 2$.

Știind că d_1, d_2, \dots, d_n sunt gradele nodurilor unui arbore de ordin n dacă și numai dacă $\sum_{i=1}^n d_i = 2n-2$, putem considera că numerele r_1, r_2, \dots, r_{n-1} sunt multiplicitățile gradelor $1, 2, \dots, n-1$ ale nodurilor unui arbore T de ordin n . De asemenea, vom folosi notația $\Lambda(T)$ pentru $\Lambda(r_1, r_2, \dots, r_{n-1})$. Domeniul unde Λ are valoarea cea mai mică este definit de multiplicitățile gradelor $1, 2, \dots, n-1$ ale nodurilor unui arbore T de ordin n .

Dacă $T \not\cong K_{1,n-1}$, atunci $(r_1, r_2, \dots, r_{n-1}) \neq (n-1, 0, \dots, 0, 1)$ și $\text{diam}(T) \geq 3$. Fie $a, b \in V(T)$ astfel încât $d_G(a, b) = \text{diam}(T)$. Astfel, $d_T(a) = d_T(b) = 1$ și vom nota cu e și ω ($e \neq \omega$) nodurile adiacente cu b și a . Presupunem că $d_T(e) = z + h$ și $d_T(\omega) = z$, unde $z \geq 2$ și $h \geq 0$.

Fie $T_1 \in \mathcal{T}_n$ definit astfel: $V(T_1) = V(T)$ și $E(T_1) = E(T) \cup \{ae\} \setminus \{a\omega\}$. Prin înlocuirea arborelui T cu arborele T_1 , gradele nodurilor e și ω devin $d_{T_1}(e) = z + h + 1$ și $d_{T_1}(\omega) = z - 1$, iar gradele celor $n-2$ noduri rămase se păstrează. Astfel, obținem:

$$\begin{aligned} \Lambda(T) - \Lambda(T_1) &= (z+h)r_{z+h}[2n-2-(z+h)] + (z+h+1)r_{z+h+1}[2n-2-(z+h+1)] \\ &+ (z-1)r_{z-1}[2n-2-(z-1)] + zr_z(2n-n-z) - (z+h)(r_{z+h}-1)[2n-2-(z+h)] \\ &- (z+h+1)(r_{z+h+1}-1)[2n-2-(z+h+1)] - (z-1)(r_{z-1}-1)[2n-2-(z-1)] \\ &- z(r_z-1)(2n-2-z) = 2h+2 > 0 \end{aligned}$$

și $\Lambda(T)$ nu poate avea o valoare minimă. Așadar, $\Lambda(T)$ are o valoare minimă dacă și numai dacă $T \cong K_{1,n-1}$ ($r_1 = n-1, r_2 = \dots = r_{n-2} = 0$ și $r_{n-1} = 1$).

Deci, $\min \Lambda(T) = \min \Lambda(r_1, r_2, \dots, r_{n-1}) = \Lambda(n-1, 0, \dots, 0, 1) = 3n^2 - 7n + 4$ dacă și numai dacă $T \cong K_{1,n-1}$. \square

3.2.4 Tipuri de indici înrudiți

Indicele distanță - grad revers

Fie graful G , un graf conex cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor, respectiv muchiilor și cu n , m și d , numărul de noduri, numărul de muchii și diametrul grafului G . *Indicele distanță - grad revers al grafului G* îl vom nota cu ${}^rDD'(G)$ și îl vom defini ([52]) ca:

$${}^rDD'(G) = 2(n-1)md - DD'(G) = 2(n-1)md - \sum_{u \in V(G)} (d_G(u) \sum_{v \in V(G)} d_G(u, v)),$$

Există două justificări care îi conferă acestui indice o importanță deosebită. Prima este aceea că indicele distanță - grad revers este un indice topologic care satisface cerințele de bază pentru a fi un indice de ramificare cu un potențial mare cu privire la aplicațiile în chimie. Cel de al doilea motiv este că studierea indicelui distanță - grad revers reprezintă, de fapt, studierea indicelui distanță - grad care are, de asemenea, un rol important în chimia matematică și în matematica discretă.

Indicele distanță - grad invers

Fie graful G , un graf conex cu n noduri și cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor respectiv muchiilor. *Indicele distanță - grad invers al grafului G* îl vom nota cu $ID'(G)$ și îl vom defini ([20]) ca:

$$ID'(G) = \sum_{v \in V(G)} \frac{1}{d_G(v)}.$$

Indicele distanță - grad invers este unul dintre cei mai vechi și mai utilizați descriptori, cu un rol semnificativ în crearea modelelor QSPR / QSAR.

3.3 Indicele Gutman

3.3.1 Introducere

Fie un graf G cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor. *Indicele Gutman al grafului G* este notat cu $S(G)$ și definit ([24]) astfel:

$$S(G) = \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u)d_G(v)d_G(u,v).$$

Indicele Gutman este cunoscut în literatura de specialitate ca fiind indicele Schultz de speța a doua sau ca indicele Schultz modificat. Acesta a fost prezentat la început ca o sumă ponderată în raport de valență a distanței dintre toate perechile de noduri ale unui graf.

Un flux important de cercetare a indicilor topologici a avut la bază legătura dintre indicele Gutman și alți indici, pornind de la numărul de noduri și numărul de muchii.

Indicele Gutman a fost intens studiat în ultimul deceniu. Anumite rezultate justifică de ce, în anumite serii de izomeri, valoarea indicelui scade odată cu creșterea ramificării scheletului molecular de carbon-atom.

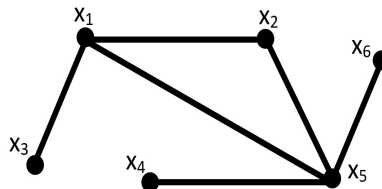


Fig. 11

Exemplu. Fie graful G din Fig. 11.

$$\begin{aligned} S(G) = \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u)d_G(v)d_G(u,v) &= 3 \cdot 2 + 3 + 3 \cdot 2 + 3 \cdot 4 + 3 \cdot 2 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 2 + 2 \cdot 4 + 3 \\ &+ 2 \cdot 2 + 4 \cdot 2 + 3 + 4 + 2 + 4 = 9 + 18 + 14 + 12 + 11 + 7 + 6 = 77. \end{aligned}$$

3.3.2 Rezultate preliminare

Vom începe prin a arăta care este valoarea indicelui Gutman pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui subcapitol.

Propoziția 8. *Fie C_k , ciclul cu k noduri. Atunci $S(C_{2n}) = 4n^3$ și $S(C_{2n+1}) = 2n(n+1)(2n+1)$.*

Demonstrație. Cum $S(G) = \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u)d_G(v)d_G(u,v)$ și gradul oricărui nod al ciclului este 2, atunci $S(C_k) = \sum_{u,v \in V(G)} 4d_G(u,v) = 4 \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v)$, unde $\sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v) = W(G)$. Conform Propoziției 2 și Propoziției 3, obținem că $S(C_{2n}) = 4 \frac{(2n)^3}{8} = 4n^3$ și că $S(C_{2n+1}) = 4 \frac{n(n+1)(2n+1)}{2} = 2n(n+1)(2n+1)$. \square

Propoziția 9. *Fie S_n , graful stea cu n noduri. Atunci $S(S_n) = (2n-3)(n-1)$.*

Demonstrație. Un calcul direct arată că:

$$S(S_n) = (n-1)^2 + 2 \binom{n-1}{2} = (n-1)^2 + 2 \frac{(n-1)!}{2!(n-3)!} = (2n-3)(n-1).$$

\square

Lema 6. ([21]) *Fie un graf conex G astfel încât G' și G'' sunt două subgrafuri conexe ale grafului G astfel încât $G' \cap G'' = \{w\}$, $G' \cup G'' = G$, $r_1 = |E(G')|$ și $r_2 = |E(G'')|$. Atunci:*

$$S(G) = S(G') + S(G'') + 2r_1 \sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(v)d_{G''}(w,v) + 2r_2 \sum_{u \in V(G')} d_{G'}(u)d_{G'}(w,u).$$

Demonstrație. Din definiția indicelui Gutman obținem:

$$\begin{aligned} S(G) &= \sum_{u,v \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u)d_{G'}(v)d_{G'}(u,v) + \sum_{u,v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(u)d_{G''}(v)d_{G''}(u,v) \\ &+ \sum_{u \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u)d_{G'}(w)d_{G'}(u,w) + \sum_{v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(v)d_{G''}(w)d_{G''}(v,w) \\ &+ \sum_{\substack{u \in V(G') \setminus \{w\} \\ v \in V(G'') \setminus \{w\}}} d_{G'}(u)d_{G''}(v)d_G(u,v) \\ &= \sum_{u,v \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u)d_{G'}(v)d_{G'}(u,v) + \sum_{u,v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{H_2}(u)d_{H_2}(v)d_{H_2}(u,v) \\ &+ \sum_{u \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u)(d_{G'}(w) + d_{G''}(w))d_{G'}(u,w) \\ &+ \sum_{v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(v)(d_{G'}(w) + d_{G''}(w))d_{G''}(v,w) \\ &+ \sum_{\substack{u \in V(G') \setminus \{w\} \\ v \in V(G'') \setminus \{w\}}} d_{G'}(u)d_{G''}(v)(d_{G'}(u,w) + d_{G''}(w,v)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{u,v \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u)d_{G'}(v)d_{G'}(u,v) + \sum_{u,v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(u)d_{G''}(v)d_{G''}(u,v) \\
&+ \sum_{u \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(u)d_{G'}(w)d_{G'}(u,w) + \sum_{u \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(u)d_{G''}(w)d_{G''}(u,w) \\
&+ \sum_{v \in V(G') \setminus \{w\}} d_{G'}(v)d_{G'}(w)d_{G'}(w,v) + \sum_{v \in V(G'') \setminus \{w\}} d_{G''}(v)d_{G''}(w)d_{G''}(w,v) \\
&+ \sum_{\substack{u \in V(G') \setminus \{w\} \\ v \in V(G'') \setminus \{w\}}} (d_{G'}(u)d_{G''}(v)d_{G'}(u,w) + d_{G''}(u)d_{G'}(v)d_{G''}(w,v)) \\
&= S(G') + S(G'') + d_{G'}(w) \sum_{u \in V(G')} d_{G'}(u,w) + d_{G''}(w) \sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(w,v) \\
&+ (2r_1 - d_{G'}(w)) \sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(w,v) + (2r_2 - d_{G''}(w)) \sum_{u \in V(G')} d_{G'}(u,w) \\
&= S(G') + S(G'') + 2r_1 \sum_{v \in V(G'')} d_{G''}(v)d_{G''}(w,v) + 2r_2 \sum_{u \in V(G')} d_{G'}(u)d_{G'}(u,w).
\end{aligned}$$

□

Notație. Vom nota cu $L_{n,k}$ graful obținut dintr-un ciclu C_k prin adăugarea a $n - k$ noduri pendante la unul dintre nodurile ciclului C_k . În Fig. 12 se află reprezentat un astfel de graf.

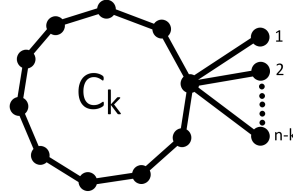


Fig. 12

Propoziția 10. Fie un graf G astfel încât $G \cong L_{n,k}$, atunci pentru k par $S(L_{n,k}) = 2n^2 + nk^2 - 2nk - n - \frac{k^3}{2} + k$, iar pentru k impar $S(L_{n,k}) = 2n^2 + nk^2 - 2nk - 2n - \frac{k^3 - 3k}{2}$.

Demonstrație. Vom folosi Lema 6, considerând $H_1 = S_{n-k+1}$ și $H_2 = C_k$. Avem $S(S_r) = (2r - 3)(r - 1)$, $S(C_{2p}) = 4p^3$ și $S(C_{2p+1}) = 2p(p + 1)(2p + 1)$.

Notând $k = 2p$ în caz de paritate a lui k obținem $S(C_k) = \frac{k^3}{2}$, iar în cazul în care k este impar, notând $k = 2p + 1$ obținem $S(C_k) = \frac{k(k-1)(k+1)}{2}$. Vom calcula indicele Gutman pentru $L_{n,k}$, știind că $S(S_{n-k+1}) = 2n^2 - n + 2k^2 + k - 4nk$.

Pentru cazul în care k este par, vom obține:

$$\begin{aligned}
S(L_{n,k}) &= 2n^2 - n + 2k^2 + k - 4nk + \frac{k^3}{2} + 2(n-k) \left\{ 2 \left[2(1+2+3+\dots+(\frac{k}{2}-1)) + \frac{k}{2} \right] \right\} + 2k(n-k) \\
&= 2n^2 - n + 2k^2 + k - 4nk + \frac{k^3}{2} + 2(n-k)2\frac{k^2}{4} + 2k(n-k) \\
&= 2n^2 + nk^2 - 2nk - n - \frac{k^3}{2} + k.
\end{aligned}$$

Pentru cazul în care k este impar, vom obține:

$$\begin{aligned}
S(L_{n,k}) &= 2n^2 - n + 2k^2 + k - 4nk + \frac{k(k^2 - 1)}{2} + 2(n-k) \left\{ 2 \left[2(1+2+3+\dots + \frac{k-3}{2}) + 2 \frac{k-1}{2} \right] \right\} \\
&+ 2k(n-k) = 2n^2 - n + 2k^2 + k - 4nk + \frac{k(k^2 - 1)}{2} + 2(n-k) \frac{(k+1)(k-1)}{4} + 2k(n-k) \\
&= 2n^2 - n + 2k^2 + k - 4nk + \frac{k^3}{2} - \frac{k}{2} + 2nk - 2k^2 + nk^2 - n - k^3 + k \\
&= 2n^2 + nk^2 - 2nk - 2n - \frac{k^3 - 3k}{2}.
\end{aligned}$$

□

3.3.3 Grafuri extremale

Teorema 13. ([1]) Fie un graf conex G de ordinul n . Atunci:

$$(2n - 3)(n - 1) \leq S(G)$$

Egalitatea are loc dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}$.

Demonstrație. Dacă graful G nu are noduri pendante ($\delta(G) \geq 2$), atunci:

$$\begin{aligned}
S(G) &= \sum_{x,y \in V(G)} d_G(x)d_G(y)d_G(x,y) \\
&\geq 4 \sum_{x,y \in V(G)} d_G(x,y) \geq 4 \binom{n}{2} = (n-1) \cdot n \cdot 2 > (2n-3)(n-1) = S(S_n)
\end{aligned}$$

Dacă $\delta(G) = 1$, vom demonstra prin inducție după numărul de noduri. Pentru $n = 1$, egalitatea este evidentă. Presupunem că teorema este valabilă pentru un graf G cu n noduri.

Construim un graf G' cu n noduri, pornind de la graful G adăugând un nod pendent u incident cu un nod v care aparține grafului G . Vom arăta că adăugând nodul u , indicele Gutman crește cu cel puțin $4n - 3 = S(S_{n+1}) - S(S_n)$.

$$\begin{aligned}
S(G') - S(G) &= \sum_{y \in V(G) \setminus \{v\}} [d_{G'}(v)d_{G'}(y)d_{G'}(v,y) - d_G(v)d_G(y)d_G(v,y)] \\
&+ \sum_{y \in V(G)} d_{G'}(u)d_{G'}(y)d_{G'}(u,y) \\
&+ \sum_{y,z \in V(G) \setminus \{v\}} [d_{G'}(y)d_{G'}(z)d_{G'}(y,z) - d_G(y)d_G(z)d_G(y,z)]
\end{aligned}$$

Din construcția grafului G' , observăm că $d_G(y,z) = d_{G'}(y,z)$ și că $d_{G'}(u,y) = 1 + d_G(v,y)$ pentru orice $y, z \in V(G)$. De asemenea, observăm că gradul nodului v crește cu 1, iar gradele celorlalte noduri rămân neschimbate.

Este clar că contribuția nodurilor $y, z \in V(G) \setminus \{v\}$ este la fel în $S(G)$ și în $S(G')$. Așadar, vom obține:

$$\begin{aligned} S(G') - S(G) &= \sum_{y \in V(G) \setminus \{v\}} d_G(y) d_G(v, y) + \sum_{y \in V(G)} d_{G'}(y) (d_G(v, y) + 1) \\ &= 2 \sum_{y \in V(G) \setminus \{v\}} d_G(y) d_G(v, y) + \sum_{y \in V(G)} d_G(y) + \sum_{y \in V(G)} d_{G'}(y) \end{aligned}$$

Cum $d_G(v, y) \geq 1$, $d_G(y) \geq 1$ pentru orice $y \in V(G) \setminus \{v\}$ și $\sum_{y \in V(G)} d_G(y) = 2|E(G)| \geq 2(n-1)$, deducem că $S(G') - S(G) \geq 4n - 3$. Egalitatea are loc dacă și numai dacă $d_G(y) = 1$ pentru orice nod $y \in V(G) \setminus \{v\}$. Această condiție este satisfăcută doar dacă $G \cong S_n$. □

Teorema 14. ([22]) *Fie un graf unicyclic G cu $n \geq 4$ noduri. Atunci $S(G) \geq 2n^2 + n - 9$. Egalitatea are loc dacă și numai dacă $G \cong L_{n,3}$.*

Demonstrație. Vom demonstra că $S(L_{n,k}) > S(L_{n,3})$ pentru $3 \leq k \leq n$. Pentru $n = 4$ sau $n = 3$ este evident.

Vom nota cu $f(k) = 2n^2 + nk^2 - 2nk - 2n - \frac{k^3 - 3k}{2}$ și $g(k) = 2n^2 + nk^2 - 2nk - n - \frac{k^3}{2} + k$.

Dacă k este impar, atunci $f'(k) = 2nk - 2n - \frac{k^3}{2} + \frac{3}{2}$ și $f(k)$ atinge valoarea minimă doar pentru $k = 3$. Deci, $S(L_{n,k}) > S(L_{n,3})$ pentru k impar.

Dacă k este par, atunci $g'(k) = 2nk - 2n - \frac{k^3}{2} + 1 \geq 2k^2 - 2k - \frac{k^3}{2} + 1 = \frac{k^2}{2} - 2k + 1 > 0$ și $g(k)$ atinge valoarea minimă doar pentru $k = 4$. Este ușor de observat că $g(4) = 2n^2 + 7n - 28 > 2n^2 + n - 9 = f(3)$, de unde rezultă că $S(L_{n,4}) > S(L_{n,3})$, fapt ce rezolvă demonstrația. □

3.4 Indicele Harary

3.4.1 Introducere

Fie graful simplu, conex G care are $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor respectiv muchiilor. *Indicele Harary al grafului G* îl vom nota cu $H(G)$ și îl vom defini ([3,43]) ca:

$$H(G) = \sum_{x,y \in V(G)} \frac{1}{d_G(x,y)}.$$

Toate lucrările care au conținut noțiunea de punct de fierbere ale unor compuși chimici având la bază indicele Harary scot în evidență faptul că acest indice are un potențial mare de a fi utilizat în modelele QSPR. Acesta a fost folosit în modelarea structurii alcanilor inferiori având la bază doar opt proprietăți reprezentative. Eroarea standard de estimare a punctelor de fierbere se îmbunătățește de la cel mai folosit model liniar al punctelor de fierbere al compușilor chimici care implică indicele Harary la cel mai bun model care are la bază indicele Wiener și indicele Wiener polaritate.

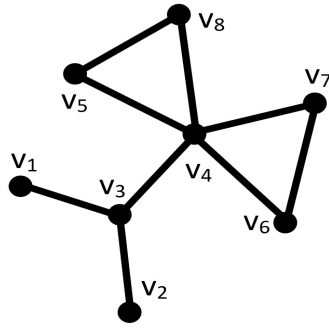


Fig. 13

Exemplu. Fie graful G din Fig. 13.

$$\begin{aligned}
 H(G) &= \sum_{x,y \in V(G)} \frac{1}{d_G(x,y)} = \frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \\
 &\quad + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 + 1 + 1 + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \\
 &= 9 + \frac{11}{2} + \frac{8}{3} = 17,1666.
 \end{aligned}$$

3.4.2 Rezultate preliminare

Vom începe prin a prezenta rezultate asupra indicelui Harary pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui subcapitol.

Propoziția 11. Fie L_n , lanțul cu n noduri. Atunci $H(L_n) = 1 + n \sum_{j=2}^{n-1} \frac{1}{j}$.

Demonstrație. Prin calcul direct obținem:

$$\begin{aligned}
 H(L_n) &= 1 + 2 + 3 + \dots + (n-2) + (n-1) + \\
 &\quad 1 + 2 + 3 + \dots + (n-2) + \\
 &\quad \dots \dots \dots \\
 &\quad 1 + 2 + 3 + \\
 &\quad 1 + 2 + \\
 &\quad 1 \\
 &= (n-1) + \left[\frac{n-2}{2} + \frac{n-3}{3} + \dots + \frac{n-(n-1)}{n-1} \right] = n-1 + \sum_{j=2}^{n-1} \frac{n-j}{j} \\
 &= n-1 + \sum_{j=2}^{n-1} \frac{n}{j} - (n-2) = 1 + n \sum_{j=2}^{n-1} \frac{1}{j}.
 \end{aligned}$$

□

Propoziția 12. Fie K_n , graful complet cu n noduri. Atunci $H(K_n) = \frac{n(n-1)}{2}$.

Demonstrație. Cum distanța între oricare 2 noduri este egală cu 1, avem:

$$H(K_n) = \sum_{x,y \in V(G)} \frac{1}{d_G(x,y)} = \binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

□

3.4.3 Grafuri extremale

Teorema 15. ([26]) Fie un graf conex G cu $n \geq 2$ noduri. Atunci:

$$1 + n \sum_{j=2}^{n-1} \frac{1}{j} \leq H(G) \leq \frac{n(n-1)}{2}$$

Prima egalitate are loc dacă și numai dacă $G \cong L_n$, iar a doua egalitate are loc dacă și numai dacă $G \cong K_n$.

Demonstrație. Un calcul simplu arată că adăugarea unei muchii la graful G va crește indicele Harary. În acest caz, $H(G)$ are o valoare maximă dacă și numai dacă graful G este un graf complet.

În cazul în care $H(G)$ are o valoare minimă, atunci graful G este un arbore. Vom construi un graf conex arbitrar T și vom alege în mod arbitrar un nod $x \in V(T)$. Vom nota cu $T - x$ subgraful obținut prin ștergerea din graful T a nodului x .

Graful $T_{v,w}$ este construit prin atașarea de nodul x al grafului T a nodurilor terminale ale unui lanț $L_v (v \geq 1)$ și unui lanț $L_w (w \geq 1)$. În Fig. 14 se află structura acestui graf.

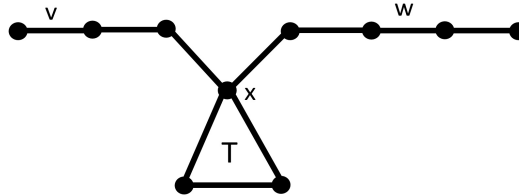


Fig. 14

Pentru început, vom demonstra că pentru $v \leq w$, vom obține următoarea relație:

$$H(T_{v,w}) > H(T_{v-1,w+1}) \quad (17)$$

Pentru a verifica relația (17), vom nota nodul terminal al lanțului L_v cu α și vom împărți perechile de noduri ale grafurilor $T_{v,w}$ și $T_{v-1,w+1}$ în trei părți. Prima parte o vom nota cu (a) și reprezintă perechile de noduri ce nu implică nodul α . A doua parte o vom nota cu (b) și reprezintă fie perechile de noduri ce implică nodul α și nodul x , fie nodurile lanțului L_v sau nodurile lanțului L_w . A treia parte o vom nota cu (c) și reprezintă perechile de noduri ce implică nodul α și nodurile grafului $T - x$.

Luând în calcul, notațiile făcute mai sus vom obține:

$$H(T_{v,w}) = \sum_{(s,y) \in (a)} \frac{1}{d_{T_{v,w}}(s,y)} + \sum_{(\alpha,i) \in (b)} \frac{1}{d_{T_{v,w}}(\alpha,i)} + \sum_{(\alpha,j) \in (c)} \frac{1}{d_{T_{v,w}}(\alpha,j)}$$

$$H(T_{v-1,w+1}) = \sum_{(s,y) \in (a)} \frac{1}{d_{T_{v-1,w+1}}(s,y)} + \sum_{(\alpha,i) \in (b)} \frac{1}{d_{T_{v-1,w+1}}(\alpha,i)} + \sum_{(\alpha,j) \in (c)} \frac{1}{d_{T_{v-1,w+1}}(\alpha,j)},$$

unde (s,y) este o pereche de noduri ce aparțin părții (a), i este un nod al lanțului L_{v+w+1} în care α este nod terminal și j este un nod al grafului $T-x$.

