

pp. 123-132 1994

Die Berechnung des Wiener Index für einfache Polybäume

Peter E. John Technische Universität Ilmenau Institut für Mathematik

(received: April 1994)

Abstract

The Wiener index W=W(G) (also called distance index) of a graph G=G(M), that corresponds to a molecule (or structure) M, plays an important role in connection with physicochemical properties of M (e.g.: boiling point, heat of formation, crystal defects,...). Therefore, this paper presents easy explicit formulas for W(G) if G is a socalled simple polytree.

1. Einführung

Sei G=(V,E) ein Graph mit der Knotenpunktmenge $V=V(G)=\{v_1,v_2,...,v_n\}$ und der Kantenmenge E=E(G). Weiter sei $d_{ij}=d(v_i,v_j)$ die Länge eines kürzesten Weges zwischen $v_i,v_j\in V(i,j=1,2,...,n)$. Die d_{ij} -s bilden eine symmetrische quadratische Matrix $D=D(G)=(d_{ij})$ n-ter Ordnung, welche auch als (topologische) Distanzmatrix von G bezeichnet wird. Der Wiener Index W=W(G) ist gleich der halben Summe der $d_{ij}-s$ von D (siehe Figur 1.):

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} d_{ij} = \sum_{1 \le i < j \le n} d_{ij}$$
 (1)

Im Jahre 1947 wurde dieser Index von H. Wiener [1, 2] im Zusammenhang mit physikochemischen Eigenschaften baumartiger Moleküle (Alkane) eingeführt. 1961 hat K. Altenburg [3] diesen Index für Untersuchungen der Radien derartiger Moleküle verwendet. 1971 hat H. Hosoya [4] das Wiener-Konzept auf beliebige Graphen übertragen und Gleichung (1) formuliert. Mehr Informationen zu D(G) und W(G) eines Graphen G findet der interessierte Leser z. B. in Arbeiten von D.H. Rouvray [5], P. Senn [6] und B. Mohar und T. Pisanski [7].

Herrn Professor Dr. Hans Müller (Universität Jena) zum 60. Geburtstag gewidmet.

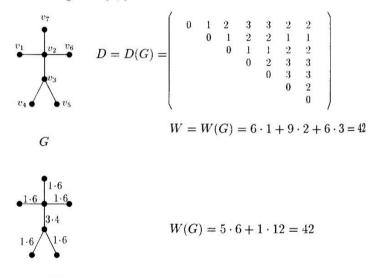
Es sei G=T=(V,E) ein Baum mit n=n(T) Knotenpunkten und m=m(T)=n-1 Kanten. Für $e\in E$ ist der Teilgraph $F(e):=T-e=(V,E-\{e\})$ ein Wald mit zwei Komponenten $F_c(e),c\in\{1,2\}$. Bezeichne $n_c(e):=n(F_c(e))$ die Anzahl der Knotenpunkte von $F_c(e)$. Offensichtlich ist für jedes $e\in E:n_1(e)+n_2(e)=n$. Wir ordnen Kante e das Gewicht $w(e)=n_1(e)\cdot n_2(e)$ zu. Damit kann (1) für G=T in der Form

$$W(T) = \sum_{e \in E(T)} w(e) \tag{2}$$

geschrieben werden.

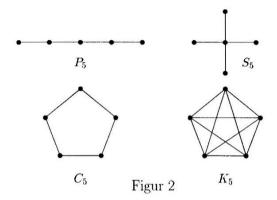
Als Beispiel betrachte Figur 1.

Für einen Baum G=T haben E.R. Canfield, R.W. Robinson und D.H. Rouvray [8] eine interessante Rekursionsformel, welche auf drei verschiedenen Summen von Distanzen basiert, hergeleitet und I. Gutman [9] hat neulich einen einfachen Algorithmus zur Berechnung von W(T) publiziert.



