УДК 519.176

Верхняя оценка индекса Винера для дерева с заданными степенями и весами вершин

М. В. Губко[1]

[1] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт проблем управления им В.А. Трапезникова РАН

Индекс Винера (*WI*) – суммарное (реберное) расстояние между парами вершин графа [1] – является, пожалуй, самым известным *графовым инвариантом*. Он находит применение в математической химии и при анализе социальных сетей [2]. *WI* дает числовую меру «компактности» графа: среди деревьев с заданным числом вершин наименьшее значение *WI* имеет *звезда*, а наибольшее – *цепь*. Самое компактное *дерево с заданной последовательностью степеней вершин* – это «жадное» сбалансированное дерево, в котором длины путей от *листьев* до центральной вершины отличаются не более чем на единицу, а *степени* вершин убывают при удалении от центра [3, 4]. *WI* естественным образом обобщается на графы *со взвешенными вершинами* [5]: $VWWI(G) = \frac{1}{2}\sum_{u,v\in V}\mu_u\mu_v d_G(u,v)$, где $d_G(u, v)$ – расстояние в графе G между вершинами u и v, а μ_u, $\mu_v > 0$ – веса вершин u и v.

Для деревьев с заданными последовательностями степеней и весов вершин самым компактным (доставляющим минимум *VWWI*) является *обобщенное дерево Хаффмана*. Оно эффективно строится последовательным соединением подграфов минимального веса [6].

Задача максимизации *WI* на множестве деревьев с заданной последовательностью степеней вершин оказывается более сложной. Известно, что оптимальное дерево – это некоторая *гусеница* (дерево, превращающееся в цепь при удалении листьев), в которой степени вершин монотонно убывают от концов *центральной цепи* к ее середине [3] и в [7] предложен эффективный алгоритм оптимального размещения вершин на этой цепи. В то же время, задача максимизации *VWWI* NP-полна (к ней сводится задача о камнях).

В докладе показывается, что, как и в задаче о камнях, сложность максимизации *WI* и *VWWI* – в асимметрии весов вершин. Пусть $\mu_1 \geq \ldots \geq \mu_n$ – веса n листьев, а $\nu_1 \geq \ldots \geq \nu_q$ и $d_1 \geq \ldots \geq d_q$ – веса и степени q внутренних вершин дерева. Если $\mu_{2i} = \mu_{2i+1}$, $\nu_{2i} = \nu_{2i+1}$, $d_{2i} = d_{2i+1}$ (число вершин каждой степени и веса четно), то *VWWI* максимизируется гусеницей T, в которой вершины большего веса симметрично располагаются ближе к краям цепи и

(1) $$VWWI(T) = (\bar{\mu}+\bar{\nu})\left(\frac{q+1}{4}(\bar{\mu}+\bar{\nu})+\bar{\mu}\right) - \sum_{i=1}^{n}\mu_i^2 - \sum_{i=1}^{[q/2]} i\cdot M_i^2 - \sum_{i=1}^{[q/2]} M_i \sum_{j=1}^{i-1} j\cdot M_j,$$

где $\bar{\mu} := \sum_{i=1}^{n}\mu_i$, $\bar{\nu} := \sum_{i=1}^{q}\nu_i$, $\nu_{q+1} := 0$, $0, d_{q+1} := 1$, $M_i := \frac{1}{2}\left(\nu_{2i-1}+\nu_{2i}+\sum_{j=1+D_{i-1}}^{D_i}\mu_j\right)$, $D_0 := 0, D_1 := d_1 + d_2 - 2, D_i := 2 + \sum_{j=1}^{2i}(d_j - 2), i \geq 2$.

В общем случае асимметричных вершин выражение (1) дает верхнюю оценку *VWWI*.

Литература

1. *Wiener H.* Structural determination of paraffin boiling points // J. Am. Chem. Soc. – 1947. – N 69. – P. 17–20.
2. *Dobrynin A. A., Entringer R., Gutman I.* Wiener index of trees: theory and applications // Acta Appl. Math. – 2001. – N 66. – P. 211–249.
3. *Wang H.* The extremal values of the Wiener index of a tree with given degree sequence // Discr. Appl. Math. – 2008. – N 156. – P. 2647–2654.
4. *Zhang X.-D., Xiang Q. Y., Xu L. Q., Pan R. Y.* The Wiener index of trees with given degree sequences // MATCH Commun. Math. Comput. Chem. – 2008. – N 60. – P. 623–644.
5. *Klavžar S., Gutman I.* Wiener number of vertex–weighted graphs and a chemical application // Discr. Appl. Math. – 1997. – N 80. – P. 73–81.
6. *Goubko M.* Minimizing Wiener index for vertex-weighted trees with given weight and degree sequences // MATCH Commun. Math. Comput. Chem. – 2015. – N 73. – P. 3–27.
7. *Çela E., Schmuck, N. S., Wimer, S., Woeginger, G. J.* The Wiener maximum quadratic assignment problem // Discrete Optimization. – 2011. – V. 8. – N. 3. – P. 411–416.