Prin urmare, observăm că:

$$\sum_{(s,y) \in (a)} \frac{1}{d_{T_{v,w}}(s,y)} = \sum_{(s,y) \in (a)} \frac{1}{d_{T_{v-1,w+1}}(s,y)} \quad \text{și} \quad \sum_{(\alpha,i) \in (b)} \frac{1}{d_{T_{v,w}}(\alpha,i)} = \sum_{(\alpha,i) \in (b)} \frac{1}{d_{T_{v-1,w+1}}(\alpha,i)}$$

$$\text{De asemenea, } H(T_{v,w}) - H(T_{v-1,w+1}) = \sum_{(\alpha,j) \in (c)} \left[\frac{1}{d_{T_{v,w}}(\alpha,j)} - \frac{1}{d_{T_{v-1,w+1}}(\alpha,j)} \right] \quad (18)$$

Luând în calcul că j este un nod al grafului $T-x$, deducem că

$$d_{T_{v,w}}(\alpha,j) = d_T(x,j) + v \quad \text{și} \quad d_{T_{v-1,w+1}}(\alpha,j) = d_T(x,j) + w + 1$$

În acest caz, conform faptului că $v \leq w$, deducem că $d_{T_{v,w}}(\alpha,j) < d_{T_{v-1,w+1}}(\alpha,j)$ pentru orice nod j care să aparțină grafului $T-x$.

Datorită acestui fapt și observației că funcția $f(t) = \frac{1}{t}$ este o funcție descrescătoare putem remarca cu ușurință

$$\frac{1}{d_{T_{v,w}}(\alpha,j)} > \frac{1}{d_{T_{v-1,w+1}}(\alpha,j)} \quad (19)$$

Conform relației (18) și (19), deducem că relația (17) este adevărată.

Relația (17) arată că dacă nodurile sunt mutate de pe o ramură mai scurtă pe o ramură mai lungă (atașată la același nod), atunci indicele Harary va scade. Repetând transformarea $T_{v,w} \rightarrow T_{v-1,w+1}$ de număr suficient de ori, vom obține valoarea minimă când ramura mai scurtă este complet ștearsă (și adăugată la ramura mai lungă).

Aplicând acest procedeu în mod repetat, pentru toate nodurile de ramificare ale unui graf, obținem că L_n are valoarea minimă. \square

Teorema 16. ([7]) *Fie un graf conex G cu $n \geq 2$ noduri și t muchii. Atunci:*

$$H(L_n) + \frac{1-n+t}{2} \leq H(G) \leq \frac{n(n-1)}{4} + \frac{t}{2} \quad (20)$$

Prima egalitate are loc dacă și numai dacă $G \cong L_n$ sau K_3 , iar a doua egalitate are loc dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult 2.

Demonstrație. Știind că numărul de perechi de noduri la distanță cel puțin 1 este $\binom{n}{2}$ și că numărul de perechi de noduri la distanță 1 este egal cu t , atunci:

$$H(G) \leq t + \frac{1}{2} \left[\frac{n(n-1)}{2} - t \right],$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul 2.

Conform Teoremei 15, dacă $t = n-1$, atunci observăm că egalitatea din stânga relației (20) este valabilă. Presupunem că $t \geq n$. În acest caz, remarcăm că pentru

orice subgraf G_1 al grafului G obținut prin ștergerea unei muchii $xy \in E(G)$ vom obține $H(G) \geq H(G_1) + 1 - \frac{1}{2} = H(G_1) + \frac{1}{2}$ cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $d_{G_1}(x, y) = 2$ și $d_{G_1}(u, v) = d_G(u, v)$ pentru orice pereche de noduri $\{u, v\}$ diferită de $\{x, y\}$.

Alegem un ciclu din graful G și se elimină una dintre muchiile acestuia astfel încât graful rezultat să rămână conex. După repetarea transformării ori de câte ori este posibil, notăm graful rezultat cu T .

În acest caz, arborele T poate fi obținut din graful G prin ștergerea a $t - n + 1$ muchii pe care le vom nota cu $m_1, m_2, \dots, m_{t-n+1}$. Fie $G_i = G_{i-1} - m_i$ pentru $i = 1, \dots, t - n + 1$ unde $G_0 = G$ și $G_{t-n+1} = T$. Prin urmare, $H(G_{i-1}) \geq H(G_i) + \frac{1}{2}$ pentru $i = 1, \dots, t - n + 1$. Deci $H(G) = H(G_0) \geq H(G_{t-n+1}) + \frac{t-n+1}{2} = H(T) + \frac{t-n+1}{2}$.

Luând în considerare Teorema 15, $H(T) \geq H(L_n)$ de unde rezultă că inegalitatea și egalitatea stângă în relația (20) sunt valabile.

În acest caz, dacă $T = L_n$, atunci putem adăuga o muchie între două noduri la distanță 2 în graful $T = L_n$ pe care le vom nota cu x_1, y_1 . Realizând această transformare vom forma graful G_{t-n} cu proprietatea că $d_T(u, v) = d_{G_{t-n}}(u, v)$ pentru orice pereche de noduri $\{u, v\}$ diferită de $\{x_1, y_1\}$.

Acest caz este posibil dacă și numai dacă $n = 3$. Prin urmare, $G \cong K_3$. În caz contrar, este ușor de văzut că dacă $G \cong L_n$ sau $G \cong K_3$, atunci egalitatea stângă din relația (20) este valabilă.

□

Vom considera graful G^* din Fig. 7 (secțiunea 3.1.3).

Teorema 17. ([15]) Fie un graf conex G cu $n \geq 2$ noduri, m muchii și diametrul d . Atunci:

$$H(G) \geq H(L_{d+1}) + \frac{n^2 - n}{2d} + m - \frac{m}{d} - \frac{3d}{2} + \frac{1}{2} \quad (21)$$

$$H(G) \leq H(L_{d+1}) + \frac{n^2 - n}{4} + \frac{m}{2} - \frac{d^2 + 3d}{4} \quad (22)$$

Egalitatea din relația (21) este valabilă dacă și numai dacă G este un graf de diametrul cel mult 2 sau $G \cong L_n$. Egalitatea din relația (22) este valabilă dacă și numai dacă G este un graf care are diametrul cel mult 2 sau $G \cong L_n$ sau $G \cong G^*$.

Demonstrație. Cum graful G are diametrul d , atunci există un lanț L_{d+1} în graful G . De asemenea, există $\binom{n}{2}$ perechi de noduri la distanța cel puțin 1 și numărul de perechi de noduri la distanță 1 este egal cu m . Astfel, avem

$$H(L_{d+1}) - d + m + \left(\frac{n^2 - n}{2} - \frac{d^2 + d}{2} + d - m \right) \frac{d}{2} \leq H(G) \quad (23)$$

$$H(G) \leq H(L_{d+1}) - d + m + \left(\frac{n^2 - n}{2} - \frac{d^2 + d}{2} + d - m \right) \frac{1}{2} \quad (24)$$

Mai pe scurt, vom scrie

$$H(G) \geq H(L_{d+1}) + \frac{n^2 - n + 2md - 2m - 2d^2 + 2}{2d} - \frac{d + 1}{2}$$

$$H(G) \leq H(L_{d+1}) + \frac{n^2 - n + 2m}{4} - \frac{d^2 + 3d}{4}$$

Vom presupune că egalitatea din relația (21) este valabilă.

În acest caz, egalitatea din relația (23) este valabilă. Dacă $d \leq 2$, atunci egalitatea din relația (23) este valabilă și prin urmare G este un graf de diametrul cel mult 2.

În caz contrar, dacă $d \geq 3$, atunci egalitatea din relația (23) este valabilă dacă și numai dacă $\frac{n^2-n}{2} - \frac{d^2+d}{2} - m + d = 0$. Astfel,

$$\frac{n^2 - n}{2} - \frac{d^2 + d}{2} = -d + m = |E(G) \setminus E(L_{d+1})| \quad (25)$$

Vom discuta cazul în care $d \leq m$. Dacă $d = m$, atunci $n - 1 = d$ luând în calcul că G este un graf conex. Așadar relația (25) este valabilă și prin urmare graful G este un lanț L_n .

În caz contrar, dacă $d < m$ atunci oricare nod $u \in V(G) \setminus V(L_{d+1})$ cu proprietatea că este adiacent cu toate nodurile rămase și diametrul grafului G este cel mult 2.

Acest fapt reprezintă o contradicție.

Vom presupune că egalitatea din relația (22) este valabilă. Prin urmare, egalitatea din relația (24) este valabilă.

Dacă $d \leq 2$, atunci egalitatea din relația (24) este valabilă și prin urmare G este un graf de diametrul cel mult 2.

În caz contrar, dacă $d \geq 3$, atunci deducem că $n \geq d + 1$. Dacă $n = d + 1$, atunci graful G este un graf lanț L_n . Dacă această condiție nu este îndeplinită atunci $n \geq d + 2$. Conform egalității din relația (24), vom deduce că pentru orice nod $u \in V(G) \setminus V(L_{d+1})$, $d_G(u, v) = 1$ sau $d_G(u, v) = 2$ pentru orice nod $v \in V(G)$ diferit de u , unde L_{d+1} este un lanț de $d + 1$ noduri în G .

Deci diametrul grafului G este mai mic sau egal cu 4. Prin urmare graful G este izomorf cu G^* .

Este ușor de văzut că egalitatea din relația (21) este valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult 2 sau $G \cong L_n$. De asemenea, este ușor de văzut că egalitatea din relația (22) este valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult 2 sau $G \cong L_n$ sau $G \cong G^*$.

□

3.4.4 Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum

Propoziția 13. ([7]) Fie un graf conex G cu $n \geq 5$ noduri. Dacă \overline{G} este un graf conex cu diametrul egal cu 2, atunci:

$$H(G) + H(\overline{G}) \geq 1 + \frac{(n-1)^2}{2} + n \sum_{i=2}^{n-1} \frac{1}{i},$$

cu egalitate dacă și numai dacă graful $G \cong L_n$.

Demonstrație. Observăm că grafurile \overline{G} și $\overline{L_n}$ au diametrul egal cu 2.

Conform Teoremei 16, deducem că

$$H(G) + H(\overline{G}) \geq H(L_n) + \frac{1 - n + m}{2} + \frac{n^2 - n}{4} + \frac{1}{2} \left(\frac{n^2 - n}{2} - m \right)$$

$$\begin{aligned}
&\geq H(L_n) + \frac{n^2 - n}{4} + \frac{1}{2} \left[\frac{n^2 - n}{2} - (n - 1) \right] \\
&\geq H(L_n) + H(\overline{L_n})
\end{aligned}$$

cu egalitate dacă și numai dacă graful $G \cong L_n$. □

Teorema 18. ([15]) Fie un graf conex G care are $n \geq 2$ noduri. Dacă graful \overline{G} este conex, d este diametrul grafului G , \overline{d} este diametrul grafului \overline{G} și $t = \max\{d, \overline{d}\}$, atunci:

$$H(G) + H(\overline{G}) \geq H(L_{t+1}) + \frac{n^2 - n}{2} + \frac{n^2 - n}{2t} - 3t + \frac{7}{2}, \quad (26)$$

cu egalitate dacă și numai dacă grafurile G și \overline{G} au diametrul 2.

Demonstrație. Conform Teoremei 17, avem că

$$H(G) \geq H(L_{d+1}) + \frac{1}{2} - \frac{3d}{2} + \frac{\overline{m}}{d} + m,$$

unde m și \overline{m} reprezintă numărul de muchii ale grafurilor G , respectiv \overline{G} .

Folosind Propoziția 13, vom obține

$$H(G) + H(\overline{G}) \geq H(L_{d+1}) + H(L_{\overline{d}+1}) + 1 - \frac{3(d + \overline{d})}{2} + \frac{m}{d} + \frac{\overline{m}}{\overline{d}} + \overline{m} + t \quad (27)$$

$$\geq H(L_{d+1}) + H(L_{\overline{d}+1}) + (\overline{m} + m) \left(1 + \frac{1}{t}\right) - 3t + 1, \text{ unde } t = \max\{d, \overline{d}\} \quad (28)$$

$$\geq H(L_{t+1}) + \frac{n^2 - n}{2} + \frac{n^2 - n}{2t} - 3t + \frac{7}{2}, \quad (29)$$

Dacă putem presupune că egalitatea din relația (26) este valabilă, atunci toate egalitățile de mai sus trebuie să fie valabile. Dacă egalitatea din relația (27) este valabilă, atunci G este un graf cu diametrul 2 sau este un lanț L_n și \overline{G} este un graf cu diametrul 2 sau este un lanț L_n .

Din egalitatea relației (28), deducem că $t = d = \overline{d}$. De asemenea, din egalitatea relației (29), obținem că fie $d = 2$, fie $\overline{d} = 2$. Prin urmare, ambele grafuri G și \overline{G} au diametrul 2.

În caz contrar, este ușor de verificat că egalitatea din relația (26) este valabilă pentru grafurile G și \overline{G} de diametrul 2. □

3.5 Indicele armonic

3.5.1 Introducere

Fie un graf conex graful G cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor, respectiv muchiilor. *Indicele armonic al grafului G* îl vom nota cu $A(G)$ și îl vom defini ([20]) ca:

$$A(G) = \sum_{xy \in E(G)} \frac{2}{d_G(x) + d_G(y)}$$

Indicele armonic este înrudit cu indicele Randić, cel mai de succes descriptor molecular în ceea ce privește proprietățile ce au la bază structura moleculară.

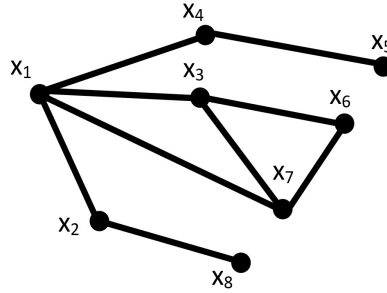


Fig. 15

Exemplu. Fie graful G din Fig. 15:

$$\begin{aligned}
 A(G) &= \sum_{xy \in E(G)} \frac{2}{d_G(x) + d_G(y)} = \frac{2}{d_G(x_4) + d_G(x_5)} + \frac{2}{d_G(x_1) + d_G(x_4)} + \frac{2}{d_G(x_1) + d_G(x_3)} \\
 &+ \frac{2}{d_G(x_3) + d_G(x_6)} + \frac{2}{d_G(x_6) + d_G(x_7)} + \frac{2}{d_G(x_3) + d_G(x_7)} + \frac{2}{d_G(x_1) + d_G(x_7)} \\
 &+ \frac{2}{d_G(x_1) + d_G(x_2)} + \frac{2}{d_G(x_2) + d_G(x_8)} = \frac{2}{3} + \frac{2}{6} + \frac{2}{7} + \frac{2}{5} + \frac{2}{5} + \frac{2}{6} + \frac{2}{7} + \frac{2}{6} + \frac{2}{3} \\
 &= 2 \cdot \left(\frac{2}{3}\right) + 3 \cdot \left(\frac{2}{6}\right) + 2 \cdot \left(\frac{2}{7}\right) + 2 \cdot \left(\frac{2}{5}\right) = 1, (3) + 1 + 0,57 + 0,8 = 3,70(3).
 \end{aligned}$$

3.5.2 Rezultate preliminarii

Vom începe prin a determina valoarea indicelui armonic pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui subcapitol.

Propoziția 14. Fie S_n , graful stea cu n noduri. Atunci $A(S_n) = \frac{2(n-1)}{n}$

Demonstrație. Prin calcul, obținem:

$$A(S_n) = (n-1) \left[\frac{2}{(n-1) + 1} \right] = \frac{2(n-1)}{n}$$

□

Propoziția 15. Fie L_n , lanțul cu n noduri. Atunci $A(L_n) = \frac{3n-1}{6}$

Demonstrație. Prin calcul obținem:

$$A(L_n) = 2 \left(\frac{2}{2+1} \right) + (n-3) \left(\frac{2}{4} \right) = \frac{4}{3} + \frac{n-3}{2} = \frac{3n-1}{6}.$$

□

Propoziția 16. Fie C_n , ciclul cu n noduri. Atunci $A(C_n) = \frac{n}{2}$

Demonstrație. Prin calcul avem:

$$A(C_n) = n \frac{2}{2+2} = \frac{n}{2}$$

□

Vom considera $K_{1,n-1}^+$, graful din Fig. 10 (secțiunea 3.2.2)

Propoziția 17. Dacă $G \cong K_{1,n-1}^+$, atunci $A(K_{1,n-1}^+) = \frac{5n^2+n-12}{2n(n+1)}$.

Demonstrație. Prin calcul obținem:

$$\begin{aligned} A(K_{1,n-1}^+) &= (n-3) \frac{2}{1+(n-1)} + \frac{4}{2+(n-1)} + \frac{2}{4} \\ &= \frac{2n-6}{n} + \frac{4}{n+1} + \frac{1}{2} = \frac{5n^2+n-12}{2n(n+1)} \end{aligned}$$

□

Lema 7. ([56]) Fie $T_M \in \mathcal{T}_n$, $n \geq 4$ cu diametrul k și având valoarea maximă a indicelui armonic. Fie $L_M = x_0, x_1, x_2, \dots, x_k$ lanțul de lungime k din graful T_M cu proprietatea că $d_{T_M}(x_0) = 1$ și $d_{T_M}(x_k) = 1$. Atunci $d_{T_M}(x_1) = 2$.

Demonstrație. Dacă $n \geq 4$, atunci $k \geq 3$. Altfel, $T_M \cong S_n$ ceea ce este o contradicție.

Conform ipotezei, știm că $d_{T_M}(x_0) = d_{T_M}(x_k) = 1$ și că $d_{T_M}(x_j) \geq 2$ pentru $1 \leq j \leq k-1$. Presupunem prin absurd că $d_{T_M}(x_1) = u \geq 3$.

Fie $N_{T_M}(x_1) \setminus \{x_0, x_2\} = \{m_1, m_2, \dots, m_{u-2}\}$ și fie $d_{T_M}(x_2) = v \geq 2$. Atunci $d_{T_M}(m_j) = 1$ pentru $1 \leq j \leq u-2$. În caz contrar, este ușor de văzut că există un lanț de lungime cel puțin $k+1$ în T_M ceea ce este o contradicție.

Fie $T' = T_M - \{x_1 m_1, x_1 m_2, \dots, x_1 m_{u-2}\} + \{x_0 m_1, m_1 m_2, \dots, m_{u-3} m_{u-2}\}$. Atunci T' este arborele cu diametrul cel puțin $k+1$, și prin urmare $T' \not\cong T_M$. Așadar, vom obține că

$$\begin{aligned} A(T') - A(T_M) &= \frac{2}{3} + \frac{u-2}{2} + \frac{2}{v+2} - \frac{2(u-1)}{u+1} - \frac{2}{u+v} \\ &= \frac{3u^2 - 11u + 10}{6(u+1)} + \frac{2(u-2)}{(v+2)(u+v)} > 0 \end{aligned}$$

și ultima inegalitate este valabilă deoarece $u \geq 3$. Dar $A(T') > A(T_M)$, ceea ce contrazice alegerea lui T_M și astfel demonstrația este încheiată.

□

Lema 8. ([56]) Fie T_M un arbore cu $n \geq 4$ noduri, diametrul k și cu valoarea maximă a indicelui armonic și fie $L_M = x_0, x_1, x_2, \dots, x_k$ lanțul de lungime k din graful T_M cu proprietatea că $d_{T_M}(x_0) = 1$ și $d_{T_M}(x_k) = 1$. Atunci $d_{T_M}(x_2) = 2$.

Demonstrație. Folosind același argument din Lema 7, deducem că $k \geq 3$, $d_{T_M}(x_1) = 2$ și că $d_{T_M}(x_j) \geq 2$ pentru $1 \leq j \leq k-1$.

Presupunem prin absurd că $d_{T_M}(x_2) = u \geq 3$.

Fie $N_{T_M}(x_2) \setminus \{x_1, x_3\} = \{m_1, m_2, \dots, m_{u-2}\}$ și fie $d_{T_M}(x_3) = v$. Dacă există o mulțime

de noduri m_j ($1 \leq j \leq u-2$) astfel încât $d_{T_M}(m_j) = 1$, atunci vom construi arborele $T_1 = T_M - x_2m_j + x_0m_j$. Este evident că $A(T_1) > A(T_M)$, contradicție. Astfel, vom presupune că $d_{T_M}(m_j) \geq 2$ pentru orice $1 \leq j \leq u-2$.

Fie $N_{T_M}(m_1) \setminus \{x_2\} = \{n_1, n_2, \dots, n_l\}$. Atunci știm că $d_{T_M}(n_i) = 1$ pentru orice $1 \leq i \leq l$. În caz contrar, se poate găsi un lanț de lungime cel puțin $k+1$ în T_M , ceea ce e o contradicție.

Dacă $l \geq 2$, atunci vom construi arborele $T_2 = T_M - m_1n_1 + x_0n_1$. Este ușor de calculat că $A(T_2) > A(T_M)$, ceea ce este o contradicție. Prin urmare, vom asuma că $l = 1$ și deci $d_{T_M}(m_1) = 2$.

Conform raționamentului pentru m_1 , deducem că pentru orice $1 \leq i \leq u-2$ avem $d_{T_M}(m_i) = 2$ și $d_{T_M}(n_i) = 1$, unde $n_i = N_{T_M}(m_i) \setminus \{x_2\}$.

Fie $T' = T_M - \{x_2m_1, m_1n_1, x_2m_2, m_2n_2, \dots, x_2m_{u-2}, m_{u-2}n_{u-2}\} + \{x_0m_1, m_1m_2, \dots, m_{u-2}n_1, n_1n_2, \dots, n_{u-3}n_{u-2}\}$. Atunci T' este arborele cu diametrul cel puțin $k+2$, și prin urmare $T' \not\approx T_M$. Așadar, vom obține că

$$\begin{aligned} A(T') - A(T_M) &= u - 2 + \frac{1}{2} + \frac{2}{v+2} - \frac{2(u-1)}{u+2} - \frac{2}{u+v} - \frac{2(u-2)}{3} \\ &= \frac{2u^2 - 9u + 10}{6(u+2)} + \frac{2(u-2)}{(v+2)(u+v)} > 0, \end{aligned}$$

și ultima inegalitate este valabilă deoarece $u \geq 3$. Dar $A(T') > A(T_M)$, ceea ce contrazice alegerea lui T_M și astfel demonstrația este încheiată. \square

Lema 9. ([34]) Fie G un graf cu $v \geq 4$ noduri. Dacă există o muchie ew cu proprietatea că $d_G(e) \geq 2$ și $d_G(w) \geq 2$ și $N_G(e) \cap N_G(w) = \emptyset$, atunci prin contractarea muchiei ew la nodul e' și adăugând o muchie pendentă $e'w'$ la nodul e' , vom obține graful notat H . Atunci $A(H) < A(G)$.

Demonstrație. Presupunem că $N_G(e) \setminus \{w\} = \{m_1, m_2, \dots, m_{d_G(e)-1}\}$ și că $N_G(w) \setminus \{e\} = \{l_1, l_2, \dots, l_{d_G(w)-1}\}$.

Cum $d_G(e) \geq 2$ și $d_G(w) \geq 2$, putem deduce că $d_G(e) - 1 > 0$ și $d_G(w) - 1 > 0$. Atunci, vom obține:

$$\begin{aligned} A(H) - A(G) &= \frac{2}{d_G(e) + d_G(w) - 1 + 1} - \frac{2}{d_G(e) + d_G(w)} \\ &+ \sum_{k=1}^{d_G(e)-1} \frac{2}{d_G(e) + d_G(w) - 1 + d_G(m_k)} + \sum_{i=1}^{d_G(w)-1} \frac{2}{d_G(e) + d_G(w) - 1 + d_G(l_i)} \\ &- \sum_{k=1}^{d_G(e)-1} \frac{2}{d_G(e) + d_G(m_k)} - \sum_{i=1}^{d_G(w)-1} \frac{2}{d_G(w) + d_G(l_i)} \\ &= \sum_{k=1}^{d_G(e)-1} \left[\frac{2}{d_G(e) + d_G(m_k) + d_G(w) - 1} - \frac{2}{d_G(e) + d_G(m_k)} \right] \\ &+ \sum_{i=1}^{d_G(w)-1} \left[\frac{2}{d_G(w) + d_G(l_i) + d_G(e) - 1} - \frac{2}{d_G(w) + d_G(l_i)} \right] < 0 \end{aligned}$$

\square

3.5.3 Grafuri extremale

Teorema 19. ([56]) Fie un arbore $T \in \mathcal{T}_n$, $n \geq 3$. Atunci

$$A(T) \geq \frac{2(n-1)}{n},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $T \cong S_n$.