Figur 1

Für einige spezielle Klassen von Graphen (siehe Figur 2, n=5) sind explizite Formeln zur Berechnung von W bekannt (siehe z. B. O.E. Polansky und D. Bonchev [10]):



$$G = P_n$$
 (Weg): $W(P_n) = \binom{n+1}{3}$

$$G = S_n$$
 (Stern): $W(S_n) = (n-1)^2$

$$G = C_n$$
 (Kreis): $W(C_n) = \begin{cases} \frac{n}{8} \cdot n^2 & \text{, falls n gerade} \\ \frac{n}{8}(n^2 - 1) & \text{, falls n ungerade} \end{cases}$

$$G = K_n$$
 (vollständiger Graph): $W(K_n) = \binom{n}{2}$.

Offensichtlich gilt für W(G) von G mit n Knotenpunkten

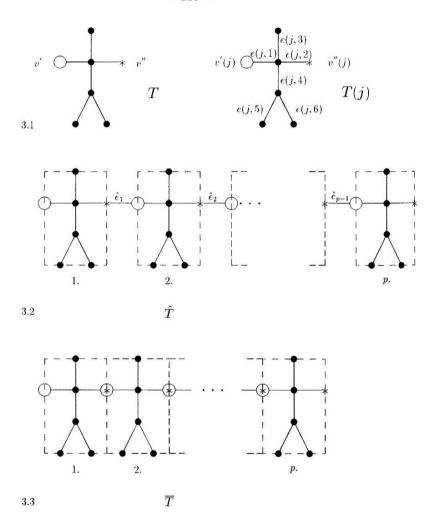
$$W(K_n) \le W(G) \le W(P_n) \tag{3.1}$$

und für einen Baum T

$$W(S_n) \le W(T) \le W(P_n). \tag{3.2}$$

2. Einfache Polybäume

Sei T=(V,E) ein Baum mit zwei (nicht notwendig verschiedenen) markierten Knotenpunkten $v',v''\in V$. Der diese beiden Knotenpunkte verbindende Weg von T werde mit P'=P(v',v'')=(V',E') bezeichnet. P' habe n'=n(P')=|V'| Knotenpunkte und m'=m(P')=|E'| Kanten. Für $e\in E'(e\in E-E')$ sei $F_1(e)(F_2(e))$ diejenige Komponente von F(e)=T-e, welche v' enthält (nicht enthält). Seien $j=1,2,\ldots,p$ Exemplare T(j) von T mit den markierten Knotenpunkten v'(j),v''(j) und den Wegen P'(j)=(v'(j),v''(j)) gegeben. Die Kanten von T(j) werden fortlaufend mit e(j,i) bezeichnet, und zwar so, daß für eine auf P'(j) liegende Kante $i\in\{1,2,\ldots,m'\}$ und für eine nicht auf P'(j) liegende Kante $i\in\{1,2,\ldots,m'\}$ und für eine nicht auf P'(j) liegende Kante $i\in\{m'+1,m'+2,\ldots,m\}$ sind (siehe Figur 3.1).



Figur 3

Damit sind für $e=\epsilon(j,i):n_1(e)=|F_1(e)|=:n_1(i)$ und $n_2(e)=n-n_1(e)=:n_2(i)$. Einen einfachen Polybaum $\hat{T}=\hat{T}(P')$ erhalten wir, indem zusätzlich (p-1) Kanten $\hat{\epsilon}_j=(v''(j),v'(j+1)),j=1,2,\ldots,p-1$, eingefügt werden (siehe Figur 3.2). Einen anderen einfachen Polybaum $\overline{T}=\overline{T}(P')$ finden wir, indem für $j=1,2,\ldots,p-1$ Knotenpunkt v''(j) mit v'(j+1) identifiziert wird (siehe Figur 3.3). Beim Übergang von T zu einem der beiden einfachen Polybäume $\hat{T}\in\{\hat{T},\overline{T}\}$ gehen $v\in V(T)$ und $e\in E(T)$ in $\hat{v}\in \hat{V}=V(\hat{T})$ bzw. $\hat{e}\in \hat{E}=E(\hat{T})$ über. Für \hat{T} lassen sich einfache explizite Formeln zur Berechnung von $\hat{W}=W(\hat{T})$ angeben.

