

Extremal Estimates of the Wiener Index for Weakly Connected Directed Graphs

D. Y. Chalyy¹

DOI: [10.18255/1818-1015-2025-1-16-31](https://doi.org/10.18255/1818-1015-2025-1-16-31)

¹P.G. Demidov Yaroslavl State University, Yaroslavl, Russia

MSC2020: 05C45, 05C65, 05C85

Research article

Full text in Russian

Received February 15, 2025

Revised February 25, 2025

Accepted February 26, 2025

The article considers the Wiener index for weakly connected directed graphs. For such graphs, the distance $d(u, v)$ between vertices u and v is not always defined, which requires a correction for the Wiener index to be meaningful. The convention where it is assumed that $d(u, v) = 0$ in the absence of a path between vertices is well-studied. We consider the convention where $d(u, v)$ is equal to the number of vertices in the graph when there is no path between vertices u and v . The article presents graphs with n vertices for which the Wiener index with this convention reaches minimal and maximal values. We also present experimental results showing how the Wiener index (considering both conventions of distance) changes when arcs are added to a weakly connected directed graph with fixed and random structures.

Keywords: weakly connected graph; Wiener index

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Chalyy, Dmitry Y. | ORCID iD: [0000-0003-0553-7387](https://orcid.org/0000-0003-0553-7387). E-mail: chaly@uniyar.ac.ru
(corresponding author) | PhD, Associate professor, Dean of the Faculty of Information and Computer Science

Funding: Yaroslavl State University (project VIP-016).

For citation: D. Y. Chalyy, "Extremal estimates of the Wiener index for weakly connected directed graphs", *Modeling and Analysis of Information Systems*, vol. 32, no. 1, pp. 16–31, 2025. DOI: [10.18255/1818-1015-2025-1-16-31](https://doi.org/10.18255/1818-1015-2025-1-16-31).

Экстремальные оценки индекса Винера для слабо связанных ориентированных графов

Д. Ю. Чалый¹

DOI: [10.18255/1818-1015-2025-1-16-31](https://doi.org/10.18255/1818-1015-2025-1-16-31)

¹Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, Ярославль, Россия

УДК 519.17

Научная статья

Полный текст на русском языке

Получена 15 февраля 2025 г.

После доработки 25 февраля 2025 г.

Принята к публикации 26 февраля 2025 г.

В статье рассматривается индекс Винера для слабо связанных ориентированных графов. Для таких графов из-за слабой связности не всегда определено расстояние $d(u, v)$ между вершинами u и v , что требует уточнения чтобы индекс Винера имел содержательный смысл. Достаточно хорошо изучен случай, когда полагают что $d(u, v) = 0$ при отсутствии пути между вершинами. Мы рассматриваем уточнение, когда $d(u, v)$ равно количеству вершин в графе при отсутствии пути между вершинами u и v . В статье представлены графы на n вершинах, где индекс Винера с таким уточнением достигает минимального и максимального значения. Мы также представляем результаты экспериментов, которые показывают как изменяется индекс Винера (с учетом обоих способов уточнения расстояния) при добавлении дуг в слабо связанный ориентированный граф как фиксированной, так и случайной структуры.

Ключевые слова: слабо ориентированный граф; индекс Винера

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Чалый, Дмитрий Юрьевич
(автор для корреспонденции)

ORCID iD: [0000-0003-0553-7387](https://orcid.org/0000-0003-0553-7387). E-mail: chaly@uniyar.ac.ru

Канд. физ.-мат. наук, доцент, декан факультета информатики и вычислительной техники

Финансирование: ЯрГУ (проект VIP-016).

Для цитирования: D. Y. Chalyy, "Extremal estimates of the Wiener index for weakly connected directed graphs", *Modeling and Analysis of Information Systems*, vol. 32, no. 1, pp. 16–31, 2025. DOI: [10.18255/1818-1015-2025-1-16-31](https://doi.org/10.18255/1818-1015-2025-1-16-31).

Введение

Индекс Винера (Wiener Index) [1], $W(G)$, является топологическим индексом связного неориентированного графа. Индекс определяется как сумма длин кратчайших путей между всеми парами вершин графа. Изначально этот индекс был разработан для изучения точки кипения парафина при помощи использования графовых моделей химических молекул. Данное приложение показало себя вполне успешным и ряд химических свойств смогли быть сопоставлены индексу Винера. Этот индекс является достаточно хорошо изученным (см. например, обзор в [2]), особенно в случае рассмотрения неориентированных графов. Одни из первых результатов, использующих индекс Винера для ориентированных графов, были получены в [3] при исследовании социометрических задач.

Формально индекс Винера для графа G определяется при помощи формулы

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

где u, v — вершины графа, а $d_G(u, v)$ — расстояние (длина кратчайшего пути) между этими вершинами в графе G . Изначально индекс Винера рассматривался только для неориентированных связных графов, поскольку для этого класса графов расстояние между каждой парой вершин определено. В ориентированных графах могут существовать пары вершин u, v такие, что между ними отсутствует путь. В этом случае расстояние определяется как $d_G(u, v) = \infty$ и, следовательно, определение индекса Винера теряет содержательный смысл.