Demonstrație. Cum $S_3 = L_3$ este unicul arbore cu trei noduri, cazul $n = 3$ este evident. Presupunem că teorema este valabilă pentru $j \geq 3$. Vom arăta că este de asemenea, valabilă pentru $j + 1$.

Fie $T \in \mathcal{T}_{j+1}$. Atunci T conține cel puțin două noduri pendante. Fie xy o muchie în T cu proprietatea că $d_T(y) = 1$. Deoarece $j \geq 3$, deducem că $2 \leq d_T(x) = t \leq j$. Fie $N_T(x) \setminus \{y\} = \{y_1, y_2, \dots, y_{t-1}\}$ cu proprietatea că $d_T(y_k) = t_k$ pentru orice $1 \leq k \leq t-1$ și fie $T' = T - \{y\}$. Atunci $T' \in \mathcal{T}_j$. Conform ipotezei de inducție avem $A(T') \geq \frac{2(j-1)}{j}$. Prin urmare:

$$\begin{aligned} A(T) &= A(T') + \frac{2}{t+1} + \sum_{k=1}^{t-1} \frac{2}{t_k+t} - \sum_{k=1}^{t-1} \frac{2}{t_k+t-1} \\ &= A(T') + \frac{2}{t+1} - \sum_{k=1}^{t-1} \frac{2}{(t_k+t-1)(t_k+t)} \geq \frac{2(j-1)}{j} + \frac{2}{t+1} - \sum_{k=1}^{t-1} \frac{2}{t(t+1)} \\ &= \frac{2(j-1)}{j} + \frac{2}{t(t+1)} \geq \frac{2(j-1)}{j} + \frac{2}{j(j+1)} = \frac{2j}{j+1}, \end{aligned}$$

și egalitatea are loc dacă și numai dacă $T \cong S_{j+1}$. Demonstrația este încheiată. □

Teorema 20. ([56]) Fie un arbore $T \in \mathcal{T}_n$, $n \geq 4$. Atunci

$$A(T) \leq \frac{4}{3} + \frac{n-3}{2},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $T \cong L_n$.

Demonstrație. Cum L_4 și S_4 sunt unicii arbori cu patru noduri și $A(L_4) = \frac{4}{3} + \frac{1}{2} > \frac{3}{2} = A(S_4)$, evident teorema este valabilă pentru $n = 4$. Presupunem că teorema este valabilă pentru $j \geq 4$. Vom arăta că este de asemenea, valabilă pentru $j + 1$.

Fie T_M un arbore cu $j + 1$ noduri, diametrul d și cu valoarea maximă a indicelui armonic, și fie $L_M = x_0x_1\dots x_d$ lanțul de lungime d din graful T_M cu proprietatea că $d_{T_M}(x_0) = 1$ și $d_{T_M}(x_d) = 1$.

Conform Lemei 7 și 8, știm că $d_{T_M}(x_1) = d_{T_M}(x_2) = 2$. Fie $T' = T_M - \{x_0\}$. Atunci T' este un arbore cu j noduri. Conform ipotezei de inducție avem $A(T') \leq \frac{4}{3} + \frac{j-3}{2}$. Prin urmare:

$$A(T_M) = A(T') + \frac{1}{2} \leq \frac{4}{3} + \frac{j-3}{2} + \frac{1}{2} = \frac{4}{3} + \frac{(j+1)-3}{2}$$

și egalitatea are loc dacă și numai dacă $T \cong L_{j+1}$. Demonstrația este încheiată. □

Teorema 21. ([34]) Fie un graf $G \in \text{Unicl}_n$ cu $n \geq 3$ noduri . Atunci :

$$A(G) \geq A(K_{1,n-1}^+) = \frac{5n^2 + n - 12}{2n(n+1)},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}^+$

Demonstrație. Conform Propoziției 17, știm că $A(K_{1,n-1}^+) = \frac{5n^2+n-12}{2n(n+1)}$. Vom considera cazul în care $n \geq 5$, deoarece cazurile $n = 3$ și $n = 4$ sunt relativ simple.

Presupunem prin reducere la absurd că există un graf unicitic H (diferit de $K_{1,n-1}^+$) care are valoarea minimă a indicelui armonic. Cum $n \geq 5$ și $H \neq K_{1,n-1}^+$, atunci $\text{diam}(H) > 2$. Deci există un lanț L de lungime cel puțin 3 în H . Fie xy o muchie în L cu $d_H(x) \geq 2$ și $d_H(y) \geq 2$.

Dacă $N_H(x) \cap N_H(y) = \emptyset$, atunci conform Lemei 9 putem obține un nou graf H' , astfel încât $A(H') < A(H)$, ceea ce este o contradicție. Dacă $N_H(x) \cap N_H(y) \neq \emptyset$, atunci există doar un nod $v \in N_H(x) \cap N_H(y)$ pentru graful unicitic H .

Vom stabili că muchiile incidente cu $\{x, y, v\}$, altele decât xy , yv și xv sunt muchii pendante. În caz contrar, pentru că xyv este unicul ciclu în H , atunci există o muchie care satisface condiția din Lema 9. Deci, putem obține un nou graf H' , astfel încât $A(H') < A(H)$, ceea ce este o contradicție.

Fără a pierde generalitatea, putem să asumăm $d_H(x) \geq d_H(y) \geq d_H(v) \geq 2$ și $d_H(x) \geq 3$. Prin ștergerea unei muchii pendante incidente cu nodul y și adăugarea acesteia la nodul x , vom obține un nou graf H' . Deci, vom obține:

$$\begin{aligned} A(H') - A(H) &= \frac{2(d_{H'}(x) + d_{H'}(y) - 4)}{d_{H'}(x) + d_{H'}(v) - 2 + 1} + \frac{2}{d_{H'}(v) + 2} - \frac{2(d_H(x) - 2)}{d_H(x) + 1} \\ &\quad + \frac{2}{d_{H'}(x) + d_{H'}(y) - 2 + d_{H'}(v)} - \frac{2}{d_H(x) + d_H(v)} - \frac{2}{d_H(y) + d_H(v)} - \frac{2(d_H(y) - 2)}{d_H(y) + 1} \\ &\leq \frac{6(d_{H'}(y) - 2)}{(d_H(x) + 1)(d_{H'}(x) + d_{H'}(y) - 1)} + \frac{2(d_{H'}(y) - 2)}{(d_{H'}(v) + d_{H'}(v))(d_{H'}(v) + 2)} - \frac{2(d_H(y) - 2)}{d_H(y) + 1} \\ &\leq \frac{2(d_{H'}(y) - 2)}{(d_{H'}(y) + 2)} - \frac{2(d_H(y) - 2)}{d_H(y) + 1} < 0. \end{aligned}$$

Contradicția completează demonstrația. □

3.6 Indicele Merrifield-Simmons și Indicele Hosoya

3.6.1 Introducere

Fie un graf conex G cu n noduri, cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor. *Indicele Merrifield-Simmons al grafului G* îl vom nota cu $\sigma(G)$ și îl vom defini ([42]) ca:

$$\sigma(G) = \sum_{j=0}^n \sigma_G(j),$$

unde $\sigma_G(j)$ reprezintă numărul de k -mulțimi independente ale grafului G , iar *indicele Hosoya al grafului G* îl vom nota cu $Z(G)$ și îl vom defini ([31]) ca:

$$Z(G) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} z_G(j),$$

unde $z_G(j)$ reprezintă numărul de k -cuplaje ale grafului G .

Indicii Hosoya și Merrifield-Simmons sunt utilizați pentru corelarea cu punctele de fierbere, determinarea entropiilor și a legăturilor anumitor hidrocarburi saturate.

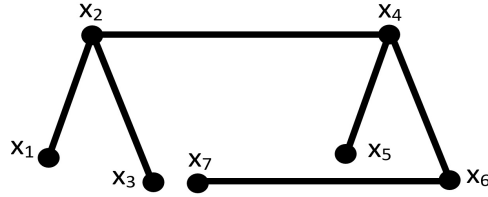


Fig. 16

Exemplu. Fie graful G din Fig. 16.

$$\begin{aligned} \sigma(G) &= \sum_{j=0}^7 \sigma_G(j) = \sigma_G(0) + \sigma_G(1) + \sigma_G(2) + \sigma_G(3) + \sigma_G(4) + \sigma_G(5) + \sigma_G(6) + \sigma_G(7) = \\ &= 1 + 7 + 15 + 12 + 3 = 38 \end{aligned}$$

$$Z(G) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{7}{2} \rfloor} z_G(j) = z_G(0) + z_G(1) + z_G(2) + z_G(3) = 1 + 6 + 8 + 2 = 17$$

3.6.2 Rezultate preliminare

Vom începe prin a demonstra câteva rezultate premergătoare celor prin care determinăm valoarea indicilor Merrifield-Simmons și Hosoya pentru anumite clase de grafuri.

Lema 10. ([38]) Fie un graf G și fie G_1, G_2, \dots, G_k componentele acestuia. Atunci

$$\sigma(G) = \prod_{i=1}^k \sigma(G_i)$$

Demonstrație. Lema este adevărată datorită faptului că fiecare mulțime independentă în graful G este o uniune a mulțimilor independente din G_1, G_2, \dots, G_k . □

Lema 11. ([38]) Fie un graf G și fie u un nod al grafului G . Atunci

$$\sigma(G) = \sigma(G - u) + \sigma(G - u - N_G(u))$$

Demonstrație. Fie S o mulțime de independență în graf G . Atunci fie $u \in S$, fie $u \notin S$. În primul caz, $S = \{u\} \cup A$ pentru o mulțime independentă A în $G - u - N_G(u)$.

În al doilea caz, S este o mulțime independentă în $G - u$.

În caz contrar, fiecare mulțime independentă în $G - u$ este independentă în G și pentru fiecare mulțime independentă A în $G - u - N_G(u)$, avem că $A \cup \{u\}$ este de asemenea, independentă în G . Demonstrația este încheiată. \square

Lema 12. ([29]) Fie un graf G care are n noduri, cu m muchii și fie două noduri adiacente x, y astfel încât w să fie muchia care le unește. Atunci

$$Z(G) = Z(G - w) + Z(G - x - y)$$

Demonstrație. Este evident că $z_G(0) = 1, z_G(1) = m$. Toate k -cuplajele grafului G pot fi împărțite în două grupuri: cele care conțin muchia w și cele care nu conțin muchia w .

Modul în care putem selecta k muchii independente din graf G , astfel încât muchia w să nu se afle printre muchiile selectate este în mod evident egal cu numărul total de selecții de k muchii independente din graf $G - w$: $z_{G-w}(k)$. Dacă muchia w este selectată, atunci trebuie să găsim suplimentar $k - 1$ muchii independente ale grafului G , care în consecință, nu trebuie să fie incidente cu nodurile x și y . Numărul acestor selecții este $z_{G-x-y}(k - 1)$. Pentru a încheia demonstrația sumăm relația pe care am demonstrat-o pentru $k = 0$ până la $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, obținând $Z(G) = Z(G - w) + Z(G - x - y)$. \square

Propoziția 18. Fie K_n , graf K_n complet cu n noduri. Atunci $\sigma(K_n) = n + 1$.

Demonstrație. Calculăm valoarea indicelui Merrifield-Simmons.

$$\sigma(K_n) = \sigma_{K_n}(0) + \sigma_{K_n}(1) + \sigma_{K_n}(2) + \dots + \sigma_{K_n}(n) = 1 + n + 0 + \dots + 0 = n + 1$$

\square

Propoziția 19. Fie $K_{1,n-1}$, graf $K_{1,n-1}$ stea cu n noduri. Atunci $Z(K_{1,n-1}) = n$

Demonstrație. Calculăm valoarea indicelui Hosoya:

$$\begin{aligned} Z(K_{1,n-1}) &= z_{K_{1,n-1}}(0) + z_{K_{1,n-1}}(1) + z_{K_{1,n-1}}(2) + \dots + z_{K_{1,n-1}}(\lfloor \frac{n}{2} \rfloor) \\ &= 1 + (n - 1) + 0 + \dots + 0 = n \end{aligned}$$

\square

Propoziția 20. Fie $K_{1,n-1}$, graf $K_{1,n-1}$ stea cu n noduri. Atunci $\sigma(K_{1,n-1}) = 2^{n-1} + 1$

Demonstrație. Obținem prin calcul valoarea indicelui Merrifield-Simmons:

$$\sigma(K_{1,n-1}) = \sigma_{K_{1,n-1}}(0) + \sigma_{K_{1,n-1}}(1) + \sigma_{K_{1,n-1}}(2) + \dots + \sigma_{K_{1,n-1}}(n) =$$

$$\begin{aligned}
&= 1 + n + \binom{2}{n-1} + \binom{3}{n-1} + \dots + \binom{n-1}{n-1} \\
&= 1 + (n-1) + \binom{2}{n-1} + \binom{3}{n-1} + \dots + \binom{n-1}{n-1} + 1 \\
&= \binom{0}{n-1} + \binom{1}{n-1} + \binom{2}{n-1} + \binom{3}{n-1} + \dots + \binom{n-1}{n-1} + 1 \\
&= 2^{n-1} + 1
\end{aligned}$$

□

Propoziția 21. ([29]) Fie L_n , lanțul cu n noduri. Atunci $Z(L_n) = F_{n+1}$, unde F_n reprezintă al n -lea termen al șirului lui Fibonacci.

Demonstrație. Pentru cazurile în care $n = 3, 4$ este evident că $Z(L_n)$ este egal cu $F_4 = 5$, respectiv $F_5 = 8$. Pentru $n > 5$ calculăm valoarea indicelui Hosoya.

Conform Lemei 12, vom obține că: $Z(L_n) = Z(L_{n-1}) + Z(L_{n-2})$. Această relație formează un șir recurent care are o unică soluție și anume $x_n = \frac{1}{\sqrt{5}}[(\frac{1+\sqrt{5}}{2})^{n+1} - (\frac{1-\sqrt{5}}{2})^{n+1}]$, ce reprezintă Formula lui Binet pentru al $n + 1$ -lea termen al șirului lui Fibonacci.

Propoziția 22. ([44]) Fie L_n , lanțul cu n noduri. Atunci $\sigma(L_n) = F_{n+1}$, unde F_n reprezintă al n -lea termen al șirului lui Fibonacci.

Demonstrație. Pentru cazurile în care $n = 3, 4$ este evident că $\sigma(L_n)$ este egal cu $F_4 = 5$, respectiv $F_5 = 8$. Pentru cazul $n > 5$, vom calcula valoarea indicelui Merrifield-Simmons. Conform Lemei 11, vom obține $\sigma(L_n) = \sigma(L_{n-1}) + \sigma(L_{n-2})$. Această relație formează un șir recurent care are o unică soluție: $x_n = \frac{1}{\sqrt{5}}[(\frac{1+\sqrt{5}}{2})^{n+1} - (\frac{1-\sqrt{5}}{2})^{n+1}]$, ce reprezintă Formula lui Binet pentru al $n + 1$ -lea termen al șirului lui Fibonacci.

□

3.6.3 Grafuri extremale

Teorema 22. ([37]) Fie un graf G de ordinul n . Atunci:

$$\sigma(K_n) \leq \sigma(G) \leq \sigma(K_{1,n-1})$$

Demonstrație. Este evident că orice graf cu n noduri are valoarea indicelui Merrifield-Simmons cel puțin $n + 1$.

Cum $\sigma(K_n) = n + 1$, atunci K_n are valoarea minimă a indicelui Merrifield-Simmons. Pentru orice graf cu n noduri, dacă există o pereche de noduri care nu sunt adiacente, atunci valoarea indicelui Merrifield-Simmons este cel puțin $n + 2$. Deci K_n este unicul graf cu valoarea minimă a indicelui Merrifield-Simmons.

Vom demonstra că $K_{1,n-1}$ este unicul graf cu valoarea maximă a indicelui Merrifield-Simmons în mulțimea grafurilor conexe cu n noduri.

Valoarea indicelui Merrifield-Simmons al oricărui graf G este cel mult valoarea indicelui Merrifield-Simmons al unui arbore T cu proprietatea că $\sigma(G) \leq \sigma(T)$, unde egalitatea are loc dacă și numai dacă graful G este un arbore. Vom completa demonstrația cu ajutorul unei inducții după n . Presupunem că graful $K_{1,n-2}$ este unicul graf cu valoarea maximă a indicelui Merrifield-Simmons în mulțimea grafurilor conexe cu $n - 1$ noduri.

Fie un graf conex H cu $n > 1$ noduri cu valoarea maximă a indicelui Merrifield-Simmons. Graful H trebuie să fie un arbore. În acest caz, vom alege un nod pendent x în graful H și fie y singurul său nod adiacent. Atunci:

$$\sigma(H) = \sigma(H - x) + \sigma(H - x - y).$$

Graful $H - x$ are $n - 1$ noduri și graful $H - x - y$ are $n - 2$ noduri. Conform ipotezei de inducție, $\sigma(H)$ atinge valoarea maximă dacă și numai dacă $H - x$ este un graf stea și $H - x - y$ este un graf cu $n - 2$ noduri izolate, care este valabilă dacă și numai dacă graful H este un graf stea. \square

Teorema 23. ([37]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Atunci:

$$\sigma(L_n) \leq \sigma(T) \leq \sigma(K_{1,n-1})$$

Demonstrație. Cum arborele $K_{1,n-1}$ este unicul graf cu valoarea maximă a indicelui Merrifield-Simmons printre grafurile conexe cu n noduri, atunci este și unicul arbore cu aceeași proprietate.

Vom demonstra că L_n este unicul arbore cu valoarea minimă a indicelui Merrifield-Simmons cu ajutorul unei inducții după n .

Presupunem că L_{n-1} este unicul arbore cu $n - 1$ noduri cu valoarea maximă a indicelui Merrifield-Simmons în mulțimea arborilor cu $n - 1$ noduri.

Vom considera un arbore T cu n noduri. În acest caz, vom alege un nod pendent k în arborele T și fie t singurul său nod adiacent. Atunci:

$$\sigma(T) = \sigma(T - k) + \sigma(T - k - t).$$

Luând în considerare ipoteza de inducție, $\sigma(T)$ atinge valoarea minimă dacă și numai dacă $\sigma(T - k)$ și $\sigma(T - k - t)$ ating minimul. Acest lucru se întâmplă dacă și numai dacă $T - k$ și $T - k - t$ sunt lanțuri. Prin urmare T este un lanț. \square

Teorema 24. ([29, 37]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Atunci:

$$Z(K_{1,n-1}) \leq Z(T) \leq Z(L_n)$$

Demonstrație. Pentru orice arbore T cu n noduri, avem că $z_T(1) = n - 1$. Este evident că în graful stea nu există două muchii care să fie reciproc independente. Prin urmare, $z_{K_{1,n-1}}(r) = 0$ pentru orice $r \geq 2$.

Vom demonstra că L_n este unicul arbore cu valoarea maximă a indicelui Hosoya. Fie un arbore T cu n noduri. Vom alege un nod x al arborelui T astfel încât toți vecini săi mai puțin unul sunt noduri pendante în T . Conform Lemei 12, vom obține:

$$Z(T) = Z(T - y_1 - y_2 - \dots - y_{d_T(x)-1}) + (d_T(x) - 1)Z(T - x - y_1 - y_2 - \dots - y_{d_T(x)-1}),$$

unde $y_1, y_2, \dots, y_{d_T(x)-1}$ sunt nodurile pendante ale arborelui T care sunt adiacente cu nodul x .

Observăm că $T - y_1 - y_2 - \dots - y_{d_T(x)-1}$ este un arbore cu $n - d_T(x) + 1$ noduri și $T - x - y_1 - \dots - y_{d_T(x)-1}$ este un arbore cu $n - d_T(x)$ noduri.

Prin inducție după n , vom obține că:

$$Z(T) \leq Z(L_{n-d_T(x)+1}) + (d_T(x) - 1)Z(L_{n-d_T(x)}) = F_{n-d_T(x)+1} + (d_T(x) - 1)F_{n-d_T(x)}$$

Cum $d_T(x) - 1 \leq F_{d_T(x)} - 1$ ($d_T(x) \geq 2$), vom obține:

$$\begin{aligned} Z(T) &\leq F_{n-d_T(x)+1} + (F_{d_T(x)} - 1)F_{n-d_T(x)} = F_{n-d_T(x)+1} + (F_{d_T(x)-1} + F_{d_T(x)-2} - 1)F_{n-d_T(x)} \\ &= F_{n-d_T(x)+1} + F_{d_T(x)-2}F_{n-d_T(x)} + (F_{d_T(x)-1} - 1)F_{n-d_T(x)} \\ &\leq F_{d_T(x)-2}F_{n-d_T(x)} + F_{n-d_T(x)+1} + (F_{d_T(x)-1} - 1)F_{n-d_T(x)+1} \\ &= F_{d_T(x)-1}F_{n-d_T(x)+1} + F_{d_T(x)-2}F_{n-d_T(x)} \end{aligned}$$

Știind că $F_{a+b} = F_a F_{b+1} + F_{a-1} F_b$, am obținut că $Z(T) \leq F_n$ luând în considerare că $a = d_T(x) - 1$ și $b = n - d_T(x)$.

Așadar, $Z(T) \leq Z(L_n)$, iar egalitatea are loc dacă și numai dacă $d_T(x) = 2$. Acest fapt implică că L_n este unicul arbore cu valoarea minimă a indicelui Hosoya. \square

3.7 Indicele sumă-conectivitate

3.7.1 Introducere

Fie un graf conex G , cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor. *Indicele sumă-conectivitate al grafului G* îl vom nota cu $\chi(G)$ și îl vom defini ([45]) ca:

$$\chi(G) = \sum_{xy \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) + d_G(y)}}$$

Indicele sumă-conectivitate se consideră a fi indicele înrudit cu indicele Randić deoarece valorile lor sunt puternic corelate, mai ales în cazul alcanilor inferiori. În literatura de specialitate, există numeroase rezultate ce descriu legătura dintre acești doi indici pentru proprietăți ale hidrocarburilor benzenoide inferioare. Indicele sumă-conectivitate a adus un aport important în studiul energiei π -electronică.

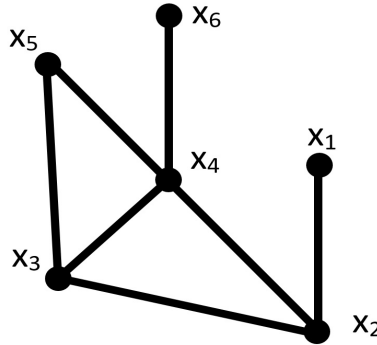


Fig. 17

Exemplu. Fie graful G din Fig. 17.

$$\begin{aligned} \chi(G) &= \sum_{xy \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) + d_G(y)}} = \frac{1}{\sqrt{1+3}} + \frac{1}{\sqrt{3+3}} + \frac{1}{\sqrt{3+4}} + \frac{1}{\sqrt{3+4}} + \frac{1}{\sqrt{3+2}} \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{4+2}} + \frac{1}{\sqrt{4+1}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{6}} + \frac{1}{\sqrt{7}} + \frac{1}{\sqrt{7}} + \frac{1}{\sqrt{5}} + \frac{1}{\sqrt{6}} + \frac{1}{\sqrt{5}} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{2}{\sqrt{5}} + \frac{2}{\sqrt{6}} + \frac{2}{\sqrt{7}}. \end{aligned}$$

3.7.2 Rezultate preliminare

Vom începe să arătăm care este valoarea indicelui sumă-conectivitate pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui subcapitol.

Propoziția 23. Fie L_n , lanțul cu n noduri. Atunci $\chi(L_n) = \frac{2}{\sqrt{3}} + \frac{n-3}{2}$.

Demonstrație. Vom calcula valoarea indicelui sumă-conectivitate.

$$\chi(L_n) = \sum_{xy \in L_n} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) + d_G(y)}} = (n-2-1) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2+2}}\right) + 2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = \frac{2}{\sqrt{3}} + \frac{n-3}{2}$$

□

Propoziția 24. Fie S_n , graful stea cu n noduri. Atunci $\chi(S_n) = \frac{n-1}{\sqrt{n}}$.

Demonstrație. Vom calcula valoarea indicelui sumă-conectivitate.

$$\chi(S_n) = \sum_{xy \in S_n} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) + d_G(y)}} = (n-1) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{n-1+1}}\right) = \frac{n-1}{\sqrt{n}}.$$

□

Notăție. Fie n, k numere naturale, $2 \leq k \leq n-1$. Vom nota cu $T_{n,k}$ graful obținut dintr-un graf lanț L_{n-k+1} prin adăugarea a $k-1$ noduri pendante la unul dintre nodurile de grad 1 (Fig. 18).