3. Der Wiener Index eines einfachen Polybaumes

Es sei $\hat{T} = (\tilde{V}, \hat{E}) \in \{\hat{T}, T\}$ ein einfacher Polybaum mit der Kantenmenge $\hat{E} = E(\hat{T}) \in \{\hat{E}, \overline{E}\}$. Weiter seien $\hat{E}_0 = \{\hat{e}|\hat{e} \in \hat{E} \text{ und } \hat{e} = (\hat{v}''(j), \hat{v}'(j+1)) \text{ für } j=1,2,\ldots,p-1\}$, $\hat{E}_1 = \{\tilde{e} = \hat{e}(j,i)|\hat{e} \in \tilde{E} \text{ und } i=1,2,\ldots,m'\}$ und $\hat{E}_2 = \{\hat{e} = \hat{e}(j,i)|\hat{e} \in \hat{E} \text{ und } i=m'+1,m'+2,\ldots,m\}$.

3.1. Berechnung von $\hat{W} = W(\hat{T})$

Offensichtlich sind \hat{E}_k , k=0,1,2, paarweise disjunkt und $\hat{E}_0 \cup \hat{E}_1 \cup \hat{E}_2 = \hat{E}$.

Mit
$$\hat{W}_k = \sum_{\hat{e} \in \hat{E}_k} w(\hat{e}), \ k = 0, 1, 2,$$
 (4)

ist

$$\hat{W} = \sum_{k=0}^{2} \hat{W}_{k}.$$
 (5)

 $\underline{k=0}$: Für $\hat{\epsilon}=(\hat{v}''(j),\hat{v}'(j+1))\in\hat{E}_0$ ist

$$w(\hat{e}) = jn \cdot \{pn - jn\} = n^2 \cdot j(p - j), \ j = 1, 2, \dots, p - 1.$$

und somit

$$\hat{W}_0 = n^2 \sum_{j=1}^{p-1} j(p-j) = n^2 \binom{p+1}{3}.$$
 (6)

Für $k \in \{1, 2\}$ gilt $j = 1, 2, \dots, p$.

$$\begin{split} \underline{k=1} : & \text{F\"{u}r } \hat{e} = \hat{e}(j,i) \in \hat{E}_1 \text{ ist} \\ w(\hat{e}) &= w(\hat{e}(j,i)) = \{(j-1)n + n_1(i)\} \cdot \{(p-j)n + n_2(i)\} \\ &= (j-1)(p-j+1)n^2 + (p-2j+1)n \cdot n_1(i) + n_1(i) \cdot n_2(i), \\ &= 1, 2, \dots, m'. \end{split}$$

woraus

$$\hat{W}_{1} = \sum_{i=1}^{m'} \sum_{j=1}^{p} w(\hat{e}(j,i))
= m' \cdot n^{2} \sum_{j=1}^{p} (j-1)(p-j+1) + n \cdot \sum_{j=1}^{p} (p-2j+1) \cdot \sum_{i=1}^{m'} n_{1}(i)
+ p \cdot \sum_{i=1}^{m'} n_{1}(i) \cdot n_{2}(i)
= m' \cdot n^{2} \binom{p+1}{3} + p \cdot \sum_{i=1}^{m'} n_{1}(i) \cdot n_{2}(i)$$
(7)

folgt.

$$\underline{k=2}$$
: Für $\hat{e}=\hat{e}(j,i)\in\hat{E}_2$ ist

$$w(\hat{e}) = w(\hat{e}(j,i)) = \{pn - n_2(i)\} \cdot n_2(i) = \{(p-1)n + n_1(i)\}n_2(i),$$

$$i = m' + 1, m' + 2, \dots, m.$$

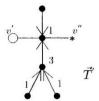
und es ist

$$\hat{W}_{2} = \sum_{i=m'+1}^{m} \sum_{j=1}^{p} w(\hat{e}(j,i)) = p(p-1)n \cdot \sum_{i=m'+1}^{m} n_{2}(i) + p \cdot \sum_{i=m'+1}^{m} n_{1}(i)n_{2}(i)
= 2 \cdot \binom{p}{2} n \cdot \sum_{i=m'+1}^{m} n_{2}(i) + p \cdot \sum_{i=m'+1}^{m} n_{1}(i) \cdot n_{2}(i).$$
(8)