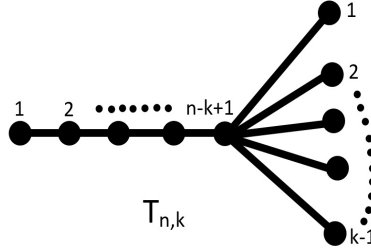


Fig. 18

Propoziția 25. ([51]) Fie un graf G cu $t \geq 1$ muchii. Atunci

$$\chi(G) \geq \frac{t\sqrt{t}}{\sqrt{\sum_{xy \in E(G)} d_G(x) + d_G(y)}},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $d_G(x) + d_G(y)$ are o valoare constantă pentru orice muchie $xy \in E(G)$. În particular, $\chi(G) \geq \frac{t}{\sqrt{t+1}}$.

Demonstrație. Deoarece funcția \sqrt{x} este convexă pentru $x > 0$, atunci:

$$\sum_{xy \in E(G)} \frac{\sqrt{d_G(x) + d_G(y)}}{t} \geq \sqrt{\sum_{xy \in E(G)} \frac{d_G(x) + d_G(y)}{t}}$$

și atunci

$$\chi(G) \geq t \sqrt{\sum_{xy \in E(G)} \frac{d_G(x) + d_G(y)}{t}} = \frac{t\sqrt{t}}{\sqrt{\sum_{xy \in E(G)} d_G(x) + d_G(y)}} =$$

$$= \frac{t\sqrt{t}}{\sqrt{\sum_{xy \in E(G)} d_G(x) + d_G(y)}}$$

cu egalitate dacă și numai dacă $d_G(x) + d_G(y)$ este constant pentru orice muchie $xy \in E(G)$.

Dacă vom presupune că $d_G(x) + d_G(y) \leq t + 1$, cu egalitate dacă și numai dacă orice altă muchie a grafului G este adiacentă muchiei xy , atunci:

$$\sum_{xy \in E(G)} d_G(x) + d_G(y) \leq \sum_{xy \in E(G)} (t + 1) = t(t + 1)$$

și prim urmare $\chi(G) \geq \frac{t}{\sqrt{t+1}}$. □

Propoziția 26. ([51]) Fie un graf G de ordinul n , $n \geq 5$ care nu conține noduri izolate. Atunci:

$$\chi(G) \geq \frac{n-1}{\sqrt{n}},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $G \cong S_n$.

Demonstrație. Dacă vom presupune că graful G este conex cu t muchii, atunci $t \geq n - 1$. Este evident că funcția $\frac{t}{\sqrt{t+1}}$ este o funcție crescătoare pentru $t \geq 1$. Conform Propoziției anterioare, deducem că:

$$\chi(G) \geq \frac{t}{\sqrt{t+1}} \geq \frac{n-1}{\sqrt{n}}$$

cu egalitate dacă și numai dacă $G \cong S_{t+1}$. Deoarece $t = n - 1$, atunci $G \cong S_n$.

Dacă vom presupune că graful G este neconex cu componentele H_1, H_2, \dots, H_r cu $r \geq 2$, atunci vom nota cu h_r numărul de noduri ale componentei H_r . Prin urmare $h_r \geq 2$, $\sum_{j=1}^r h_j = n$ și

$$\chi(G) = \sum_{j=1}^r \chi(H_j) \geq \sum_{j=1}^r \frac{h_j - 1}{\sqrt{h_j}}$$

Dacă $n \geq 6$ și $h_j = 2$ pentru orice $j = 1, 2, \dots, r$, atunci

$$\chi(G) \geq \sum_{j=1}^r \frac{h_j - 1}{\sqrt{h_j}} = \frac{n}{2\sqrt{2}} > \frac{n-1}{\sqrt{n}}$$

Dacă vom presupune că cel puțin unul dintre h_j pentru $j = 1, 2, \dots, r$ este egal cu cel puțin 3, atunci vom considera că acesta este $h_1 \geq 3$. Vom nota cu $f(z) = \frac{z-1}{\sqrt{z}}$ cu $z \geq 1$. Dacă observăm că $f''(z) < 0$, atunci $f(z) - f(z-2)$ este o funcție descrescătoare pentru $z \geq 3$. Prin urmare

$$\frac{h_1 + h_2 - 1}{\sqrt{h_1 + h_2}} - \frac{h_1 + h_2 - 3}{\sqrt{h_1 + h_2 - 2}} \leq \frac{4}{\sqrt{5}} - \frac{2}{\sqrt{3}} < \frac{1}{\sqrt{2}}$$

și deci,

$$\frac{h_1 - 1}{\sqrt{h_1}} + \frac{h_2 - 1}{\sqrt{h_2}} = (\sqrt{h_1} + \sqrt{h_2}) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{h_1 h_2}}\right) \geq (\sqrt{h_1 + h_2 - 2} + \sqrt{2}) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2(h_1 + h_2 - 2)}}\right)$$

$$= \frac{h_1 + h_2 - 3}{\sqrt{h_1 + h_2 - 2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} > \frac{h_1 + h_2 - 1}{\sqrt{h_1 + h_2}}$$

Aşadar, vom obține că:

$$\chi(G) > \frac{h_1 + h_2 + h_3 - 1}{\sqrt{h_1 + h_2 + h_3}} + \sum_{j=4}^r \frac{h_j - 1}{\sqrt{h_j}} > \dots > \frac{h_1 + h_2 + \dots + h_r - 1}{\sqrt{h_1 + h_2 + \dots + h_r}} = \frac{n - 1}{\sqrt{n}}$$

□

Lema 13. Fie k număr real pozitiv. Atunci:

- (a) $r(k) = \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-2}{\sqrt{k+1}} - \frac{k-2}{\sqrt{k}}$ este o funcție descrescătoare pentru $k > 0$.
(b) $m(k) = \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{n-k-2}{2}$ este o funcție descrescătoare pentru $2 \leq k \leq n-2$.

Demonstrație. (a) Dacă vom nota cu $r_1(k) = \frac{1}{\sqrt{k+1}} + \frac{k-2}{\sqrt{k}}$, atunci $r(k) = r_1(k+1) - r_1(k)$. Deoarece $r_1''(k) = \frac{3}{4\sqrt{(k+1)^5}} - \frac{1}{4\sqrt{k^3}} - \frac{3}{2\sqrt{k^5}} < 0$, atunci funcția $r_1'(k)$ este o funcție descrescătoare. Prin urmare $r'(k) = r_1'(k+1) - r_1'(k) < 0$, ceea ce implică că $r(k)$ este o funcție descrescătoare.

(b) Este ușor de observat că $m(k+1) - m(k) = (\frac{1}{\sqrt{k+3}} - \frac{1}{2}) + (k-1)(\frac{1}{\sqrt{k+2}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}) < 0$, ceea ce implică că funcția $m(k)$ este o funcție descrescătoare.

□

Lema 14. ([51]) Fie T un arbore cu n noduri și k noduri pendante, unde $2 \leq k \leq n-2$. Dacă x este un nod pendent adiacent nodului y , atunci:

$$\chi(T) - \chi(T-x) \geq \frac{k-2}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{k+2}} - \frac{k-2}{\sqrt{k}},$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T \cong T_{n,k}$ și $d_T(y) = k$.

Demonstrație. Dacă vom observa că $k \leq n-2$, atunci mulțimea $N_G(y) \setminus \{x\}$ conține noduri cu gradul cel puțin 2. Este ușor de observat că:

$$\begin{aligned} \chi(T) - \chi(T-x) &= \frac{1}{\sqrt{d_T(y)+1}} - \sum_{v \in N_G(y) \setminus \{x\}} \left(\frac{1}{\sqrt{d_{T-x}(y)-1+d_{T-x}(v)}} - \frac{1}{\sqrt{d_{T-x}(y)+d_{T-x}(v)}} \right) \\ &\geq \frac{1}{\sqrt{d_T(y)+1}} - \left(\frac{1}{\sqrt{d_T(y)-1+2}} - \frac{1}{\sqrt{d_{T-x}(y)+2}} \right) \\ &\quad - (d_{T-x}(y)-2) \left(\frac{1}{\sqrt{d_{T-x}(y)-1+1}} - \frac{1}{\sqrt{d_{T-x}(y)+1}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{d_{T-x}(y)+2}} + \frac{d_{T-x}(y)-2}{\sqrt{d_{T-x}(y)+1}} - \frac{d_{T-x}(y)-2}{\sqrt{d_{T-x}(y)}} \end{aligned}$$

cu egalitate dacă și numai dacă printre cei $d_T(y)$ vecini ai nodului y se află unul de grad 2 și ceilalți sunt noduri de grad 1. Deoarece $d_T(y) \leq k$, atunci vom obține conform primului rezultat furnizat de Lema 13 că:

$$\chi(T) - \chi(T-x) \geq \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-2}{\sqrt{k+1}} - \frac{k-2}{\sqrt{k}}$$

cu egalitate dacă și numai dacă printre cei k vecini ai nodului y se află unul de grad 2 și ceilalți sunt noduri de grad 1. Prin urmare $T \cong T_{n,k}$ și $d_T(y) = k$. □

3.7.3 Grafuri extremale

Teorema 25. ([51]) Fie T un arbore cu n noduri și k noduri pendante, unde $3 \leq k \leq n - 2$. Atunci:

$$\chi(T) \geq \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{z-k-2}{2},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $T \cong T_{n,k}$.

Demonstrație. Vom demonstra folosind inducție după n .

Deoarece cazul $n = 5$ este evident, vom presupune că $n \geq 6$. Fie x un nod pendent adiacent cu nodul y . De asemenea, vom presupune că $d_T(y) = 2$.

Dacă $k = 3$, unicul nod v în $N_T(y) \setminus \{x\}$ are gradul cel puțin 2 și atunci:

$$\chi(T) - \chi(T-x) = \frac{1}{\sqrt{d_T(v)+2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{d_{T-x}(v)+1}} \geq \frac{1}{\sqrt{2+2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{2+1}} = \frac{1}{2},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $d_{T-x}(v) = 2$. În acest caz, arborele $T-x$ are k noduri pendante.

Dacă $k = n - 2$, atunci arborele $T-x$ este un graf stea și $T \cong T_{n,n-2}$.

Dacă $k \leq (n-1) - 2$, atunci conform ipotezei de inducție a arborelui $T-x$, vom obține că:

$$\chi(T) \geq \chi(T-x) + \frac{1}{2} \geq \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{n-k-2}{2},$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T-x \cong T_{n-1,k}$ și $d_T(v) = 2$. Prin urmare, deducem că $T \cong T_{n,k}$.

Acum vom presupune că $d_T(y) \geq 3$ și $k > 3$. Deci $T-x$ are $k-1$ noduri pendante. Conform ipotezei de inducție a arborelui $T-x$ și Lemei 14, obținem că:

$$\begin{aligned} \chi(T) &\geq \chi(T-x) + \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-2}{\sqrt{k+1}} - \frac{k-2}{\sqrt{k}} \\ &\geq \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} + \frac{k-2}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{n-k-2}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-2}{\sqrt{k+1}} - \frac{k-2}{\sqrt{k}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{n-k-2}{2}, \end{aligned}$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T-x \cong T_{n-1,k-1}$ și $d_T(y) = k$. Astfel, $T \cong T_{n,k}$. \square

Teorema 26. ([51]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$, un arbore cu $n \geq 4$ noduri. Atunci:

$$\chi(S_n) \leq \chi(T) \leq \chi(L_n)$$

Demonstrație. Demonstrăm prima inegalitate. Conform celui de al doilea rezultat dat de Lema 13, deducem că funcția $m(k) = \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{z-k-2}{2}$ are o valoare maximă și minimă, $m(2)$, respectiv $m(n-2)$.

Conform Propoziției 24 și 26, știm că:

$$\chi(G) \geq \frac{n-1}{\sqrt{n}}$$

cu egalitate dacă și numai dacă $G \cong S_n$.

Conform Teoremei 25, deducem că:

$$\chi(T) \geq m(2) \geq \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{k-1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{n-k-2}{2} \geq m(n-2).$$

Dar, $m(n-2) = \frac{1}{\sqrt{n}} + \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} + \frac{1}{\sqrt{3}} > \frac{n-1}{\sqrt{n}} = \chi(S_n)$ pentru $n \geq 4$. Așadar, $\chi(S_n) \leq \chi(T)$ cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T \cong S_n$.

Pentru a doua inegalitate, vom considera un graf conex H cu cel puțin două noduri. Fie i și j două numere naturale astfel încât $i \geq j \geq 1$. Vom construi grafurile H_1 și H_2 . Grafurile H_1 și H_2 sunt obținute din grafurile H prin atașarea a două lanțuri L_i și L_j de nodul $x \in V(H)$. Grafurile H_1 și H_2 sunt obținute din grafurile H prin atașarea unui lanț L_{i+j} de nodul $x \in V(H)$.

Dacă $i = 1$ și $j = 1$, atunci:

$$\begin{aligned} \chi(H_2) - \chi(H_1) &= \left(\frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 1}} \right) + \sum_{vx \in E(H)} \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) - 1 + d_H(v)}} \\ &\quad - \left(\frac{2}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 1}} + \sum_{vx \in E(H)} \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + d_H(v)}} \right) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 1}} \right) + \sum_{vx \in E(H)} \left(\frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) - 1 + d_H(v)}} - \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + d_H(v)}} \right) > 0 \end{aligned}$$

Dacă $i \geq 2$ și $j = 1$, atunci:

$$\begin{aligned} \chi(H_2) - \chi(H_1) &= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 2}} \right) \\ &\quad + \sum_{vx \in E(H)} \left(\frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) - 1 + d_H(v)}} - \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + d_H(v)}} \right) > 0 \end{aligned}$$

Dacă $i \geq 2$ și $j \geq 2$, atunci este ușor de verificat că funcția $\frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x)+1}} - \frac{2}{\sqrt{d_{H_1}(x)+2}}$ este o funcție crescătoare pentru $(1 + \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x)+1}})^3 \leq 4$ și pentru $d_{H_1}(x) \geq 3$. În acest caz, vom obține că:

$$\begin{aligned} \chi(H_2) - \chi(H_1) &= \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 1}} - \frac{2}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 2}} \right) \\ &\quad + \sum_{vx \in E(H)} \left(\frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) - 1 + d_H(v)}} - \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + d_H(v)}} \right) \\ &\geq 1 - \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 1}} - \frac{2}{\sqrt{d_{H_1}(x) + 2}} \geq 1 - \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3+1}} - \frac{2}{\sqrt{3+2}} > 0 \end{aligned}$$

Așadar, am obținut că $\chi(H_1) < \chi(H_2)$. Fie un arbore T cu $n \geq 4$ noduri. Dacă $T \not\cong L_n$, atunci prin aplicarea transformării descrise anterior asupra arborelui T de un număr finit de ori vom obține că $\chi(T) < \chi(L_n)$. Deci $\chi(T) \leq \chi(L_n)$ cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T \cong L_n$. \square

3.7.4 Alte rezultate. Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum

Propoziția 27. ([51]) Fie G un graf cu n noduri și $m \geq 1$ muchii. Atunci

$$\chi(G) < \sqrt{\frac{mn}{2}}.$$

Demonstrație. Conform inegalității Cauchy-Buniakovski-Schwarz, vom obține că:

$$\sum_{x \in V(G)} \sqrt{d_G(x)} \leq \sqrt{n \sum_{x \in V(G)} d_G(x)},$$

și atunci este ușor de văzut că:

$$\begin{aligned} \chi(G) &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{x \in V(G) \\ d_G(x) > 0}} \left[\sum_{y \in N_G(x)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) + d_G(y)}} \right] \\ &< \frac{1}{2} \sum_{\substack{x \in V(G) \\ d_G(x) > 0}} \left[\sum_{y \in N_G(x)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x)}} \right] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{x \in V(G) \\ d_G(x) > 0}} \frac{1}{\sqrt{d_G(x)}} \sum_{y \in N_G(x)} 1 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{x \in V(G) \\ d_G(x) > 0}} \frac{d_G(x)}{\sqrt{d_G(x)}} = \frac{1}{2} \sum_{x \in V(G)} \sqrt{d_G(x)} \geq \frac{1}{2} \sqrt{n \sum_{x \in V(G)} d_G(x)} = \sqrt{\frac{m \cdot n}{2}}. \end{aligned}$$

□

Propoziția 28. ([51]) Fie un graf G de ordinul n . Atunci:

$$\chi(G) + \chi(\overline{G}) \geq \frac{n\sqrt{n-1}}{2\sqrt{2}},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $G \cong K_n$ sau $\overline{G} \cong K_n$.

Demonstrație. Fie t și \bar{t} numărul de muchii al grafului G , respectiv \overline{G} . Atunci:

$$\begin{aligned} \chi(G) + \chi(\overline{G}) &= \sum_{xy \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) + d_G(y)}} + \sum_{xy \in E(\overline{G})} \frac{1}{\sqrt{2n - 2 - d_G(x) - d_G(y)}} \\ &\geq t \frac{1}{\sqrt{2n-2}} + \bar{t} \frac{1}{\sqrt{2n-2}} = \left(\frac{1}{\sqrt{2n-2}} \right) \cdot (t + \bar{t}) = \frac{n\sqrt{n-1}}{2\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă fie $d_G(x) = d_G(y) = n - 1$ pentru orice muchie $xy \in E(G)$, fie $E(G) = \emptyset$. Așadar, $G \cong K_n$ sau $\overline{G} \cong K_n$. □

3.8 Indicele Szeged

3.8.1 Introducere

Fie un graf conex G cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor. *Indicele Szeged al grafului G* îl vom nota cu $Sz(G)$ și îl vom defini ([17,25]) ca:

$$Sz(G) = \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) n_G^2(x, y)$$

unde $n_G^1(x, y) = |N_G^1(x, y)| = |\{v \in V(G) | d_G(x, v) < d_G(y, v)\}|$ și $n_G^2(x, y) = |N_G^2(x, y)| = |\{v \in V(G) | d_G(x, v) > d_G(y, v)\}|$.

Indicele Szeged este utilizat în chimia teoretică pentru proiectarea compușilor chimici cu proprietăți fizico-chimice speciale sau activitate biologică deosebită. Acesta are o importanță deosebită, mai ales prin aplicațiile sale în modelarea proprietăților fizico-chimice, precum și în activitățile fiziologice ale componentelor organice care acționează ca medicamente sau care dețin utilitate farmacologică.

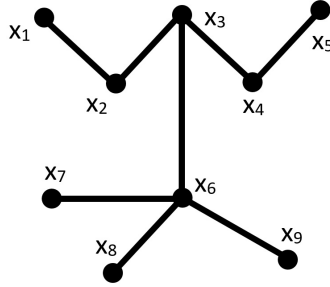


Fig. 19

Exemplu. Fie graful G din Fig. 19.

$$\begin{aligned} Sz(G) &= \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) n_G^2(x, y) = n_G^1(x_1, x_2) n_G^2(x_1, x_2) + n_G^1(x_2, x_3) n_G^2(x_2, x_3) \\ &\quad + n_G^1(x_3, x_4) n_G^2(x_3, x_4) + n_G^1(x_4, x_5) n_G^2(x_4, x_5) + n_G^1(x_3, x_6) n_G^2(x_3, x_6) \\ &\quad + n_G^1(x_6, x_7) n_G^2(x_6, x_7) + n_G^1(x_6, x_9) n_G^2(x_6, x_9) + n_G^1(x_6, x_8) n_G^2(x_6, x_8) \\ &= 8 + 2 \cdot 7 + 7 \cdot 2 + 8 + 5 \cdot 4 + 8 + 8 + 8 = 88. \end{aligned}$$

3.8.2 Rezultate preliminare

Vom determina valoarea indicelui Szeged pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui subcapitol.

Propoziția 29. Fie L_n un lanț cu n noduri. Atunci $Sz(L_n) = \frac{n(n^2-1)}{6}$.

Demonstrație. Pentru cazurile în care $n = 2, 3$ și 4 este evident că $Sz(L_n)$ este egal cu 1, 4 respectiv 10. Pentru cazul general, vom calcula efectiv ce valoare are indicele Szeged.

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

□

Propoziția 30. Fie K_n , graful complet cu n noduri. Atunci $Sz(K_n) = \frac{n(n-1)}{2}$.

Demonstrație. Pentru cazurile în care $n = 4$ și 5 este evident că $Sz(K_n)$ este egal cu 6 respectiv 10. Pentru cazul general, vom calcula efectiv ce valoare are indicele Szeged.

$$Sz(K_n) = \binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$$

□

3.8.3 Grafuri extremale

Teorema 27. ([13]) Fie un graf conex G cu n noduri, cu m muchii și diametrul egal cu d . Atunci:

$$Sz(G) \geq m + \frac{d(d+4)(d-1)}{6}, \quad (30)$$

cu egalitate dacă și numai dacă $G \cong K_n$ sau $G \cong L_n$.

Demonstrație. Pentru fiecare muchie $xy \in E(G)$, deducem că

$$n_G^1(x, y) \cdot n_G^2(x, y) \geq 1 \quad (31)$$

Luând în considerare că graful G are diametrul d , atunci există un lanț L_{d+1} care face parte din G . Conform Propoziției 29 și relației (31), vom obține că:

$$Sz(G) \geq Sz(L_{d+1}) + \sum_{xy \in E(G) \setminus E(L_{d+1})} n_G^1(x, y) n_G^2(x, y) \quad (32)$$

$$\geq \frac{d(d+2)(d+1)}{6} - d + m. \quad (33)$$

Din relația (33), am ajuns la relația (30). Indicele Szeged pentru lanțul cu n noduri L_n și pentru graful complet K_n sunt demonstrate în Propoziția 29 și 30. Conform acestora se poate verifica ușor că egalitatea din relația (30) este valabilă pentru aceste două grafuri.

Vom presupune că egalitatea este valabilă în relația (30). Atunci egalitatea este valabilă și în relațiile (32) și (33). Vom considera două cazuri: (1) $d = m$ și (2) $d < m$.

Cazul (1): Dacă $d = m$, atunci $m + 1 = n$ și atunci $G \cong L_n$.

Cazul (2): Dacă $d < m$, atunci vom obține că:

$$\sum_{xy \in E(G) \setminus E(L_{d+1})} n_G^1(x, y) n_G^2(x, y) > 0 \quad (34)$$

Din egalitatea relației (33) vom obține pentru orice $xy \in E(G) \setminus E(L_{d+1})$ că:

$$n_G^1(x, y) = 1 \quad \text{și} \quad n_G^2(x, y) = 1 \quad (35)$$

Dat fiind că graful G este un graf conex și folosind relațiile (34) și (35), deducem că există un nod $v \in V(G) \setminus V(L_{d+1})$ astfel încât $d_G(v, x) = 1$ pentru orice $x \in V(L_{d+1})$. Deci, diametrul grafului G este cel mult 2. Presupunem că $L_{d+1} = y_1 y_2 \dots y_{d+1}$.

Luând în calcul că $vy_1 = w \in E(G) \setminus E(L_{d+1})$ și $vy_{d+1} \in E(G)$, atunci conform relației (35) deducem că $y_1 y_{d+1} \in E(G)$. Așadar, diametrul grafului G este 1, ceea ce înseamnă că $G \cong K_n$. □

Teorema 28. ([13]) Fie un graf conex G cu $n > 2$ noduri și m muchii. Atunci:

$$Sz(G) \leq \frac{mn^2}{4} - 3k_3 \quad (36)$$

unde k_3 reprezintă numărul de cicluri de lungime 3 din graful G .

Egalitatea relației (36) este valabilă dacă și numai dacă G este un graf bipartit cu număr par de noduri și cu $\delta(G) \geq 2$.

Demonstrație. Cel puțin una dintre valorile $n_G^1(x, y)$ și $n_G^2(x, y)$ este mai mică sau egală cu $\frac{n}{2}$. Fără a pierde generalitatea, putem să ne asumăm că $n_G^1(x, y) \leq \frac{n}{2}$.

Vom nota cu N_{ij} numărul de vecini comuni al nodurilor x_i și x_j . Atunci:

$$Sz(G) = \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) n_G^2(x, y) \leq \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) (n - N_{xy} - n_G^1(x, y)) \quad (37)$$

Deoarece $n_G^2(x, y) \leq n - N_{xy} - n_G^1(x, y)$, putem spune că:

$$Sz(G) \leq \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) (n - n_G^1(x, y)) - \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) N_{xy} \quad (38)$$

Luând în considerare că $n_G^1(x, y) \leq 1$ și funcția $f(x) = x(n - x)$ este crescătoare pe intervalul $x \in (0, \frac{n}{2}]$ și descrescătoare pe intervalul $x \in (\frac{n}{2}, \infty)$, deducem că $n_G^1(x, y) (n - n_G^1(x, y)) \leq \frac{n^2}{4}$ și mai deducem că:

$$\sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) (n - n_G^1(x, y)) \leq \frac{mn^2}{4} \quad (39)$$

Deoarece $\sum_{xy \in E(G)} N_{xy} = 3k_3$ și $n_G^1(x, y) \geq 1$, obținem că:

$$\sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x, y) N_{xy} \geq 3k_3 \quad (40)$$

Folosind ultimele două inegalități, deducem că relația (36) este adevărată.

Dacă vom presupune că egalitatea din relația (36) este valabilă, atunci din egalitatea relației (37) vom obține că:

$$n_G^1(x, y) + n_G^2(x, y) = n - N_{xy} \quad (41)$$

pentru orice $xy \in E(G)$. Din egalitatea relației (39) vom obține că $n_G^1(x, y) = \frac{n}{2}$ pentru orice $xy \in E(G)$. Din egalitatea relației (40) vom obține că $n_G^1(x, y) = 1$ pentru orice $xy \in E(G)$ astfel încât $N_{xy} \neq 0$.

Dacă $k_3 \neq 0$, atunci există o muchie $w = x_1 y_1$ astfel încât $N_{xy} \neq 0$. Prin urmare $n_G^1(x, y) = 1$ pentru w , ceea ce este o contradicție din cauza faptului că $n_G^1(x, y) = \frac{n}{2}$ pentru orice $xy \in E(G)$. Deci $k_3 = 0$ și $N_{xy} = 0$ pentru orice $xy \in E(G)$.

Așadar, conform faptului că $n_G^1(x, y) + n_G^2(x, y) = n - N_{xy}$ vom obține că $n_G^1(x, y) = n_G^2(x, y) = \frac{n}{2}$ pentru orice $xy \in E(G)$ și numărul de noduri al grafului G este par.

Prin urmare, graful G este bipartit, n este un număr par și $\delta(G) \geq 2$. \square

3.9 Indicele Zagreb

3.9.1 Introducere

Fie un graf conex G cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor.

Primul indice Zagreb al grafului G îl vom nota cu $M_1(G)$ și îl vom defini ([27,28]) ca:

$$M_1(G) = \sum_{x \in V(G)} d_G^2(x).$$

Al doilea indice Zagreb al grafului G îl vom nota cu $M_2(G)$ și îl vom defini ([27,28]) ca:

$$M_2(G) = \sum_{xy \in E(G)} d_G(x)d_G(y).$$

Indicele Zagreb a fost introdus în anul 1970 și este cel mai vechi și mai bine cercetat descriptor molecular de structură care are baza gradele nodurilor. Acesta este strâns legat de o serie de proprietăți ale compușilor ciclici. Indicele Zagreb a fost folosit intens într-o serie de programe utilizate pentru calculul de rutină al indicilor topologici. Interesul actual pentru indicele Zagreb a crescut în ultimul deceniu, datorită utilizării în modelarea QSPR/QSAR, iar în ultimii ani, au fost creați numeroși indici înrudiți cu indicele Zagreb.

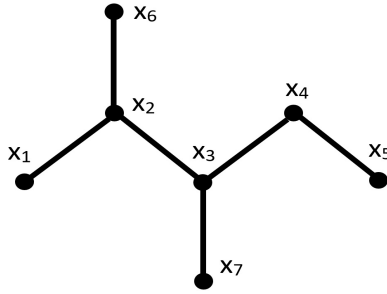


Fig. 20

Exemplu. Fie graful G din Fig. 20. Vom calcula valoarea primului și celui de al doilea indice Zagreb.

$$M_1(G) = \sum_{x \in V(G)} d_G^2(x) = 1 + 9 + 9 + 4 + 1 + 1 + 1 = 4 \cdot 1 + 9 \cdot 2 + 4 = 26$$

$$M_2(G) = \sum_{xy \in E(G)} d_G(x)d_G(y) = 1 \cdot 3 + 3 \cdot 3 + 3 \cdot 2 + 2 \cdot 1 + 3 \cdot 1 + 3 \cdot 1 = 26$$

3.9.2 Rezultate preliminare

Vom determina valoarea primului și celui de al doilea indice Zagreb pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui subcapitol.

Propoziția 31. Fie L_n , lanțul cu n noduri. Atunci $M_1(L_n) = 4n - 6$.

Demonstrație. Calculăm efectiv valoarea primului indice Zagreb.

$$M_1(L_n) = (n - 2) \cdot 2^2 + 2 \cdot 1^2 = 4(n - 2) + 2 = 4n - 8 + 2 = 4n - 6.$$

□

Propoziția 32. Fie L_n , lanțul cu $n \geq 2$ noduri. Atunci $M_2(L_n) = 4n - 8$.

Demonstrație. Calculăm efectiv valoarea celui de-al doilea indice Zagreb.

$$M_2(L_n) = (n - 3) \cdot 2 \cdot 2 + 2 \cdot 2 = 4n - 8$$

□

Propoziția 33. Fie S_n , graful stea cu n noduri. Atunci $M_1(S_n) = n(n-1)$.

Demonstrație. Pentru cazurile în care $n = 4$ și 5 este evident că $M_1(S_n)$ este egal cu 12, respectiv 20. Pentru cazul general, vom calcula efectiv ce valoare are primul indice Zagreb.

$$M_1(S_n) = (n-1)^2 \cdot 1 + (n-1) \cdot 1^2 = n(n-1).$$

□

Propoziția 34. Fie S_n , graful stea cu n noduri. Atunci $M_2(S_n) = (n-1)^2$.

Demonstrație. Vom calcula valoarea celui de-al doilea indice Zagreb.

$$M_2(S_n) = (n-1)(n-1) = (n-1)^2.$$

□

Propoziția 35. Fie K_n , graful complet cu n noduri. Atunci $M_1(K_n) = n(n-1)^2$.

Demonstrație. Prin calcul direct obținem:

$$M_1(K_n) = \underbrace{(n-1)^2 + \dots + (n-1)^2}_{n \text{ ori}} = n(n-1)^2.$$

□

Propoziția 36. Fie un graf conex G cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor, respectiv muchiilor și cu n . Atunci:

$$M_1(G) = \sum_{xy \in E(G)} [d_G(x) + d_G(y)]$$

Demonstrație.

$$\begin{aligned} M_1(G) &= \sum_{x \in V(G)} d_G^2(x) = \frac{1}{2} \sum_{x \in V(G)} \sum_{y \in N_G(x)} d_G(x) + \frac{1}{2} \sum_{y \in V(G)} \sum_{x \in N_G(y)} d_G(y) = \\ &= \sum_{xy \in E(G)} [d_G(x) + d_G(y)]. \end{aligned}$$

□

Lema 15. ([12]) Fie un graf conex H care are două noduri distincte x, y astfel încât fiecare are adiacent câte un nod pendant, notat a , respectiv b .

Fie graful $H_1 = H - ax + ab$. Atunci:

$$M_2(H) \geq M_2(H_1)$$

cu egalitate dacă și numai dacă $d_G(x) = d_G(y) = 2$ și nodul x este adiacent unui nod de grad 2.

Demonstrație. Vom considera diferența $M_2(H) - M_2(H_1)$. Analizăm valoarea gradelor care diferă în grafurile H și H_1 . Aceasta diferă pentru fiecare din următoarele cazuri:

- (a) muchiile adiacente nodului x , diferite de muchia ax .
- (b) muchia by .
- (c) muchia ax în H și muchia ab în H_1 .

Cazul (a) În graful H , contribuția muchiilor de tipul (a) la al doilea indice Zagreb este

$$\sum_{v \in N_H(x) \setminus \{a\}} d_H(v)d_H(x).$$

În graful H_1 , gradul nodului x este $d_H(x) - 1$ și contribuția muchiilor de tipul (a) la al doilea indice Zagreb este

$$\sum_{v \in N_{H_1}(x) \setminus \{a\}} d_{H_1}(v)(d_H(x) - 1).$$

Cazul (b) Contribuția muchiei by în H este $d_H(y)$. Contribuția muchiei by în H_1 este $2d_H(y)$.

Cazul (c) Contribuția muchiei ax în H este $d_H(x)$. Contribuția muchiei ab în H_1 este 2.

Luând în considerare cele de mai sus, vom obține că:

$$\begin{aligned} M_2(H) - M_2(H_1) &= \left[\sum_{v \in N_H(x) \setminus \{a\}} d_H(v)d_H(x) + d_H(x) + d_H(y) \right] \\ &- \left[\sum_{v \in N_{H_1}(x) \setminus \{a\}} d_{H_1}(v)(d_H(x) - 1) + 2d_H(y) + 2 \right] = \sum_{v \in N_{H_1}(x) \setminus \{a\}} d_{H_1}(v) + d_H(x) - d_H(y) - 2. \end{aligned}$$

Deoarece am presupus că H este un graf conex, atunci un nod atașat de nodul x trebuie să aibă gradul cel puțin 2. Prin urmare, $\sum_{v \in N_{H_1}(x) \setminus \{a\}} d_{H_1}(v)$ este mai mare sau egală cu 2. Egalitatea are loc dacă și numai dacă exact un nod (diferit de a) este atașat de x și acest nod are gradul 2, ceea ce implică că $d_G(x) = 2$.

Dacă $d_G(x) \geq d_G(y)$, atunci $d_H(x) - d_H(y) - 2 \geq 2$, cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $d_G(x) = d_G(y)$.

Așadar, $M_2(H) - M_2(H_1) \geq 0$, cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $d_G(x) = d_G(y) = 2$ și nodul x este adiacent cu un nod de grad 2. □

Lema 16. ([12]) Fie un graf conex H care are un nod x astfel încât acesta are două noduri pendante adiacente, notate a , respectiv b .

Fie graful $H_2 = H - ax + ab$. Atunci:

$$M_2(H) \geq M_2(H_2)$$

cu egalitate dacă și numai dacă graful H nu are noduri diferite de nodurile x , a și b .

Demonstrație. Vom considera diferența $M_2(H) - M_2(H_2)$. Pentru a demonstra lema va trebui să observăm care este valoarea gradelor care diferă în graful H și H_2 . Aceasta diferă pentru fiecare din următoarele cazuri:

- (a) muchiile adiacente nodului x , diferite de muchia ax .
- (b) muchia bx .
- (c) muchia ax în H și muchia ab în H_2 .

Cazul (a) În graful H , contribuția muchiilor de tipul (a) la al doilea indice Zagreb este

$$\sum_{v \in N_H(x) \setminus \{a\}} d_H(v)d_H(x).$$

În graful H_2 , gradul nodului x este $d_H(x) - 1$ și contribuția muchiilor de tipul (a) la al doilea indice Zagreb este

$$\sum_{v \in N_{H_2}(x) \setminus \{a\}} d_{H_2}(v)(d_H(x) - 1).$$

Cazul (b) Contribuția muchiei bx în H este $d_H(x)$. Contribuția muchiei bx în H_2 este $2(d_H(x) - 1)$.

Cazul (c) Contribuția muchiei ax în H este $d_H(x)$. Contribuția muchiei ab în H_2 este 2.

Luând în considerare cele de mai sus, vom obține că:

$$\begin{aligned} M_2(H) - M_2(H_2) &= \left[\sum_{v \in N_H(x) \setminus \{a\}} d_H(v)d_H(x) + d_H(x) + d_H(x) \right] \\ &- \left[\sum_{v \in N_{H_2}(x) \setminus \{a\}} d_{H_2}(v)(d_H(x) - 1) + 2(d_H(x) - 1) + 2 \right] = \sum_{v \in N_{H_2}(x) \setminus \{a\}} d_{H_2}(v). \end{aligned}$$

Deoarece am presupus că H este un graf conex, atunci un nod atașat de nodul x trebuie să aibă gradul cel puțin 2. Prin urmare, $\sum_{v \in N_{H_2}(x) \setminus \{a\}} d_{H_2}(v)$ este mai mare sau egală cu 2. Egalitatea are loc dacă și numai dacă exact un nod (diferit de a) este atașat de nodul x .

Așadar, $M_2(H) - M_2(H_2) \geq 0$, cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful H nu mai posedă alte noduri în afară de nodurile x , a și b .

□

3.9.3 Grafuri extreme

Propoziția 37. ([30]) Fie un graf conex G cu n noduri, cu m muchii și cu diametrul $d \geq 2$. Atunci:

$$M_1(G) \leq m^2 - (d-3)m + d - 2 \quad (42)$$

Dacă $d = 2$, atunci egalitatea din relația (42) este valabilă dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}$ sau $G \cong K_3$. Dacă $d \geq 3$, atunci egalitatea din relația (42) este valabilă dacă și numai dacă $G \cong L_{d+1}$.

Demonstrație. Vom considera cazul când $d > 1$. Dacă $d > 1$, atunci există un lanț L de lungime d în graful G . Fie $L = x_0, x_1, \dots, x_d$, unde $x_j \in V(G)$ pentru $j = 1, 2, \dots, d$. Atunci

$$d_G(x_0) + d_G(x_1) \leq m - d + 3$$

$$d_G(x_{d-1}) + d_G(x_d) \leq m - d + 3$$

$$d_G(x_j) + d_G(x_{j+1}) \leq m - d + 4$$

pentru $j = 1, 2, \dots, d - 2$.

Dacă $V(G) \setminus V(L) \neq \emptyset$, atunci pentru orice două noduri $x, y \in V(G)$, dintre care cel puțin unul dintre ele aparține $V(G) \setminus V(L)$, condiția $d_G(x) + d_G(y) \leq m - d + 3$ este valabilă. Atunci:

$$M_1(G) = \sum_{xy \in E(G)} [d_G(x) + d_G(y)] \leq \sum_{xy \in E(G)} (m - d + 3) + (d - 2) \leq m^2 - m(d - 3) + (d - 2)$$

Egalitatea din relația (42) va fi valabilă dacă și numai dacă toate relațiile de mai sus sunt egalități.

Prin urmare, dacă $d = 2$, atunci egalitatea din relația (42) este valabilă dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}$ sau $G \cong K_3$, iar dacă $d \geq 3$, atunci $G \cong L_{d+1}$. \square

Teorema 29. ([10]) Fie un graf G cu n noduri și cu m muchii, atunci:

$$M_1(G) \leq m(m+1) \quad (43)$$

Demonstrație. Vom arăta că dacă relația de mai sus este valabilă pentru un graf G cu n noduri și cu m muchii, atunci este valabilă și pentru un graf H obținut prin unirea a două noduri care nu sunt adiacente printr-o muchie. Dacă vom nota aceste noduri cu x și y , atunci:

$$d_G(x) + d_G(y) \leq m$$

Graful H are n noduri și $m + 1$ muchii. Putem deduce că $d_H(x) = d_G(x) + 1$, $d_H(y) = d_G(y) + 1$ și $d_H(v) = d_G(v)$ pentru orice $v \in V(G) \setminus \{x, y\}$. Prin urmare, vom obține că:

$$\sum_{v \in V(H)} d_H^2(v) = \sum_{v \in V(G)} d_G^2(v) + 2(d_G(x) + d_G(y) + 1) \leq m(m+1) + 2(m+1) \leq (m+1)(m+2).$$

Așadar, relația pe care trebuie să o demonstrăm este valabilă pentru H . De asemenea, relația este valabilă și pentru $K_{1,n-1}$. Inegalitatea relației (43) este valabilă pentru graful construit prin adăugarea unui nod izolat la graful G . Orice graf G poate fi contruit pornind de la graful stea $K_{1,d_G(v)}$ (nodul v are gradul maxim) prin adăugarea de muchii și noduri la fiecare pas astfel încât relația (43) să fie valabilă.

Prin urmare, teorema este demonstrată pentru orice graf G . \square

Teorema 30. ([11]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Atunci:

$$M_1(L_n) \leq M_1(T) \leq M_1(S_n)$$

Demonstrație. Dacă vom nota cu $r_p = |\{x \in V(T) | d_T(x) = p\}|$, atunci:

$$\sum_{j=0}^{n-1} r_j = n. \quad (44)$$

Luând în considerare că $\sum_{x \in V(G)} d_T(x) = 2m$, vom obține că:

$$\sum_{j=0}^{n-1} j r_j = 2m. \quad (45)$$

În acest caz, putem scrie:

$$M_1(T) = \sum_{x \in V(T)} d_T^2(x) = \sum_{j=0}^{n-1} j^2 r_j \quad (46)$$

Vom considera un graf G care să nu aibă noduri izolate. Vom scrie relația (44) și relația (45) astfel:

$$r_1 + r_2 = n - \sum_{j=3}^{\Delta(G)} r_j$$

$$r_1 + 2r_2 = 2m - \sum_{j=3}^{\Delta(G)} j r_j$$

și vom obține că:

$$r_1 = 2n - 2m + \sum_{j=3}^{\Delta(G)} (j - 2) r_j$$

$$r_2 = 2m - n - \sum_{j=3}^{\Delta(G)} (j - 1) r_j$$

Din relația (46), vom obține că:

$$M_1(G) = 6m - 2n + \sum_{j=3}^{\Delta(G)} (j - 1)(j - 2) r_j.$$

Pentru că toți termenii din suma $\sum_{j=3}^{\Delta(G)} (j - 1)(j - 2) r_j$ au valori pozitive, vom deduce că primul indice Zagreb atinge valoarea minimă dacă toate valorile r_j pentru $j = 3, 4, \dots, \Delta(G)$ sunt egale cu zero.

Cu alte cuvinte, graful ce are valoarea minimă a primului indice Zagreb trebuie să aibă doar noduri de grad 1 și 2. În cazul arborilor, acest graf este lanțul L_n și este unic. Așadar, lanțul L_n deține valoarea minimă a primului indice Zagreb în ceea ce privește arbori cu n noduri.

Pentru demonstrarea celei de-a doua inegalități vom scrie relația (44) și relația (45) astfel:

$$r_1 + r_{\Delta(G)} = n - \sum_{j=2}^{\Delta(G)-1} r_j$$

$$r_1 + \Delta(G) \cdot r_2 = 2m - \sum_{j=2}^{\Delta(G)-1} jr_j$$

și vom rezolva acest sistem de ecuații în variabilele r_1 și $r_{\Delta(G)}$. Vom obține că:

$$r_1 = \left(n - \frac{2m - n}{\Delta(G) - 1}\right) + \sum_{j=2}^{\Delta(G)-1} \left(\frac{j - 1}{\Delta(G) - 1} - 1\right) \cdot r_j$$

$$r_{\Delta(G)} = \left(\frac{2m - n}{\Delta(G) - 1}\right) - \sum_{j=2}^{\Delta(G)-1} \left(\frac{j - 1}{\Delta(G) - 1}\right) \cdot r_j$$

Din relația (46), vom obține că:

$$M_1(G) = n + (\Delta(G) + 1)(2m - n) - \sum_{j=2}^{\Delta(G)-1} [(\Delta(G) - j)(j - 1)] \cdot r_j$$

Observăm că toți termenii din suma $\sum_{j=2}^{\Delta(G)-1} [(\Delta(G) - j)(j - 1)] \cdot r_j$ au valori pozitive. Pentru că întreaga sumă este negativă, vom deduce că primul indice Zagreb atinge valoarea maximă dacă toate valorile r_j pentru $j = 3, 4, \dots, \Delta(G) - 1$ sunt egale cu zero.

Cu alte cuvinte, graful ce are valoarea maximă a primului indice Zagreb trebuie să aibă doar noduri de grad 1 și $\Delta(G)$. În cazul arborilor, valoarea lui $\Delta(G)$ trebuie să fie $n - 1$.

Dacă există un arbore unic cu proprietatea că $r_1, r_{n-1} \neq 0$ și $r_2, r_3, \dots, r_{n-2} = 0$, atunci acesta este graful stea S_n . Așadar, graful stea S_n deține valoarea maximă a primului indice Zagreb în mulțimea \mathcal{T}_n . \square

Teorema 31. ([12]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Atunci:

$$M_2(L_n) \leq M_2(T) \leq M_2(S_n)$$

Demonstrație. Vom începe prin a demonstra prima inegalitate.

Conform Lemelor 15 și 16, am obținut o serie de transformări ale unui graf prin ștergerea unei muchii și adăugarea acesteia la un nod pendent. Singura diferență dintre acestea este gradul nodului suport. Aceste transformări fie scad valoarea celui de al doilea indice Zagreb, fie o lasă neschimbată.

În cazul arborilor, toate grafurile H , H_1 și H_2 au două noduri care au gradul 1.

Deci, asupra unuia dintre aceștia se poate aplica una dintre transformările de mai sus în funcție de caz. Repetând acest procedeu pentru un număr finit de ori, vom obține că L_n este unicul arbore ce deține valoarea minimă a celui de al doilea indice Zagreb în ceea ce privește arbori cu n noduri.

Pentru a demonstra a doua inegalitate, vom presupune că $\sum_{vy \in E(T)} d_T(v)d_T(y)$ are o valoare maximă. De asemenea, vom presupune că există un nod x în arborele T astfel încât $\sum_{y \in N_T(x)} d_T(y) + d_T(x)$ să aibă o valoare maximă. Prin urmare, va trebui să arătăm că $\sum_{y \in N_T(x)} d_T(y) + d_T(x) \geq \sum_{y \in N_T(v)} d_T(y) + d_T(v)$ pentru orice $v \in V(T)$.

Vom construi un arbore T_m pornind de la arborele T prin alegerea unui nod pendant $w \neq x$ adiacent nodului $y \neq x$, prin ștergerea muchiei wy și prin unirea nodurilor x și w printr-o muchie. Prin urmare, vom obține că $d_{T_m}(x) = d_T(x) + 1$, $d_{T_m}(y) = d_T(y) - 1$ și $d_{T_m}(k) = d_T(k)$ pentru $k \neq x, y$. În acest caz, se disting două cazuri și anume: (a) $xy \notin E(T)$, (b) $xy \in E(T)$.

Cazul (a)

$$\begin{aligned} \sum_{xy \in E(T_m)} d_{T_m}(x)d_{T_m}(y) - \sum_{xy \in E(T)} d_T(x)d_T(y) &= \left[\sum_{y \in N_{T_m}(x)} d_{T_m}(y) + d_{T_m}(x) + 1 \right] \\ &\quad - \left[\sum_{x \in N_T(y)} d_T(x) - 1 + d_T(y) \right] \\ &= \sum_{y \in N_{T_m}(x)} d_{T_m}(y) + d_{T_m}(x) - \sum_{x \in N_T(y)} d_T(x) - d_T(y) + 2 > 0 \end{aligned}$$

Cazul (b)

$$\begin{aligned} \sum_{xy \in E(T_m)} d_{T_m}(x)d_{T_m}(y) - \sum_{xy \in E(T)} d_T(x)d_T(y) &= \left[\sum_{y \in N_{T_m}(x)} d_{T_m}(y) \right. \\ &\quad \left. - d_{T_m}(y) + (d_{T_m}(x) + 1) + (d_{T_m}(x) + 1)(d_{T_m}(y) - 1) - d_{T_m}(x) \cdot d_{T_m}(y) \right] \\ &\quad - \left[\sum_{x \in N_T(y)} d_T(x) - 1 - d_T(x) + d_T(y) \right] \\ &= \sum_{y \in N_{T_m}(x)} d_{T_m}(y) + d_{T_m}(x) - \sum_{x \in N_T(y)} d_T(x) - d_T(y) + 1 > 0 \end{aligned}$$

Deci, am obținut în ambele cazuri că $\sum_{xy \in E(T_m)} d_{T_m}(x)d_{T_m}(y) > \sum_{xy \in E(T)} d_T(x)d_T(y)$.

Transformarea descrisă anterior crește valoarea indicelui. Dacă $T_m \cong S_n$, atunci demonstrația este încheiată. În caz contrar, se repetă transformarea. Este ușor de văzut că $\sum_{y \in N_{T_m}(x)} d_{T_m}(y) + d_{T_m}(x)$ atinge valoarea maximă doar în T_m , unde $d_{T_m}(x) = d_T(x) + 1$. În continuare, vom alege un nod pendant din T_m . Repetând acest raționament de un număr suficient de ori vom obține un arbore în care nodul x are gradul $n - 1$.

Așadar, S_n este unicul arbore ce deține valoarea maximă a celui de al doilea indice Zagreb în ceea ce privește arborii cu n noduri. \square

3.9.4 Inegalități de tip Nordhaus - Gaddum

Lema 17. ([30]) Fie G un graf conex cu n noduri, cu m muchii și cu graful complementar \overline{G} . Atunci:

$$M_1(G) - M_1(\overline{G}) = 2(n - 1)(m - \overline{m}),$$

unde $\overline{m} = \frac{n(n-1)-2m}{2}$ reprezintă numărul de muchii al grafului \overline{G} .