Mit $s = s(T, P') = \sum_{i=m'+1}^{m} n_2(i)$, folgt aus den Gleichungen (6) - (8) und (5)

$$\hat{W} = n' \cdot n^2 \binom{p+1}{3} + 2 \binom{p}{2} ns + p \cdot W(T). \tag{9}$$

Die Größe s = s(T, P') kann algorithmisch leicht bestimmt werden (siehe Figur 4):



$$s = s(T, P') = 3 \cdot 1 + 1 \cdot 3 = 6$$

Figur 4

Zunächst orientieren wir alle Kanten von T, welche nicht in P' = P(v', v'') enthalten sind, zu v' hin, wodurch Baum T in einen Graphen $\vec{T}' = (V, \vec{E} \cup E')$ mit gerichteten Kanten $\vec{e} \in \vec{E}$ und ungerichteten Kanten $e' \in E'$ übergehe. Jede ungerichtete Kante e' erhält das Gewicht $g(e') = g(e', \vec{T}') = 0$. Einer gerichteten Kante \vec{e} , die zugleich hängende Kante von \vec{T}' ist, wird das Gewicht $g(\vec{e}) = g(\vec{e}, \vec{T}') = n_2(\vec{e}) = 1$ zugeordnet. Gibt es eventuell eine gerichtete Kante \vec{e} , die noch kein Gewicht $g(\vec{e})$ hat, so gibt es wenigstens eine Kante $\vec{e}^* \in \vec{E}$, deren Endknotenpunkt zugleich Anfangsknotenpunkt von \vec{e} ist. In diesem Falle ist $g(\vec{e}) = 1 + \sum g(\vec{e}^*) = n_2(\vec{e})$, wobei über alle möglichen \vec{e}^* zu summieren ist.

Die gesuchte Größe s ergibt sich zu:

$$s = \sum_{i=m'+1}^{m} n_2(i) = \sum_{\vec{e} \in \vec{E}} g(\vec{e}).$$

Ist P' = T, also n' = n, so haben wir s = 0. Im Falle n' < n gilt die Relation

$$(n-n') \le s \le \binom{n-n'+1}{2}.$$

Ist n'=1 (also v'=v''), so kann Knotenpunkt $v'\in V(T)$ ein Wert s'=s(v'):=s(T,v'=v'') zugeordnet werden. Offensichtlich ist im Falle $v'=v_i$ $s'=s(v'=v_i)=\sum\limits_{i=1}^n d_{ij}$.

3.2. Berechnung von $\overline{W} = W(\overline{T})$

Wegen $\overline{E}_1 \cup \overline{E}_2 = E$ und $\overline{E}_1 \cap \overline{E}_2 = \emptyset$ ist mit

$$\overline{W}_k = \sum_{\overline{e} \in \overline{E}_k} w(\overline{e}), k = 1, 2,$$
 (10)

$$\overline{W} = \sum_{k=1}^{2} \overline{W}_{k}. \tag{11}$$

Für $k \in \{1, 2\}$ ist $j = 1, 2, \dots, p$.

k=1: Für $\overline{e}=\overline{e}(j,i)\in \overline{E}_1$ (für $i=1,2,\ldots,m'$) ist

$$w(\overline{e}) = w(\overline{e}(j,i)) = \{(j-1)m + n_1(i)\} \cdot \{(p-j)m + n_2(i)\}$$

= $m^2(j-1)(p-j) + m(p-2j+1)n_1(i) + mn(j-1) + n_1(i) \cdot n_2(i),$

woraus mit (10)

$$\overline{W}_{1} = \sum_{i=1}^{m'} \sum_{j=1}^{p} w(\overline{\epsilon}(j,i))$$

$$= m'm^{2} \sum_{j=1}^{p} (j-1)(p-j) + m \sum_{j=1}^{p} (p-2j+1) \cdot \sum_{i=1}^{m'} n_{1}(i) + m'mn \sum_{j=1}^{p} (j-1)$$

$$+ p \cdot \sum_{i=1}^{m'} n_{1}(i) \cdot n_{2}(i)$$

$$= m'm^{2} {p \choose 3} + m'mn {p \choose 2} + p \sum_{i=1}^{m'} n_{1}(i) \cdot n_{2}(i)$$

$$= m'm^{2} \cdot {p+1 \choose 3} + m'm {p \choose 2} + p \cdot \sum_{i=1}^{m'} n_{1}(i) \cdot n_{2}(i)$$
(12)

folgt.