Demonstrație.

$$\begin{aligned}
M_1(G) + M_1(\overline{G}) &= \sum_{x \in V(G)} d_G^2(x) + \sum_{y \in V(\overline{G})} (n-1 - d_{\overline{G}}(y))^2 \\
&= \sum_{x \in V(G)} [d_G^2(x) + (n-1)^2 - 2(n-1)d_{\overline{G}}(x) + d_{\overline{G}}^2(x)] \\
&= 2 \sum_{x \in V(G)} d_G^2(x) + n(n-1)^2 - 2(n-1) \cdot 2m = 2M_1(G) + n(n-1)^2 - 4m(n-1)
\end{aligned}$$

Deci, am obținut că: $M_1(G) + M_1(\overline{G}) = 2M_1(G) + n(n-1)^2 - 4m(n-1)$. Dacă vom înlocui m cu $\frac{n(n-1)-2\overline{m}}{2}$, vom obține că $M_1(G) - M_1(\overline{G}) = 2(n-1)(m - \overline{m})$, \square

Lema 18. ([30]) Fie G un graf conex cu n noduri, cu m muchii și cu graful complementar \overline{G} . Atunci:

$$\frac{M_1(G)}{2} - (n-1)M_1(\overline{G}) + M_2(G) + M_2(\overline{G}) = 2m^2 - (n-1)^2\overline{m},$$

unde $\overline{m} = \frac{n(n-1)-2m}{2}$ reprezintă numărul de muchii al grafului \overline{G} .

Demonstrație.

$$\begin{aligned}
M_1(G) &= \sum_{x \in V(G)} d_G^2(x) = \left(\sum_{x \in V(G)} d_G(x) \right)^2 - 2 \sum_{x,y \in V(G)} d_G(x)d_G(y) \\
&= 4m^2 - 2 \left(\sum_{xy \in E(G)} d_G(x)d_G(y) + \sum_{x,y \in V(G)} d_G(x)d_G(y) \right) \\
&= 4m^2 - 2[M_2(G) + \sum_{x,y \in V(G)} (n-1 - d_{\overline{G}}(x))(n-1 - d_{\overline{G}}(y))] \\
&= 4m^2 - 2[M_2(G) + \sum_{x,y \in V(G)} (n-1)^2 - (n-1) \sum_{x,y \in V(G)} (d_{\overline{G}}(x) + d_{\overline{G}}(y)) \\
&\quad + \sum_{x,y \in V(G)} d_{\overline{G}}(x)d_{\overline{G}}(y)] \\
&= 4m^2 - 2M_2(G) - 2(n-1)^2 \left[\frac{n(n-1) - 2m}{2} \right] + 2(n-1)M_1(\overline{G}) - 2M_2(\overline{G})
\end{aligned}$$

Este ușor de văzut că inegalitatea de mai sus este ceea pe care trebuia să o demonstrăm. \square

3.9.5 Tipuri de indici înrudiți

Indicele Hyper-Zagreb

Fie un graf conex G cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor respectiv muchiilor și cu n , m și d , numărul de noduri, numărul de muchii și diametrul grafului G . *Indicele Hyper-Zagreb al grafului G* îl vom nota cu $HM(G)$ și îl vom defini ([47]) ca:

$$HM(G) = \sum_{xy \in E(G)} [d_G(x) + d_G(y)]^2$$

Indicele Hyper-Zagreb este o valoare numerică folosită care are foarte multe întrebuințări precum corelarea structurilor chimice cu proprietăți fizice variate, reactivitate chimică sau activitate biologică.

Indicele Zagreb augmentat

Fie un graf conex G cu n noduri și cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor, respectiv muchiilor. *Indicele Zagreb augmentat al grafului G* îl vom nota cu $AZI(G)$ și îl vom defini ([19]) ca:

$$AZI(G) = \left(\sum_{xv \in E(G)} \frac{d_G(x)d_G(v)}{d_G(x) + d_G(v) - 2} \right)^3.$$

Indicele Zagreb augmentat este unul dintre cei mai folosiți indici topologici în studiul temperaturilor înalte ale anumitor compuși chimici precum heptanii și octanii. Acesta a fost testat în comparație cu alți 20 de indici topologici care aveau la bază gradul nodurilor, pentru cazul formării de caldură și punctelor de fierbere ale izomerilor octanici unde acesta a obținut cel mai bun rezultat.

Capitolul 4

Indicele Randić

4.1 Introducere

Fie un graf conex G cu $V(G)$ mulțimea nodurilor și $E(G)$ mulțimea muchiilor. *Indicele Randić al grafului G* îl vom nota cu $R(G)$ și îl vom defini ([45]) ca:

$$R(G) = \sum_{xy \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) \cdot d_G(y)}}.$$

Indicele Randić a fost introdus în 1975 de către Milan Randić, numit inițial *indicele de ramificare*. Indicele Randić are un rol important în studiul alcanilor mai ales în prezicerea punctelor de fierbere în cazul în care compușii chimici conțin legături de carbon. Motivul introducerii indicelui Randić a fost obținerea unei măsuri a gradului de ramificare al scheletului de atomi de carbon al hidrocarburilor saturate. Prin urmare, cu cât este mai mică valoarea indicelui pentru un graf chimic, atunci mai mare este gradul de ramificare corespunzător moleculei.

Indicele Randić are un rol important în construirea modelelor QSPR/QSAR, deoarece acesta este indicele care stă la baza a numeroase aplicații în chimia organică, chimia medicinală și farmacie.

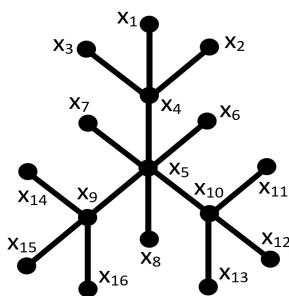


Fig. 21

Exemplu. Fie graful G din Fig. 21.

$$R(G) = \sum_{xy \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) \cdot d_G(y)}} = \frac{9}{\sqrt{4}} + \frac{3}{\sqrt{4 \cdot 6}} + \frac{3}{\sqrt{6}} = \frac{9}{2} + \frac{3}{2\sqrt{2 \cdot 3}} + \frac{3}{\sqrt{2 \cdot 3}} = \frac{9}{2} + \frac{9}{2\sqrt{6}}$$

4.2 Rezultate preliminare

Vom determina valoarea indicelui Randić pentru principalele clase de grafuri pe care le vom folosi pe parcursul acestui capitol.

Propoziția 38. Fie L_n , lanțul cu n noduri. Atunci $R(L_n) = \frac{n-3}{2} + \sqrt{2}$.

Demonstrație. Vom calcula efectiv ce valoare are indicele Randić.

$$R(L_n) = (n-3)\left(\frac{1}{\sqrt{2 \cdot 2}}\right) + 2 \cdot \frac{1}{\sqrt{1 \cdot 2}} = \frac{n-3}{2} + \frac{2}{\sqrt{2}} = \frac{n-3}{2} + \sqrt{2}$$

□

Propoziția 39. Fie S_n , graful stea cu n noduri. Atunci $R(S_n) = \sqrt{n-1}$.

Demonstrație. Vom calcula efectiv ce valoare are indicele Randić.

$$R(S_n) = (n-1)\left[\frac{1}{\sqrt{(n-1) \cdot 1}}\right] = \frac{n-1}{\sqrt{(n-1) \cdot 1}} = \sqrt{n-1}$$

□

Fie graful $K_{1,n-1}^+$ din Fig. 10 (secțiunea 3.2.2).

Propoziția 40. Dacă $G \cong K_{1,n-1}^+$, atunci $R(K_{1,n-1}^+) = \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{1}{2}$.

Demonstrație. Pentru cazurile în care $n = 5$ și 6 este evident că $R(K_{1,n-1}^+)$ este egal cu $\frac{3+\sqrt{2}}{2}$, respectiv $\frac{3+\sqrt{2}}{\sqrt{5}} + \frac{1}{2}$. Pentru cazul general, vom calcula efectiv ce valoare are indicele Randić.

$$R(K_{1,n-1}^+) = (n-3)\frac{1}{\sqrt{1 \cdot (n-1)}} + 2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{1}{2} = \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{1}{2}.$$

□

Propoziția 41. Fie G un graf regulat cu $n \geq 3$ noduri. Atunci $R(G) = \frac{n}{2}$.

Demonstrație. Vom calcula pentru cazul general ce valoare are indicele Randić. Deoarece graful G este regulat, atunci $d_G(v) = d_G(y)$ și $m = \frac{nd_G(v)}{2}$ pentru orice nod $y, v \in V(G)$.

În acest caz, vom obține că:

$$R(G) = m \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{d_G(v) \cdot d_G(v)}}\right) = m \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{d_G^2(v)}}\right) = \frac{m}{d_G(v)} = \left[\frac{n \cdot d_G(v)}{2}\right] \left[\frac{1}{d_G(v)}\right] = \frac{n}{2}.$$

□

4.3 Grafuri extremale

4.3.1 Arbore minimal

Lema 19. Fie x, y numere reale, $x, y > 1$. Atunci $F(x, y) = \sqrt{(x + y - 1)^3} - (x - 1)\sqrt{x} - (y - 1)\sqrt{y} - \sqrt{x} \cdot \sqrt{y} > 0$

Demonstrație. Deoarece

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \left(\frac{1}{2} + 1\right)\sqrt{x + y - 1} - \left(\frac{1}{2} + 1\right)\sqrt{x} + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{2}\frac{\sqrt{y}}{\sqrt{x}},$$

vom obține că:

$$\frac{\partial \frac{\partial F}{\partial x}}{\partial y} = \left(\frac{1}{2} + 1\right)\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{x + y - 1}} - \frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt{x} \cdot \sqrt{y}} > \frac{1}{4}\left[\frac{1}{\sqrt{x + y - 1}} - \frac{1}{\sqrt{x}\sqrt{y}}\right]$$

Conform faptului că $x, y > 1$ și $x + y - 1 < xy$, vom obține că $\frac{\partial \frac{\partial F}{\partial x}}{\partial y} > 0$. În plus,

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x, 1) = \left(\frac{1}{2} + 1\right)\sqrt{x} - \left(\frac{1}{2} + 1\right)\sqrt{x} + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{x}} = 0.$$

Așadar, $\frac{\partial F}{\partial x} > 0$ pentru $y > 1$. Deoarece $F(1, y) = \sqrt{(y)^3} - (y - 1)\sqrt{y} - \sqrt{y} = 0$, vom obține că $F(x, y) > 0$ pentru $x, y > 0$. \square

Teorema 32. ([32]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Atunci

$$R(T) \geq \sqrt{n - 1},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $T \cong S_n$.

Demonstrație. Vom presupune că arborele T are valoarea minimă a indicelui Randić și că acesta nu este un graf stea.

Dacă vom considera un nod x al arborelui T care are gradul maxim, atunci $d_T(x) < n - 1$. În acest caz, vom alege un nod $y \in N_T(x)$ cu proprietatea că $d_T(y) > d_T(v)$ pentru orice $v \in N_T(x)$. Dacă vom presupune că $d_T(x) = t$ și $d_T(y) = k$, atunci vom deduce că $t \geq k \geq 2$.

Vom construi arborele T' prin contractarea muchiei xy și prin adăugarea a unei noi muchii pendante xv la noul nod v . Această transformare este reprezentată în Fig. 22.

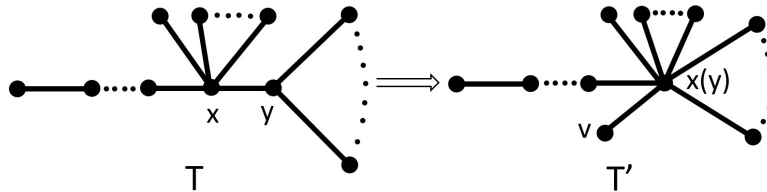


Fig. 22

Prin urmare, observăm că:

$$\sum_{xs \in E(T) \setminus \{xy\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(x) \cdot d_T(s)}} \geq \frac{t-1}{\sqrt{t} \cdot \sqrt{k}}$$

$$\sum_{ys \in E(T) \setminus \{yx\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(y) \cdot d_T(s)}} \geq \frac{k-1}{\sqrt{t} \cdot \sqrt{k}}$$

Așadar, vom obține că:

$$\begin{aligned} R(T) - R(T') &= \left[1 - \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{t+k-1}}\right] \sum_{xs \in E(T) \setminus \{xy\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(x) \cdot d_T(s)}} \\ &+ \left[1 - \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{t+k-1}}\right] \sum_{ys \in E(T) \setminus \{yx\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(y) \cdot d_T(s)}} + \frac{1}{\sqrt{t} \cdot \sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{t+k-1}} \\ &\geq (t-1) \cdot \frac{1}{\sqrt{k}} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{t}} - \frac{1}{\sqrt{t+k-1}}\right) + (k-1) \cdot \frac{1}{\sqrt{t}} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{t+k-1}}\right) + \frac{1}{\sqrt{t} \cdot \sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{t+k-1}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{k} \cdot \sqrt{t}} (t+k-1) - \frac{1}{\sqrt{t+k-1}} \left(\frac{t-1}{\sqrt{k}} + \frac{k-1}{\sqrt{t}} + 1\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{k} \cdot \sqrt{t}} \cdot \frac{1}{\sqrt{t+k-1}} \cdot [\sqrt{(t+k-1)^3} - (t-1)\sqrt{t} - (k-1)\sqrt{k} - \sqrt{t} \cdot \sqrt{k}]. \end{aligned}$$

Conform Lemei 19, obținem că relația de mai sus este mai mare ca zero. Prin urmare, $R(T) > R(T')$. Așadar, am obținut un arbore care are valoarea indicelui Randić mai mică decât arborele T , ceea ce este o contradicție.

□

4.3.2 Arbore maximal

Lema 20. ([33]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Fie un nod claw y de grad t . Fie arborele T' obținut din arborele T prin eliminarea muchiilor pendante adiacente nodului y , formarea unui lanț din muchiile eliminate și atașarea lui la nodul y (Fig. 23). Dacă $d_T(y) \geq 3$, atunci $R(T') > R(T)$.

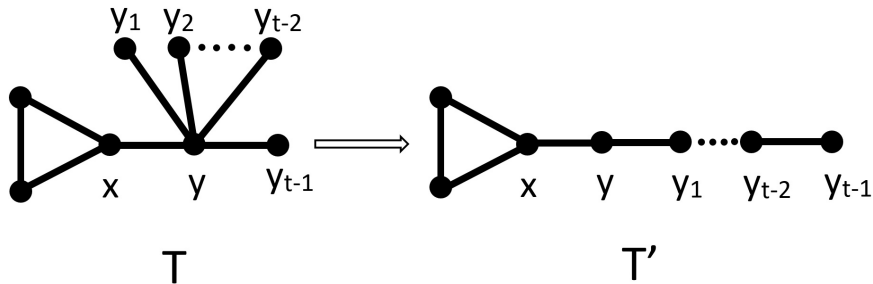


Fig. 23

Demonstrație. Fie x un nod adiacent nodului claw y . Vom considera că $d_T(y) = t$ și $d_T(x) = k$. Dacă vom presupune că $t \geq 3$ și $k \geq 1$, vom obține că:

$$\begin{aligned} R(T) - R(T') &= \frac{t-1}{\sqrt{t}} + \frac{1}{\sqrt{t} \cdot \sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{k}} - \frac{t-2}{\sqrt{4}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \\ &= (t-2)\left(\frac{1}{\sqrt{t}} - \frac{1}{\sqrt{4}}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} + 1\right)\left(\frac{1}{\sqrt{t}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \\ &< (t-2)\left(\frac{1}{\sqrt{t}} - \frac{1}{\sqrt{4}}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{t}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{4}} + \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{2}} < 0 \end{aligned}$$

Deci, am obținut că $R(T) < R(T')$ și astfel am încheiat demonstrația. \square

Lema 21. ([33]) Fie arborele maximal T_M în raport cu indicele Randić. Atunci orice nod $y \in T_M$ adiacent cu orice nod pendent x al arborelui T_M trebuie să aibă gradul 2.

Demonstrație. Fie x un nod pendent al arborelui T_M și fie y un nod adiacent cu acesta. Vom considera că L este cel mai lung lanț al arborelui T_M care conține nodul y astfel încât nodul t este un nod pendent și $et \in E(L)$. Conform Lemei 20, știm că $d_{T_M}(e) = 2$.

Dacă $d_{T_M}(y) = k \geq 4$, atunci prin alegerea unui nod pendent x pe care îl conecta la nodul t printr-o muchie, vom obține un nou arbore T' . Această transformare este reprezentată în Fig. 24.

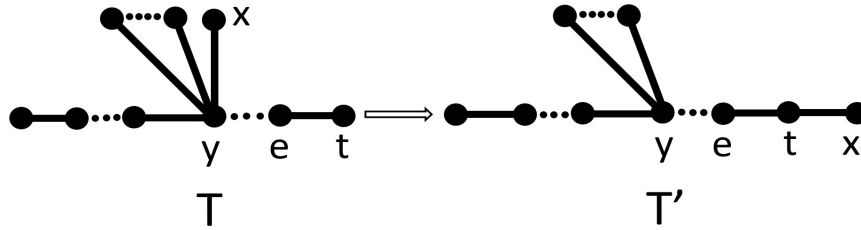


Fig. 24

În acest caz, vom obține că:

$$R(T_M) - R(T') = \sum_{ys \in E(T_M) \setminus \{yx\}} \frac{1}{\sqrt{d_{T_M}(y) \cdot d_{T_M}(s)}} \left(1 - \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{k-1}}\right) + \frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{4}}.$$

Deoarece $k \geq 4$, deducem că $1 - \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{k-1}} < 0$. Prin urmare, $R(T_M) < R(T')$, ceea ce este o contradicție.

Mai rămâne să demonstrăm cazul $k = 3$. Dacă vom presupune că $N_{T_M}(y) = \{u, v, x\}$, $d_{T_M}(u) = r \geq 2$ și $d_{T_M}(v) = j \geq 2$, atunci vom distinge două cazuri:

Cazul $r = 2$ sau $j = 2$.

Vom presupune că $r = 2$. Fie un nod m adiacent cu nodul u cu proprietatea că $d_{T_M}(m) = d$. Prin ștergerea muchiilor um , uy și prin adăugarea muchiilor my , ux , vom obține un nou arbore T' . Observăm că dacă $d = 1$, atunci arborii T_M și T' sunt izomorfi. Prin urmare, vom considera că $d \geq 2$. În acest caz, vom obține că:

$$R(T_M) - R(T') = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{d}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{6}} - \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{d}} - \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{6}} = (1 - \frac{1}{\sqrt{d}}) \cdot (\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{2}}) < 0,$$

ceea ce este o contradicție.

Cazul $r \geq 3$ și $j \geq 3$.

Prin ștergerea nodurilor x , y , adăugarea unei noi muchii uv și unui lanț de lungime doi la nodul pendent al lanțului L , vom obține că:

$$\begin{aligned} R(T_M) - R(T') &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{1}{\sqrt{r}} + \frac{1}{\sqrt{j}} + 1) - 2\frac{1}{\sqrt{4}} - \frac{1}{\sqrt{r}\sqrt{j}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{r}} + \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{j}} + \frac{1}{\sqrt{3}} - 1 - \frac{1}{\sqrt{r}\sqrt{j}} = \frac{\sqrt{j} + \sqrt{r} - 3}{3\sqrt{r}\sqrt{j}} + \frac{1}{\sqrt{3}} - 1 = h(r, j) \end{aligned}$$

Deoarece

$$\frac{\partial h}{\partial r} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{r^3}} - \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{j^3}} \frac{1}{\sqrt{j}} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{r^3}} (\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{3}}) \leq 0$$

și $h(3, j) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{j}} + 1) - 2\frac{1}{\sqrt{4}} - \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{j}} = \frac{1}{3} + \frac{1}{\sqrt{3}} - 1 < 0$, vom deduce că $R(T_M) - R(T') < 0$, ceea ce este o contradicție. \square

Teorema 33. ([33]) Fie $T \in \mathcal{T}_n$. Atunci

$$R(T) \leq \frac{n-3}{2} + \sqrt{2},$$

cu egalitate dacă și numai dacă $T \cong L_n$.

Demonstrație. Vom presupune prin absurd că arborele T are valoarea maximă a indicelui Randić și că acesta nu este un lanț.

Vom alege o muchie xy cu valoarea $\frac{1}{\sqrt{x}\sqrt{y}}$ minimă și cel mai lung lanț L al arborelui T cu proprietatea că $xy \in E(L)$. Vom presupune că u , v sunt nodurile pendante ale lanțului L și că r , q sunt nodurile adiacente nodului u , respectiv v .

Vom construi arborele T' pornind de la arborele T prin adăugarea muchiei uv și prin ștergerea muchiei xy . Această transformare este reprezentată în Fig. 25.

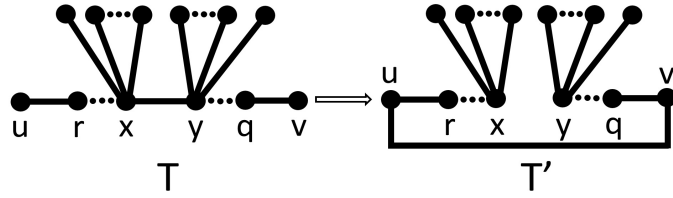


Fig. 25

Conform celor două leme de mai sus, știm că $d_T(r) = d_T(q) = 2$. Dacă vom presupune că $d_T(x) = c$ și $d_T(y) = t$, atunci vom obține că:

$$\sum_{xs \in E(T) \setminus \{xy\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(x) \cdot d_T(s)}} \geq \frac{c-1}{\sqrt{c} \cdot \sqrt{t}}$$

$$\sum_{ys \in E(T) \setminus \{yx\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(y) \cdot d_T(s)}} \geq \frac{t-1}{\sqrt{t} \cdot \sqrt{c}}$$

Prin urmare, vom obține că:

$$\begin{aligned} R(T') - R(T) &= \sum_{xs \in E(T) \setminus \{xy\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(x) \cdot d_T(s)}} \left(\frac{\sqrt{c}}{\sqrt{c-1}} - 1 \right) \\ &+ \sum_{ys \in E(T) \setminus \{yx\}} \frac{1}{\sqrt{d_T(y) \cdot d_T(s)}} \left(\frac{\sqrt{t}}{\sqrt{t-1}} - 1 \right) + \frac{3}{\sqrt{4}} - \frac{2}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{t}\sqrt{c}} \\ &\geq \frac{\sqrt{c-1}}{\sqrt{t}} + \frac{\sqrt{t-1}}{\sqrt{c}} - \frac{c+t-1}{\sqrt{t}\sqrt{c}} + \frac{3}{\sqrt{4}} - \frac{2}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{\sqrt{c-1}\sqrt{c} + \sqrt{t-1}\sqrt{t} - c - t + 1}{\sqrt{t}\sqrt{c}} + \frac{3-2\sqrt{2}}{2} = h(c, t) \end{aligned}$$

Deci, va trebui să arătăm că $h(c, t) > 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial c} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{c-1}} \cdot \frac{1}{\sqrt{t}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{t-1}}{\sqrt{c^3}} - \frac{1}{\sqrt{c}\sqrt{t}} + \frac{1}{2} \cdot (c+t-1) \cdot \frac{1}{\sqrt{t}\sqrt{c^3}} \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{t}} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{c-1}} - \frac{1}{\sqrt{c}} \right) - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{t-1}{c} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{c}} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{t-1}} - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{t}\sqrt{c}} \cdot \frac{1}{\sqrt{c-1}\sqrt{t-1}} \cdot [\sqrt{t-1}(\sqrt{c} - \sqrt{c-1}) - \frac{(t-1)\sqrt{c-1}}{c}(\sqrt{t} - \sqrt{t-1})] \end{aligned}$$

Vom nota cu $H(t, c) = \sqrt{t-1}(\sqrt{c} - \sqrt{c-1}) - \frac{(t-1)\sqrt{c-1}}{c} \cdot (\sqrt{t} - \sqrt{t-1})$.

Deoarece $\sqrt{1 + \frac{1}{t-1}} \leq 1 + \frac{1}{2(t-1)}$, vom deduce că:

$$\begin{aligned} H(t, c) &= \sqrt{t-1}(\sqrt{c} - \sqrt{c-1}) - \frac{(t-1)\sqrt{c-1}}{c}(\sqrt{t} - \sqrt{t-1}) \\ &= \sqrt{t-1}[\sqrt{c} - \sqrt{c-1} - \frac{(t-1)\sqrt{c-1}}{c}(\sqrt{1 + \frac{1}{t-1}} - 1)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\geq \sqrt{t-1}(\sqrt{c} - \sqrt{c-1} - \frac{\sqrt{c-1}}{2c}) = \sqrt{t-1}\sqrt{c-1}(\sqrt{1 + \frac{1}{c-1}} - 1 - \frac{1}{2c}) \\
&\geq \sqrt{t-1}\sqrt{c-1}(\frac{1}{2c-1} - \frac{1}{2c}) > 0
\end{aligned}$$

Prin urmare, $\frac{\partial h}{\partial c} > 0$. În mod similar, se arată că $\frac{\partial h}{\partial t} > 0$. Datorită faptului că $h(3, 2) > h(2, 2) = 0$, vom obține că $R(T') - R(T) > 0$.

Repetând această tranformare de un număr suficient de ori vom obține că L_n este arborele ce deține valoarea maximă a indicelui Randić în ceea ce privește arborii cu n noduri. \square

4.3.3 Grafuri uniceclice

Lema 22. Fie r, s două numere naturale cu proprietatea că $r \geq 1$ și $s \geq 2$. Funcția

$$g(r, s) = \frac{r+1}{\sqrt{s}} + \frac{s-1-r}{\sqrt{2s}} - \frac{r}{\sqrt{s-1}} - \frac{s-1-r}{\sqrt{2(s-1)}}$$

este descrescătoare în variabila r .

Demonstrație. Prin calcul obținem

$$\begin{aligned}
\frac{\partial g}{\partial r} &= \frac{1}{\sqrt{s}} - \frac{1}{\sqrt{2s}} - \frac{1}{\sqrt{s-1}} + \frac{1}{\sqrt{2(s-1)}} \\
&= \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2s}} - \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2(s-1)}} < 0,
\end{aligned}$$

de unde concluzia. \square

Lema 23. Fie z un număr întreg pozitiv cu proprietatea că $z \geq 2$. Dacă vom nota cu

$$f(z) = \frac{z-1}{\sqrt{z}} + \frac{1}{\sqrt{2z}} - \frac{z-2}{\sqrt{z-1}} - \frac{1}{\sqrt{2(z-1)}},$$

atunci funcția $f(z)$ este o funcție descrescătoare în variabila z .

Demonstrație. Pentru că

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial z} &= \frac{z+1}{2z\sqrt{z}} - \frac{1}{2z\sqrt{2z}} - \frac{z}{2(z-1)\sqrt{z-1}} + \frac{1}{2(z-1)\sqrt{2(z-1)}} \\
&= \frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{z}} - \frac{1}{\sqrt{z-1}}) + \frac{1}{2}(\frac{1}{z\sqrt{z}} - \frac{1}{(z-1)\sqrt{z-1}}) + \frac{1}{2\sqrt{2}}(\frac{1}{(z-1)\sqrt{z-1}} - \frac{1}{z\sqrt{z}}) \\
&= \frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{z}} - \frac{1}{\sqrt{z-1}}) + \frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{2}}(\frac{1}{z\sqrt{z}} - \frac{1}{(z-1)\sqrt{z-1}}) < 0,
\end{aligned}$$

atunci putem spune că funcția $f(z)$ este o funcție descrescătoare în variabila z . \square

Lema 24. ([8]) Fie un graf conex simplu G cu n noduri. Atunci:

$$R(G) \leq \frac{n}{2},$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G este un graf regulat.

Demonstrație. Vom nota cu $m_{k,l} = |\{xy \in E(G) | d_G(x) = k, d_G(y) = l\}|$ și $r_j = |\{x \in V(G) | d_G(x) = j\}|$. În acest caz, vom putea spune că:

$$r_1 + r_2 + \dots + r_{n-1} = n - r_0, \quad (47)$$

$$R(G) = \sum_{1 \leq k \leq l \leq n-1} \frac{m_{k,l}}{\sqrt{k \cdot l}}, \quad (48)$$

Prin numărarea muchiilor care au un nod de grad k pentru $k = 1, 2, \dots, n-1$, vom obține că:

$$\sum_{\substack{l=1 \\ l \neq 1}}^n m_{k,l} + 2m_{k,k} = k \cdot r_k$$

Putem să scriem relația de mai sus astfel:

$$r_k = \frac{1}{k} \cdot \left(\sum_{\substack{l=1 \\ l \neq 1}}^n m_{k,l} + 2m_{k,k} \right) \quad (49)$$

Înlocuind relația (49) înapoi în relația (47), vom obține că:

$$\sum_{1 \leq k \leq l \leq n-1} \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{l} \right) m_{k,l} + 2 \sum_{k=1}^{n-1} \frac{m_{k,k}}{k} = n - r_0. \quad (50)$$

Dacă vom rescrie relația (48) astfel:

$$R(G) = \sum_{1 \leq k \leq l \leq n-1} \frac{m_{k,l}}{\sqrt{k \cdot l}} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{m_{k,k}}{k} \quad (51)$$

și dacă vom combina relațiile (50) și (51) ca să scapăm de termenul $\sum_{k=1}^{n-1} \frac{m_{k,k}}{k}$, atunci vom ajunge la relația următoare.

$$\begin{aligned} n - r_0 - 2R(G) &= \sum_{1 \leq k \leq l \leq n-1} \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{l} - \frac{2}{\sqrt{kl}} \right) \cdot m_{k,l} \\ &= \sum_{1 \leq k \leq l \leq n-1} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{l} \right)^2 \cdot m_{k,l} \end{aligned}$$

Aşadar, vom obține că

$$R(G) = \frac{n - r_0}{2} - \frac{1}{2} \cdot \sum_{1 \leq k \leq l \leq n-1} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{l}\right)^2 \cdot m_{k,l}$$

Luând în calcul că graful G este un graf conex simplu, atunci relația de mai sus o putem scrie astfel:

$$R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_{1 \leq k \leq l \leq n-1} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{l}\right)^2 \cdot m_{k,l} \quad (52)$$

Partea dreaptă a egalității din relația (52) atinge valoarea maximă dacă și numai dacă graful G nu are muchii $xy \in E(G)$ cu proprietatea că $d_G(x) \neq d_G(y)$. Atunci, vom obține că $d_G(x) = d_G(y)$ pentru orice $xy \in E(G)$, ceea ce înseamnă că graful G este un graf regulat. \square

Vom considera $K_{1,n-1}^+$, graful din Fig. 10 (secțiunea 3.2.2)

Teorema 34. ([23]) Fie un graf $G \in \text{Unicl}_n$ cu $n \geq 3$ noduri. Atunci:

$$\frac{1}{2} + \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} \leq R(G) \leq \frac{n}{2}.$$

În particular, egalitatea stângă este valabilă dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}^+$, iar egalitatea dreaptă este valabilă dacă și numai dacă $G \cong C_n$.

Demonstrație. Conform Lemei 24, știm că $R(G) \leq \frac{n}{2}$ cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G este un graf regulat. Deoarece C_n este singurul graf regulat unicyclic cu n noduri, atunci $R(G) = \frac{n}{2}$ dacă și numai dacă $G \cong C_n$.

Prin urmare, pentru a demonstra a doua inegalitate vom presupune că graful $G \not\cong C_n$ și vom demonstra că $\frac{1}{2} + \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} \leq R(G)$ cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $G \cong K_{1,n-1}^+$. Pentru simplitate, vom nota $h(z) = \frac{z-3}{\sqrt{z-1}} + \frac{2}{\sqrt{2(z-1)}} + \frac{1}{2}$.

Vom demonstra a doua inegalitate folosind o inducție după n . Deoarece pentru $n = 4$ și $n = 5$ teorema este valabilă, atunci vom considera cazul $n \geq 6$. Pentru că graful G nu este izomorf cu C_n , atunci există noduri de grad 1 în graful G . Dacă vom considera un nod pendent x și un nod y adiacent cu acesta, atunci $d_G(y) \geq 2$. Vom nota cu $P(x) = \{v \in N_G(y) \setminus \{x\} \mid d_G(v) = 1\}$. Vom alege un nod x_0 astfel încât:

- (a) $|P(x_0)|$ să fie cât se poate de mare.
- (b) referitor la (a), $d_G(y)$ este cât se poate de mic.

Dacă vom presupune că $N_G(y) \setminus \{x_0\} = \{v_1, v_2, \dots, v_{d_G(y)-1}\}$ și vom construi graful G' astfel încât $G' = G - x_0$, atunci G' este un graf unicyclic cu $n - 1$ noduri.

În acest caz, putem spune că:

$$\sum_{ys \in E(G) \setminus \{yx_0\}} \frac{1}{\sqrt{y}\sqrt{s}} = \sum_{k=1}^{d_G(y)-1} \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}\sqrt{d_G(v_k)}}$$

$$\sum_{ys \in E(G')} \frac{1}{\sqrt{y}\sqrt{s}} = \left[\sum_{ys \in E(G) \setminus \{yx_0\}} \frac{1}{\sqrt{y}\sqrt{s}} \right] \cdot \sqrt{\frac{d_{G'}(y)}{d_G(y) - 1}}$$

Conform ipotezei de inducție, știm că:

$$\begin{aligned}
R(G) &= R(G') + \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}} + \sum_{k=1}^{d_G(y)-1} \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}\sqrt{d_G(v_k)}} \\
&\quad - \left(\sum_{k=1}^{d_G(y)-1} \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}\sqrt{d_G(v_k)}} \right) \sqrt{\frac{d_{G'}(y)}{d_{G'}(y)-1}} \\
&\geq h(n-1) + \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}} + \sum_{k=1}^{d_G(y)-1} \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}\sqrt{d_G(v_k)}} \left[1 - \sqrt{\frac{d_{G'}(y)}{d_{G'}(y)-1}} \right] \\
&= h(n) + \frac{n-4}{\sqrt{n-2}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}} + \sum_{k=1}^{d_G(y)-1} \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}\sqrt{d_G(v_k)}} \left[1 - \sqrt{\frac{d_{G'}(y)}{d_{G'}(y)-1}} \right] \tag{53}
\end{aligned}$$

Vom considera două cazuri:

Cazul 1. $d_G(v_j) \geq 2$ pentru $j = 1, 2, \dots, d_G(y) - 1$.

Conform alegerii nodului x , știm că $P(x) = \emptyset$ pentru orice nod pendent x .

Vom arăta mai întâi că $d_G(y) = 2$ sau $d_G(y) = 3$. Dacă $d_G(y) \geq 4$, atunci există cel puțin un nod în $\{v_1, v_2, \dots, v_{d_G(y)-1}\}$ pe care îl vom nota cu v_1 , astfel încât componenta H a grafului $G - y$ care îl include pe v_1 să fie un arbore și $|V(H)| \geq 2$. Deoarece $P(x) = \emptyset$ pentru orice nod pendent x , atunci există un nod pendent $x' \in V(H)$ și o muchie $x'y' \in E(G)$ astfel încât $d_G(v') = 2$. Acest lucru este o contradicție. Prin urmare, $d_G(y) \leq 3$.

Dacă $d_G(y) = 2$, atunci conform relației (53) vom obține că:

$$\begin{aligned}
R(G) &\geq h(n) + \frac{n-4}{\sqrt{n-2}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{1}{2} \\
&= h(n) + \left(-\frac{n-3}{\sqrt{n-1}} + \frac{n-3}{\sqrt{n-2}} \right) + \left(-\frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} \right) + \left(-\frac{1}{\sqrt{n-2}} + \frac{1}{2} \right) > h(n)
\end{aligned}$$

Dacă $d_G(y) = 3$ și $n \geq 9$, atunci vom obține că:

$$\begin{aligned}
R(G) &\geq h(n) + \frac{n-4}{\sqrt{n-2}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} + \left(1 - \sqrt{\frac{3}{2}} \right) \frac{2}{\sqrt{6}} + \frac{1}{\sqrt{3}} \\
&= h(n) + \left(-\frac{n-3}{\sqrt{n-1}} + \frac{n-3}{\sqrt{n-2}} \right) + \left(-\frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} \right) + \left(0,394 - \frac{1}{\sqrt{n-2}} \right) > h(n)
\end{aligned}$$

Cazul 2. există o serie de valori $1 \leq j \leq d_G(y) - 1$ astfel încât $d_G(v_j) = 1$.

Fără a pierde generalitatea, vom asuma că $d_G(v_1) = d_G(v_2) = \dots = d_G(v_k) = 1$ și $d_G(v_j) \geq 2$ pentru $k+1 \leq j \leq d_G(y) - 1$, unde $k \geq 1$.

Prin urmare,

$$\sum_{ys \in E(G) \setminus \{yx_0\}} \frac{1}{\sqrt{y}\sqrt{s}} \leq \frac{k}{\sqrt{d_G(y)}} + \frac{d_G(y) - 1 - k}{\sqrt{2d_G(y)}}$$

Conform relației (53) vom obține că:

$$\begin{aligned} R(G) &\geq h(n) + \frac{n-4}{\sqrt{n-2}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{1}{\sqrt{d_G(y)}} \\ &\quad + [1 - \sqrt{\frac{d_G(y)}{d_G(y)-1}}] \cdot [\frac{k}{\sqrt{d_G(y)}} + \frac{d_G(y) - 1 - k}{\sqrt{2d_G(y)}}] \\ &= h(n) + \frac{n-4}{\sqrt{n-2}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} \\ &\quad + \frac{k+1}{\sqrt{d_G(y)}} + \frac{d_G(y) - 1 - k}{\sqrt{2d_G(y)}} - \frac{k}{\sqrt{d_G(y)-1}} - \frac{d_G(y) - 1 - k}{\sqrt{2(d_G(y)-1)}} \end{aligned}$$

Dacă $d_G(y) = n-1$, atunci $G \cong K_{1,n-1}^+$.

Vom asuma că $d_G(y) \leq n-2$. Conform faptului că graful G este un graf unicyclic cu n noduri, $k \leq d_G(y) - 2$ și Lemei 22, vom obține că

$$\begin{aligned} R(G) &\geq h(n) + \frac{n-4}{\sqrt{n-2}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} \\ &\quad + \frac{d_G(y)-1}{\sqrt{d_G(y)}} + \frac{1}{\sqrt{2d_G(y)}} - \frac{d_G(y)-2}{\sqrt{d_G(y)-1}} - \frac{1}{\sqrt{2[d_G(y)-1]}} \end{aligned}$$

Conform faptului că $d_G(y) \leq n-2$ și Lemei 23, vom obține că

$$\begin{aligned} R(G) &\geq h(n) + \frac{n-4}{\sqrt{n-2}} + \frac{2}{\sqrt{2(n-2)}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{2}{\sqrt{2(n-1)}} \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2(n-2)}} + \frac{n-3}{\sqrt{n-2}} - \frac{1}{\sqrt{2(n-3)}} - \frac{n-4}{\sqrt{n-3}} \\ &= h(n) - \frac{n-4}{\sqrt{n-3}} - \frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{n-3}} - \frac{n-3}{\sqrt{n-1}} - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{n-1}} + \frac{2n-7}{\sqrt{n-2}} + \frac{3\sqrt{2}}{2\sqrt{n-2}} > h(n) \end{aligned}$$

□

4.4 Tipuri de indici înrudiți

Indicele Randić general

Fie graful G , un graf conex cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor, respectiv muchiilor și. *Indicele Randić general al grafului G* îl vom nota cu $R_a(G)$ și îl vom defini ([5,6]) ca:

$$R_a(G) = \sum_{xy \in E(G)} [d_G(x) \cdot d_G(y)]^a$$

Indicele Randić general a apărut în anul 1990, împreună cu o serie de studii ce arătau importanța sa în ceea ce privește timpii de retenție cromatografici, formarea entalpiei și parametrii ecuației Antoine pentru presiunea vaporilor și arii de suprafață. În paralel a apărut o serie de cercetări semnificative precum cele ale lui Paul Erdős ([5,6]) care au dat naștere indicelui Randić general, dar și numeroaselor altor publicații. Acest ultim indice a avut o importanță deosebită deoarece este o generalizare utilă. Pentru $a = 1$ se regăsește al doilea indice Zagreb.

Indicele Randić general de ordinul zero

Fie graful G , un graf conex cu $V(G)$, $E(G)$ mulțimea nodurilor, respectiv muchiilor și cu n , m numărul de noduri, respectiv numărul de muchii ale grafului G . *Indicele Randić general de ordinul zero al grafului G* îl vom nota cu ${}^0R_a(G)$ și îl vom defini ([39]) ca:

$${}^0R_a(G) = \sum_{x \in V(G)} [d_G(x)]^a$$

Indicele Randić general de ordinul zero este un indice topologic semnificativ deoarece multe cercetări cu privire la acest indice au foarte multe aplicații folositoare în teoria informaticii, fiabilitatea rețelelor și în teoria grafurilor.

Pentru $a = 2$ obținem primul indice Zagreb.

Capitolul 5

Relații între indici topologici

5.1 Relația între indicele Wiener și indicele Szeged

Teorema 35. ([9]) Fie un graf 2-conex bipartit G cu $n \geq 4$ noduri. Atunci:

$$Sz(G) - W(G) \geq 4n - 8$$

cu egalitate dacă și numai dacă $G \cong C_4$.

Demonstrație. Vom reaminti că

$$W(G) = \sum_{x,y \in V(G)} d_G(x,y), Sz(G) = \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x,y)n_G^2(x,y).$$

Termenul $n_G^1(x,y)n_G^2(x,y)$ îl vom rescrie astfel:

$$Sz(G) = \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x,y)n_G^2(x,y) = \sum_{xy \in E(G)} \sum_{u,v \in V(G)} m_G^{u,v}(xy),$$

unde $m_G^{u,v}(xy) = 1$ dacă și numai dacă $d_G(u,x) < d_G(u,y)$ și $d_G(v,y) < d_G(v,x)$ sau $d_G(u,y) < d_G(u,x)$ și $d_G(v,x) < d_G(v,y)$. În caz contrar, $m_G^{u,v}(xy) = 0$. Folosind această scriere a indicelui Szeged, vom obține că

$$\begin{aligned} Sz(G) - W(G) &= \sum_{xy \in E(G)} n_G^1(x,y)n_G^2(x,y) - \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v) \\ &= \sum_{u,v \in V(G)} \sum_{xy \in E(G)} m_G^{u,v}(xy) - \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v) \\ &= \sum_{u,v \in V(G)} \left[\sum_{xy \in E(G)} m_G^{u,v}(xy) - d_G(u,v) \right]. \end{aligned}$$

Observație. Pentru orice pereche de noduri $u, v \in V(G)$, știm că

$$\sum_{xy \in E(G)} m_G^{u,v}(xy) - d_G(u,v) \geq 1.$$

Dacă $uv \in E(G)$, atunci $d_G(u,v) = 1$ și putem găsi cel mai scurt ciclu C care conține nodul u și nodul v pentru că graful G este 2-conex. În acest caz, graful $G[C]$ nu

conține muchii între două noduri neadiacente. Deoarece graful G este bipartit, atunci lungimea ciclului C este pară. În acest caz, există o muchie w care este antipodală cu muchia $uv \in C$. Este ușor de verificat că $m_G^{u,v}(w) = m_G^{u,v}(xy) = 1$, ceea ce înseamnă că observația este valabilă.

Dacă $d_G(u, v) \geq 2$, atunci vom nota cu L_1 cel mai scurt lanț de la nodul u la nodul v și L_2 al doilea cel mai scurt lanț de la nodul u la nodul v . Acest lucru înseamnă că $L_2 \neq L_1$ și $|L_2| = \min\{|L| \mid L \text{ este un lanț de la nodul } u \text{ la nodul } v \text{ și } L \neq L_1\}$. Deoarece graful G este 2-conex, atunci L_2 întotdeauna există. Dacă există mai mult de un lanț care să satisfacă condiția, vom alege L_2 ca fiind acela care are cel mai mare număr de noduri comune cu L_1 .

Dacă $E(L_1) \cap E(L_2) = \emptyset$, atunci $L_1 \cup L_2 = C$, $|E(L_1)| \geq |E(L_2)|$ și toate muchiile antipodale ale lanțului L_1 în C fac ca $m_G^{u,v}(xy) = 1$. De asemenea, știm că $m_G^{u,v}(xy) = 1$ pentru orice muchie $xy \in E(L_1)$. Prin urmare, am obținut că:

$$\sum_{xy \in E(G)} m_G^{u,v}(xy) - d_G(u, v) \geq d_G(u, v) > 1.$$

Dacă $E(L_1) \cap E(L_2) \neq \emptyset$, atunci vom nota cu $L'_j = L_j \cap C = u' L_j v'$. Este ușor de văzut că $|E(L'_2)| \geq |E(L'_1)|$ și că cel mai scurt lanț de la nodul u (sau v) la nodul y în lanțul L'_2 este $u L_2 u'$ (sau $v L_2 v'$) împreună cu cel mai scurt lanț de la u' (sau v') la nodul y în C . Deci, toate muchiile antipodale ale lanțului L'_1 în C fac ca $m_G^{u,v}(xy) = 1$. De asemenea, știm că $m_G^{u,v}(xy) = 1$ pentru orice muchie $xy \in E(L_1)$. Prin urmare, am obținut că

$$\sum_{xy \in E(G)} m^{u,v}(x, y) = |E(L_1)| + d_G(u', v') \geq d_G(u, v) + 1.$$

Acest lucru demonstrează observația. □

Vom considera că $C = y_1 y_2 \dots y_k y_1$ este cel mai scurt ciclu în graful G , unde $k \geq 4$ este un număr par. Pentru fiecare muchie $m \in E(C)$, avem că

$$m^{y_j, y_{\frac{k}{2}+j}}(m) = 1$$

pentru orice $k = 1, 2, \dots, \frac{k}{2}$. Atunci

$$\sum_{m \in E(G)} m^{y_j, y_{\frac{k}{2}+j}}(m) = |C| = k,$$

ceea ce înseamnă că

$$\sum_{m \in E(G)} m^{y_j, y_{\frac{k}{2}+j}}(m) - d_G(y_j, y_{\frac{k}{2}+j}) = \frac{k}{2} \geq 2.$$

Combinând această relație cu afirmația de mai sus vom obține că

$$Sz(G) - W(G) \geq \binom{n}{2} + \frac{k}{2} \left(\frac{k}{2} - 1 \right) \geq \binom{n}{2} + 2 \geq 4n - 8.$$

□

5.2 Relația între indicele Wiener și primul indice Zagreb

Teorema 36. ([35]) Fie un graf conex G cu m muchii, n noduri și diametrul d care nu conține cicluri de lungime 3 sau cicluri de lungime 4. Atunci:

$$W(G) \geq \frac{3(n^2 - n)}{2} + \frac{d^3 - 6d^2 + 11d}{6} - \frac{M_1(G)}{2} - 1 - m, \quad (54)$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult trei sau $G \cong L_n$.

Demonstrație. Dacă graful G are diametrul d , atunci există un lanț L_{d+1} care să fie în graful G . În graful G , există $\frac{n(n-1)}{2}$ perechi de noduri la distanța cel puțin unu. Numărul de noduri la distanța unul este egal cu m . Vom nota cu $l_G(2)$ numărul de perechi de muchii care au un nod comun.

În acest caz, există $\binom{d_G(x)}{2}$ perechi de muchii care au nodul x comun. Luând în considerare că

$$\sum_{x \in V(G)} d_G(x) = 2m,$$

atunci putem spune că

$$l_G(2) = \sum_{x \in V(G)} \binom{d_G(x)}{2} = \sum_{x \in V(G)} \frac{d_G(x)[d_G(x) - 1]}{2} = \frac{1}{2}M_1(G) - m.$$

Așadar, putem spune că numărul de perechi de noduri la distanța doi este $\frac{M_1(G)}{2} - m$. În acest caz, vom obține că:

$$\begin{aligned} W(G) &\geq W(L_{d+1}) - d + m + 2 \cdot \left(\frac{M_1(G)}{2} - m + 1 - d \right) \\ &\quad + 3 \cdot \left[\frac{n^2 - n}{2} - \frac{d^2 + d}{2} - \frac{M_1(G)}{2} - 1 + 2d \right] \end{aligned} \quad (55)$$

Din relația (55) obținem că:

$$W(G) \geq W(L_{d+1}) + \frac{3(n^2 - n)}{2} - \frac{3(d^2 + d)}{2} - \frac{M_1(G)}{2} + 3d - 1 - m.$$

Deoarece $W(L_{d+1}) = \frac{d(d+1)(d+2)}{6}$, atunci putem deduce că:

$$\begin{aligned} W(G) &\geq \frac{d^3 + 3d^2 + 2d}{6} + \frac{3(n^2 - n)}{2} - \frac{3(d^2 + d)}{2} - \frac{M_1(G)}{2} - m + 3d - 1. \\ &= \frac{3(n^2 - n)}{2} + \frac{d^3 + 3d^2 + 2d - 9d^2 - 9d + 18d}{6} - \frac{M_1(G)}{2} - 1 - m. \\ &= \frac{3(n^2 - n)}{2} + \frac{d^3 - 6d^2 + 11d}{6} - \frac{M_1(G)}{2} - 1 + m. \end{aligned}$$

Deci, am obținut că:

$$W(G) \geq \frac{3(n^2 - n)}{2} + \frac{d^3 - 6d^2 + 11d}{6} - \frac{M_1(G)}{2} - 1 + m.$$

Vom presupune că egalitatea este valabilă în relația (54). În acest caz, egalitatea este valabilă și în relația (55). Este ușor de verificat că relația (55) este valabilă dacă graful G are diametrul cel mult trei.