$$\underline{k=2}$$
: Ist $\overline{e}=\overline{e}(j,i)\in\overline{E}_2$, also $i=m'+1,m'+2,\ldots,m,$

so ist

$$w(\overline{e}) = w(\overline{e}(j,i)) = \{(p-1)m + n_1(i)\} \cdot n_2(i)$$

und mit (10) finden wir

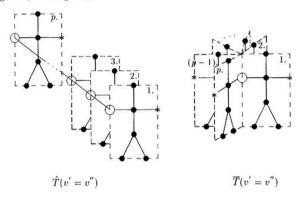
$$\overline{W}_{2} = \sum_{i=m'+1}^{m} \sum_{j=1}^{p} w(\overline{c}(j,i)) = p(p-1)m \cdot \sum_{i=m'+1}^{m} n_{2}(i) + p \cdot \sum_{i=m'+1}^{m} n_{1}(i)n_{2}(i)$$

$$= 2 \cdot \binom{p}{2} \cdot m \cdot s + p \cdot \sum_{i=m'+1}^{m} n_{1}(i)n_{2}(i). \tag{13}$$

Durch Einsetzen von (12) und (13) in (11) erhalten wir schließlich

$$\overline{W} = \binom{p+1}{3} m' m^2 + \binom{p}{2} m(m'+2s) + p \cdot W(T). \tag{14}$$

Es sei angemerkt, daß die Formeln (9) und (14) auch für den Fall v' = v''(m' = 0) gelten (siehe Figur 5).



Figur 5

4. Abschließende Bemerkung

Die hier gelöste Aufgabenstellung kann verallgemeinert werden:

Es seien für $k \in \{1, 2, \dots, q\}$ jeweils p_k Exemplare eines Baumes T_k mit den markierten Knotenpunkten v_k', v_k'' gegeben $(p_1 + p_2 + \dots + p_q = p)$. Man bestimme z. B. für q = 2 den Wiener Index $\tilde{W}(2) = W(\tilde{T}(2))$ für $\tilde{T}(2) = \tilde{T}(T_1, T_2)$ in Abhängigkeit von der T_1, T_2 -Sequenz in \tilde{T}_2 .

Literatur

- Wiener, H.: Structural determination of paraffin boiling points. J. Amer. Chem. Soc. <u>69</u> (1947), 17-20.
- [2] Wiener, H.: Correlation of heats of isomerization, and differences in heats of vaporization of isomers, among the paraffin hydrocarbons. J. Amer. Chem. Soc. 69 (1947), 2636-2638.
- [3] Altenburg, K.: Zur Berechnung des Radius verzweigter Molcküle. Kolloid-Zeitschr. 178 (1961), 112-119.
- [4] Hosoya, H.: Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. Bull. Chem. Soc. Japan 44 (1971), 2332-2339.

- [5] Rouvray, D.H.: The role of the topological distance matrix in chemistry. In: Mathematics and computational concepts in chemistry (Ed.: N. Trinajstić), John Wiley et Sons, New York-Chichester-Brisbane-Toronto, 1986, pp. 295-306.
- [6] Senn, P.: The computation of the distance matrix and the Wiener index for graphs of arbitrary complexity with weighted vertices and edges. Comput. Chem. 12 (1988), 219-227.
- [7] Mohar, B. and T. Pisanski: How to compute the Wiener index of a graph. J. Math. Chem. 2 (1988), 267-277.
- [8] Canfield, E.R.; R.W. Robinson and D.H. Rouvray: Determination of the Wiener molecular branching index for the general tree. J. Comput. Chem. <u>6</u> (1985), 598-609.
- [9] Gutman, I.: A new method for the calculation of the Wiener number of acyclic molecules. J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 285 (1993), 137-142.
- [10] Polansky, O.E. and D. Bonchev: The Wiener number of graphs. I. general theory and changes due to some graph operations. Match (Mülheim) <u>21</u> (1986), 133-186.