Dacă $d = 2$, atunci relația (54) se poate scrie astfel:

$$\begin{aligned} W(G) &\geq \frac{3(n^2 - n)}{2} + 1 - \frac{M_1(G)}{2} - 1 + m \\ &= \frac{3(n^2 - n)}{2} - \frac{M_1(G)}{2} - m \end{aligned}$$

Dacă $d = 3$, atunci relația (54) se poate scrie astfel:

$$\begin{aligned} W(G) &\geq \frac{3(n^2 - n)}{2} + 1 - \frac{M_1(G)}{2} - 1 + m \\ &= \frac{3(n^2 - n)}{2} - \frac{M_1(G)}{2} - m \end{aligned}$$

În caz contrar, dacă $d \geq 4$, atunci $n = d + 1$, ceea ce înseamnă $G \cong L_n$.

Dacă vom considera că $G \cong L_n$, atunci deoarece $n - 1 = d = m$ și $M_1(L_n) = 4n - 6$ putem spune că:

$$\begin{aligned} W(G) &\geq \frac{3(n^2 - n)}{2} + \frac{n^3 - 9n^2 + 26n - 18}{6} - \frac{[4(n - 2) + 2]}{2} - 1 - m \\ &= \frac{(n^3 + 5n)}{6} - n = \frac{n(n + 1)(n - 1)}{6} = W(L_n). \end{aligned}$$

Așadar, egalitatea este valabilă, iar demonstrația este încheiată. □

Propoziția 42. ([35]) Fie un graf conex G cu m muchii și $n \geq 2$ noduri care nu conține cicluri de lungime 3 sau cicluri de lungime 4. Atunci:

$$W(G) \geq \frac{3(n^2 - n)}{2} - \frac{M_1(G)}{2} - m,$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult trei.

Demonstrație. Deoarece $\frac{d^3 - 6d^2 + 11d}{6} \geq 1$ pentru orice $d \geq 2$, atunci conform Teoremei anterioare, putem spune că:

$$W(G) \geq \frac{3(n^2 - n)}{2} + \frac{d^3 - 6d^2 + 11d}{6} - \frac{M_1(G)}{2} - 1 - m.$$

Această relație implică faptul că:

$$\begin{aligned} W(G) &\geq \frac{3(n^2 - n)}{2} + 1 - \frac{M_1(G)}{2} - 1 - m \\ &\geq \frac{3(n^2 - n)}{2} - \frac{M_1(G)}{2} - m, \end{aligned}$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult trei. □

Teorema 37. ([35]) Fie un arbore T cu $n \geq 2$ noduri. Atunci:

$$W(T) \geq M_1(T) - (n - 1),$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T \cong K_{1,n-1}$.

Demonstrație. Conform Teoremei 30, știm că $M_1(T) \leq n(n - 1)$, cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T \cong K_{1,n-1}$. Conform Propoziției 42 și faptului că arborele T are $m = n - 1$, putem spune că:

$$\begin{aligned} W(T) &\geq \frac{3(n^2 - n)}{2} - \frac{M_1(T)}{2} - (n - 1) \\ &= \frac{3.M_1(T)}{2} - \frac{M_1(T)}{2} - (n - 1) = M_1(T) - (n - 1), \end{aligned}$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T \cong K_{1,n-1}$ și astfel am demonstrat teorema. \square

5.3 Relația între indicele Harary și primul indice Zagreb

Teorema 38. ([7,11]) Fie un graf conex G cu m muchii și $n \geq 3$ noduri care nu conține cicluri de lungime 3 sau cicluri de lungime 4. Atunci:

$$H(G) \leq \frac{1}{2}(m + \frac{n^2 - n}{3}) + \frac{M_1(G)}{12},$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult 3.

Demonstrație. Observăm că există $\binom{n}{2}$ perechi de noduri la distanță cel puțin 1 și numărul de perechi de noduri la distanță 1 este m .

Conform unui raționament din Teorema 36, știm că

$$l_G(2) = \frac{1}{2}M_1(G) - m.$$

Deoarece graful G este un graf care nu conține cicluri de lungime 3 sau cicluri de lungime 4 și faptului că $l_G(2) = \frac{M_1(G)}{2} - m$, atunci vom obține că

$$\begin{aligned} H(G) &\leq m + \frac{1}{2}[\frac{M_1(G) - 2m}{2}] + \frac{1}{3}[\frac{n^2 - n}{2} - \frac{M_1(G)}{2}] \\ &= \frac{n^2 - n}{6} + \frac{m}{2} + \frac{M_1(G)}{12}, \end{aligned}$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G are diametrul cel mult 3. \square

5.4 Relația între indicele armonic și primul indice Zagreb

Teorema 39. ([55]) Fie un graf conex G cu m muchii și n noduri. Atunci:

$$A(G) > \frac{2m^2}{M_1(G)}.$$

Demonstrație. Primul indice Zagreb al unui graf conex G poate fi scris astfel:

$$M_1(G) = \sum_{xy \in E(G)} [d_G(x) + d_G(y)].$$

Dacă vom considera inegalitatea Cauchy-Buniakovski-Schwarz, atunci vom obține că $A(G) \cdot M_1(G) \geq 2m^2$, ceea ce înseamnă că $A(G) > \frac{2m^2}{M_1(G)}$. Evident, egalitatea nu este valabilă deoarece $d_G(x) + d_G(y) \neq \frac{2}{d_G(x) + d_G(y)}$ pentru orice $xy \in E(G)$. Acest detaliu completează demonstrația. \square

5.5 Relația între indicele armonic și indicele Randić

Teorema 40. ([55]) Fie un graf conex G cu m muchii și n noduri. Atunci:

$$A(G) \leq R(G),$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă graful G este un graf regulat cu $\frac{2m}{n}$ noduri.

Demonstrație. Fie o muchie $xy \in E(G)$. Dacă observăm că $d_G(x) + d_G(y) \geq 2\sqrt{d_G(x) \cdot d_G(y)}$, atunci contribuția muchiei xy la $H(G)$ nu este mai mult decât $\frac{1}{\sqrt{d_G(x) \cdot d_G(y)}}$. Sumând contribuția tuturor muchiilor, vom obține că:

$$A(G) \leq \sum_{xy \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_G(x) \cdot d_G(y)}} = R(G),$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $d_G(x) = d_G(y)$ pentru orice muchie $xy \in E(G)$. Vom presupune că graful G este un graf regulat. Dacă graful G este regulat, atunci $H(G) = \frac{n}{2}$. În caz contrar, va trebui să demonstrăm că G este regulat.

Dacă vom presupune contrariul, atunci există 2 noduri, pe care le vom nota cu u și v , cu proprietatea că $d_G(u) \neq d_G(v)$ și $uv \notin E(G)$. Pentru că graful G este un graf conex, atunci trebuie să existe un lanț $y_0 y_1 \dots y_k$ în G , unde $y_0 = u$, $y_k = v$ și $k \geq 2$. Vom observa că $d_G(x) = d_G(y)$ pentru orice muchie $xy \in E(G)$. Prin urmare, $d_G(x) = d_G(y_1) = \dots = d_G(v)$, ceea ce e o contradicție cu presupunerea făcută la început. Așadar, graful G este un graf regulat. Dacă vom presupune că $d_G(x) = t$ pentru orice $x \in V(G)$, atunci știm că $n \cdot t = 2m$. Acest fapt completează demonstrația. \square

5.6 Relația între primul indice Zagreb și al doilea indice Zagreb

Propoziția 43. ([53]) Fie un arbore T și fie un nod $y \in V(T)$ astfel încât $d_T(y) \geq 2$. Atunci:

$$M_1(T) \leq d_T(y) + M_2(T).$$

Demonstrație. Vom nota cu $x_1, x_2, \dots, x_{d_T(y)}$ nodurile adiacente nodului y și cu T_j componenta arborelui $T - y$ care conține nodul x_j . De asemenea, vom nota cu $E_j = E(T_j) \cup \{yx_j\}$ și vom observa că $E(T) = E_1 \cup E_2 \cup \dots \cup E_{d_T(y)}$. Prin urmare, vom obține că

$$\begin{aligned} M_1(T) - M_2(T) &= \sum_{u \in V(T)} d_T^2(u) - \sum_{uv \in E(T)} d_T(u) \cdot d_T(v) \\ &= \sum_{u \in V(T)} \sum_{\substack{v \in V(T) \\ uv \in E(T)}} d_T(u) - \sum_{uv \in E(T)} d_T(u) \cdot d_T(v) = \sum_{uv \in E(T)} [d_T(u) + d_T(v)] - \sum_{uv \in E(T)} d_T(u) \cdot d_T(v) \\ &= \sum_{uv \in E(T)} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] = \sum_{k=1}^{d_T(y)} \sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] \end{aligned}$$

Prin urmare, este suficient să demonstrăm că

$$\sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] \leq 1$$

pentru orice $k = 1, 2, \dots, d_T(y)$. Vom demonstra afirmația folosind o inducție după numărul de noduri ale arborelui T_j .

Dacă $\sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] = 1$, atunci $E_k = \{xy_k\}$ și $d_T(y_k) = 1$. Prin urmare, $\sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] = d_T(y) + 1 - d_T(y) = 1$ și afirmația este demonstrată.

Acum, vom presupune că T_k are r noduri și că afirmația este valabilă pentru toate grafurile cu mai puțin de r noduri. De asemenea, vom presupune contrariul că $\sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] > 1$.

Fie t orice nod pendent în T_k (diferit de x_k). Vom nota cu w singurul nod adiacent nodului t și E_w mulțimea muchiilor incidente nodului w . În acest caz, observăm că mulțimea $N_T(w)$ conține t noduri și cel puțin un nod în plus.

Conform ipotezei de inducție, deducem că

$$\sum_{\substack{uv \in E_k \\ t \notin T_k}} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] < \sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)]$$

Prin urmare,

$$0 < \sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] - \sum_{\substack{uv \in E_k \\ t \notin T_k}} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)]$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{uv \in E_k} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] - \left[\sum_{uv \in E_k \setminus E_w} [d_T(u) + d_T(v) - d_T(u) \cdot d_T(v)] \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\substack{vw \in E_k \\ v \in N_T(w) \setminus \{t\}}} [d_T(v) + (d_T(w) - 1) - d_T(v)(d_T(w) - 1)] \right] \\
&= [d_T(t) + d_T(w) - d_T(t) \cdot d_T(w)] \\
&- \sum_{\substack{vw \in E_k \\ v \in N_T(w) \setminus \{t\}}} ([d_T(v) + d_T(w) - d_T(v) \cdot d_T(w)] - [d_T(v) + (d_T(w) - 1) - d_T(v)(d_T(w) - 1)]) \\
&= 1 - \sum_{\substack{vw \in E_k \\ v \in E_w \setminus \{t\}}} [1 + d_T(v)],
\end{aligned}$$

ceea ce este o contradicție. Acest lucru completează demonstrația. □

Teorema 41. ([53]) Fie un arbore T cu m muchii și $n \geq 2$ noduri. Atunci:

$$\frac{M_1(T)}{n} \leq \frac{M_2(T)}{m},$$

cu egalitatea valabilă dacă și numai dacă $T \cong K_{1,n-1}$.

Demonstrație. Dacă $T \cong K_2$, atunci afirmația este valabilă. Prin urmare, vom presupune că $T \not\cong K_2$. Fie un nod y care să dețină cel mai mic grad mai mare ca 1. Deoarece nu există două noduri de grad 1 care să fie adiacente, atunci $M_2(T) \geq m \cdot d_T(y)$. În acest caz, conform Teoremei anterioare și faptului că $m = n - 1$, vom obține că

$$\frac{M_1(T)}{M_2(T)} \leq \frac{M_2(T) + d_T(y)}{M_2(T)} = 1 + \frac{d_T(y)}{M_2(T)} \leq 1 + \frac{d_T(y)}{m \cdot d_T(y)} = \frac{m+1}{m} = \frac{n}{m}$$

Deci, am arătat că inegalitatea este valabilă.

Egalitatea din relația $1 + \frac{d_T(y)}{M_2(T)} \leq 1 + \frac{d_T(y)}{m \cdot d_T(y)}$ este valabilă dacă și numai dacă arborele T este un graf bipartit conex care are una dintre mulțimile de noduri formată doar din noduri de grad 1. Prin urmare, egalitatea relației inițiale este valabilă dacă și numai dacă $T \cong K_{1,n-1}$. □

Capitolul 6

Concluzii

În cadrul acestei lucrări de licență am aprofundat studiul indicilor topologici, domeniu aflat la intersecția între chimia matematică și teoria grafurilor. Intenția a fost ca, în urma unui studiu aprofundat, să rezulte o prezentare organizată a unor rezultate semnificative din domeniu, aducând propriile contribuții în demonstrarea detaliată a rezultatelor. Pe parcursul lucrării au fost folosite tehnici noi ce nu fac obiectul cursurilor de bază de teoria grafurilor.

În cadrul primelor capitole, am oferit cititorului instrumentele necesare parcurgerii lucrării.

În cadrul celui de al treilea capitol, am analizat o serie de indici topologici importanți din punct de vedere al apariției lor, dar și datorită rolului acestora în domeniul chimiei organice. De asemenea, am menționat o serie de exemple și de utilizări ale fiecărui indice în parte pentru a evidenția rolul și importanța acestora în numeroase domenii.

Capitolul trei prezintă valoarea fiecărui indice în raport cu anumiți indicatori ai unui graf: ordin, număr de muchii, grade sau diametru. De asemenea, sunt prezentate grafurile extreme pentru cele mai întâlnite clase de grafuri în domeniul chimiei matematice: arborii și grafurile unicyclice.

În cadrul capitolului patru, remarcăm indicele Randić, deoarece a fost supus unei expertize mult mai dezvoltate decât alți indici. Acesta a avut un rol esențial în ceea ce privește modele QSAR/QSPR.

De asemenea, am observat că anumiți indici topologici au anumite similarități în relațiile matematice care îi descriu și în ceea ce privește graful maximal asociat. Capitolul cinci prezintă o serie de relații matematice între cei mai importanți indici, ce se transpun în domeniul chimiei organice în legături între valori ale indicilor și proprietăți fizico-chimice ale compușilor pentru care sunt utilizați respectivii indici.

În literatura de specialitate, noțiunea de indice topologic generează noi studii, motivația fiind că un nou indice topologic poate modela proprietățile unor substanțe deja cunoscute sau obținerea unor noi compuși care să aibă anumite proprietăți.

În urma redactării acestei lucrări, pot afirma cu certitudine că acesta este doar un început în studiul temei, un pas următor l-ar putea constitui analiza altor indici importanți, precum *indicele de conectivitate atomică* creat și studiat de Ernesto Estrada, Torres Luis, Lissette Rodríguez și Ivan Gutman, *indicele Balaban*, creat de A. T. Balaban și *indicele Narumi-Katayama*, creat de H. Narumi, M. Katayama. Lucrarea ar putea fi completată prin adăugarea analizei indicelui de conectivitate atomică cu privire la grafurile cacti, indicelui Balaban index cu privire la grafurile regulate și a indicelui Narumi-Katayama cu privire la produsul de grafuri de spini.

În concluzie, scopul propus de aceasta lucrare a fost în principal de a arata si demonstra rezultate privind tematica dată, dar și de a aduce la cunoștință impactul indicilor topologici în industrie.

Index

A			
arbore	9	Indicele Distanță - grad	24
arbore caterpillar	9, 20	indicele Gutman	31
arbore molecular	9	indicele Harary	35
		indicele Hosoya	47
		indicele Merrifield-Simmons	47
		indicele Randić	71
B		indicele sumă-conectivitate	51
blocuri	8	indicele Szeged	57
buclă	7	indicele Wiener	10
		indicele Zagreb	60
C			
circumferință a unui graf	8	M	
cuplaj	7	mărimea unui graf	7
		model QSAR	6
D		model QSPR	6
diametrul unui graf	8	muchie	7
		muchie pendentă	7
E		mulțime independentă	7
excentricitate	8	multimuchie	7
G		N	
graf biciclic	8	nod	7
graf bipartit complet	9	nod claw	7
graf complet	9	nod pendent	7
graf neorientat	7	nod suport	7
graf regulat	9		
graf separabil	8	O	
graf stea	9	ordinul unui graf	7
graf uniciticlic	8		
		R	
I		rază	8
indice topologic	6		
Indicele armonic	42		

Bibliografie

- [1] V. Andova, D. Dimitrov, J. Fink and R. Škrekovski, Bounds on Gutman Index, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 67(2012), 515-524.
- [2] A. T. Balaban, Chemical graph theory and the sherlock holmes principle. Hyle 19(2013), 107–134.
- [3] A. T. Balaban, T. S. Balaban and O. Ivanciuc, Reciprocal distance matrix, related local vertex invariants and topological indices, J. Math. Chem. 12(1993), 309-218.
- [4] A. T. Balaban and O. Ivanciuc, Historical development of topological indices. In Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR, J. Devillers and A. T. Balaban, Eds. Gordon and Breach Science Publisher, Amsterdam(1999), 21–57.
- [5] B. Bollobás and P. Erdős, Graphs of extremal weights, Ars Combin. 50(1998), 225–233.
- [6] B. Bollobás, P. Erdős and A. Sarkar, Extremal graphs for weights, Discrete Math. 200(1999), 5–19.
- [7] X. Cai, B. Zhou and N. Trinajstić, On Harary Index, J. Math. Chem. 44(2008), 611-618.
- [8] G. Caporossi, I. Gutman, P. Hansen and L. Pavlovic, Graphs with maximum connectivity index, Comput. Biol. Chem. 27(2003), 85–90.
- [9] L. Chen, X. Li, M. Liu and I. Gutman, On a relation between Szeged and Wiener Indices of Bipartite Graphs, Transaction on Combinatorics Vol. 1 No. 4(2012), 43-49.
- [10] K. Ch. Das, Sharp bounds for the sum of the squares of the degrees of a graph, Kragujevac J. Math. 25(2003), 31-49.
- [11] K. Ch. Das and I. Gutman, The first Zagreb index 30 years after, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 50(2004), 83-92.
- [12] K. Ch. Das and I. Gutman, Some properties of the second Zagreb index, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 52(2004), 103-112.
- [13] K. Ch. Das and I. Gutman, Estimating the Szeged index, Applied Mathematics Letters 22(2009), 1680-1684.
- [14] K. Ch. Das and I. Gutman, Estimating the Wiener Index by Means of Number of Vertices, Number of Edge and Diameter, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 64(2010), 647-660.

- [15] K. Ch. Das, B. Zhou and N. Trinajstić, Bounds on Harary Index, *J. Math. Chem.* 46(2009), 1377-1393.
- [16] A. A. Dobrynin, A. A. Kochetova, Degree distance of a graph: A degree analogue of the Wiener index, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 34(1994), 1082-1086.
- [17] A. A. Dobrynin, I. Gutman, The Szeged index-A success story, *Graph Theory Notes*, N.Y. 34(1998), 37-44.
- [18] P. Erdős, T. Gallai, On maximal paths and circuits of graphs, *Acta Math. Acad. Sci. Hungar.* 10(1976), 337-356
- [19] E. Estrada, L. Torres, L. Rodríguez and I. Gutman, *Indian J. Chem.* 37A(1998), 849.
- [20] S. Fajtlowicz, On conjectures of Graffiti II, *Congr. Numer.* 60(1987), 187-197.
- [21] L. Feng and W. Liu, The Maximal Gutman Index of Bicyclic Graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 66(2011), 699-708.
- [22] L. Feng, The Guman Index of unicyclic graphs, *Discrete Mathematics, Algorithms and Applications* Vol. 4 No. 03(2012), 669-708.
- [23] J. Gao and M. Lu, On the Randic index of unicyclic graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 53(2005), 377-384
- [24] I. Gutman, Selected properties of the Schultz molecular topological index, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 34(1994), 1087-1089.
- [25] I. Gutman, A formula for the Wiener number of trees and its extension to graphs containing cycles, *Graph Theory Notes* N.Y. 27(1994) , 9-15.
- [26] I. Gutman, A property of the Wiener number and its modifications, *Indian Journal of Chemistry* Vol. 36A(1997), 128-132.
- [27] I. Gutman, N. Trinajstić, Graph theory and molecular orbitals. Total π -electron energy of alternant hydrocarbons, *Chem. Phys. Lett.* 17(1972), 535-538.
- [28] I. Gutman, B. Rušćić, N. Trinajstić and C. F. Wilcox, Graph theory and molecular orbitals. XII. Acyclic polyenes, *J. Chem. Phys.* 62(1975), 3399-3405.
- [29] I. Gutman and O. E. Polansky, *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*, Springer-Verlag, Berlin(1986).
- [30] I. Gutman and B. Liu, Upper bounds for Zagreb indices of connected graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 55(2006) 439-446.
- [31] H. Hosoya, Topological index, a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 44(1971), 2332-2339.
- [32] Y. M. Hu, X. Li and Y. Yuan, Trees with minimum general Randić index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 52(2004), 119-128.

- [33] Y. M. Hu, X. Li and Y. Yuan, Trees with maximum general Randić index, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 52(2004) 129-146.
- [34] Y. M. Hu, X. Y. Zhou, On the harmonic index of the unicyclic and bicyclic graphs, WSEAS Trans. Math. 12(2013), 716–726.
- [35] M. Kamran Jamil, Properties of the Wiener index in Graph Theory, GC University Lahore, Pakistan, (2013), 15-36.
- [36] S. Kanwal and I. Tomescu, Bounds for degree distance of a graph, Math. Reports 17(67), 3(2015), 337-344.
- [37] X. Li, Z. Li and L. Wang, The Inverse Problems for Some Topological Indices in Combinatorial Chemistry, J. Comp. Biol. Vol. 10 No. 1(2003), 47-55.
- [38] S. B. Lin and C. Lin, Trees and forests with large and small independent indices, Chinese Journal of Mathematics, Vol. 23, No. 3(1995), 199-210.
- [39] X. Li and J. Zheng, A unified approach to the extremal trees for different indices, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 54 (2005), 195-208.
- [40] H. Lin, Extremal Wiener Index of Trees with All Degrees Odd, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 70(2013), 287-292.
- [41] I. Lukovits and W. Linert, Polarity–numbers of cycle–containing structures, J.Chem. Inf. Comput. Sci. 38(1998), 715–719.
- [42] R.E. Merrifield and H.E. Simmons, Topological Methods in Chemistry, Wiley, New York, 1989.
- [43] Z. Mihalić, D. Plavšić, S.Nikolić and N. Trinajstić, On the Harary index for the characterization of chemical graphs, J. Math. Chem. 12(1993), 235-250.
- [44] H. Prodinger and R. F. Tichy, Fibonacci numbers of graphs, Fibonacci Quart. 20(1982), 16-21.
- [45] M. Randić, On characterization of molecular branching, J. Am. Chem. Soc. 97(1975), 6609–6615.
- [46] M. Randić, Novel molecular descriptor for structure-property studies, Chem. Phys. Lett., 211(1993), 478-483.
- [47] H. Rezapour, G. H. Shirdel and A. M. Sayadi, The hyper-Zagreb index of graph operation, Iranian Journal of Mathematical Chemistry, Vol. 4 No.2 (2013), 213-220.
- [48] R. Shi, Average distance of trees, Sys. Sci. Math. Sci. 6(1993), 18-24.
- [49] I. Tomescu, Ordering connected graphs having small degree distances, Discrete Math. 158(2010), 1714–1717.
- [50] I. Tomescu, Some extremal properties of the degree distance of a graph, Discrete Math. 98(1999), 159–163.

- [51] N. Trinajstić and B. Zhou, On a novel connectivity index, J. Math. Chem. 46(2009), 1252-1270.
- [52] N. Trinajstić and B. Zhou, On reverse degree distance, J. Math. Chem. 47 (2010), 268-275.
- [53] D. Vukičević, Comparing Zagreb M_1 and M_2 indices for acyclic molecules, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 57(2007), 587-590.
- [54] H. Wiener, Structural determination of paraffin boiling points, J. Amer. Chem. Soc. 69(1947), 17-20.
- [55] X. Xu, Relationships between Harmonic Index and other Topological Index and other Topological Indices, Applied Mathematical Sciences, Vol. 6, 2012, no. 41, 2013-2018.
- [56] L. Zhong, The harmonic index for graphs, Applied Mathematics Letters 25(2012), 561-566.