Существует два способа, позволяющих уточнить это определение для ориентированных графов. Первый способ (см. например, [4, 5]) определяет, что в случае отсутствия пути между вершинами u и v , полагается что $d_G(u, v) = 0$. В рамках этого подхода были получены результаты по оценке нижней границы индекса Винера для ориентированных графов [4], изучалась задача поиска минимальной и максимальной с точки зрения значения индекса Винера ориентации графа [5–7], были получены результаты поиска графов со следующим по убыванию наибольшим индексом Винера [8]. В работе [7] доказано, что для заданного графа задача определения ориентации рёбер, которая максимизирует величину индекса Винера, является NP-трудной.

Второй способ [9] устанавливает, что если между вершинами u и v отсутствует путь, то $d_G(u, v) = |V(G)|$. Эта статья имеет практический интерес, поскольку рассматривает применение графовых моделей для структурного анализа гипертекстовых систем. Однако исследование свойств индекса Винера для такого уточнения расстояния между вершинами до сих пор не было сделано. В настоящей статье рассматривается задача поиска верхней и нижней оценки индекса Винера для этого способа, а также исследование взаимосвязи с первым способом. В статье также рассматриваются экспериментальные результаты, которые позволяют провести оценку изменений индекса Винера по мере добавления дуг в граф. Действительно, произвольный слабо связный граф имеет индекс Винера, ограниченный верхней и нижней оценками и по мере добавления дуг, длины кратчайших путей между вершинами будут уменьшаться. Интерес вызывает характер изменения индекса с учетом двух способов к уточнению определения расстояния между вершинами в слабо связном графе.

1. Необходимые термины и определения

Введем необходимые определения. *Неориентированным графом* G назовем тройку, состоящую из множества вершин $V(G)$, ребер $E(G)$ и отношения, которое сопоставляет каждому ребру неупорядоченную пару вершин из множества $V(G)$. Чтобы подчеркнуть, что мы имеем дело с *ориентированным графом*, будем называть $E(G)$ множеством дуг и тогда отношение является функцией, которая сопоставляет дуге упорядоченную пару вершин из множества $V(G)$. В настоящей статье

рассматриваются графы, в которых множества $V(G)$ и $E(G)$ являются конечными, и в которых отсутствуют кратные ребра (дуги). Ориентированные графы могут содержать петли, т. е. дуги, которые соединяют вершину саму с собой. Мы ограничимся рассмотрением графов без петель.

Ориентацией графа G называется ориентированный граф D , получаемый из G выбором ориентации для каждого ребра $E(G)$.

Обозначим через $\deg_G(v)$ степень вершины v в неориентированном графе G , которая равна количеству инцидентных v ребер. В ориентированном графе введем понятия *полустепени исхода* $\deg_G^+(v)$ и *полустепени захода* $\deg_G^-(v)$ как количество дуг, которые соответственно выходят и входят в v .

Маршрутом в графе назовем чередующуюся последовательность вершин и ребер (дуг, для ориентированных графов) $v_0, e_1, v_1, e_2, \dots, v_{n-1}, e_n, v_n$, такую что $v_i \in V(G)$, $e_i \in E(G)$, причем каждой e_i сопоставлена пара (v_{i-1}, v_i) . Если все вершины маршрута попарно различны, то такой маршрут называется *простой цепью* (для неориентированных графов) или *путем* (для ориентированных). Маршрут называется *замкнутым* если $v_0 = v_n$. Будем называть *контуром* маршрут в ориентированном графе, в котором все вершины, за исключением первой и последней, различны.

Если в неориентированном графе любые две вершины соединены маршрутом, то такой граф называется связным. Для ориентированного графа D введем понятие *основного графа* G . Это граф, для которого $V(G) = V(D)$ и $(uv) \in E(G)$, если $(uv) \in E(D)$ или $(vu) \in E(D)$. Ориентированный граф называется *слабо связным*, если его основной граф является связным. Ориентированный граф называется *сильно связным*, если для любой упорядоченной пары вершин u, v существует маршрут из u в v . Очевидно, что из сильной связности графа следует его слабая связность.

Деревом называется связный неориентированный граф без циклов. *Ориентированным деревом* будем называть граф без контуров, у которого только одна вершина имеет полустепень захода, равную нулю, а остальные вершины имеют полустепени захода, равные единице.

Расстоянием $d_G(u, v)$ между вершинами u, v графа G является длина кратчайшей простой цепи (пути для ориентированных графов) между этими вершинами. В том случае, если между вершинами в графе не существует простой цепи (пути), считается, что $d_G(u, v) = \infty$.

Индекс Винера (Wiener index) $W(G)$ для связного (неориентированного) графа G определяется как сумма расстояний между всеми неупорядоченными парами вершин графа:

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

Как уже ранее говорилось, для ориентированных графов определение имеет смысл только для сильно связных графов. Обозначим через $d_G^0(u, v)$ расстояние (см., напр. [5]) которое устанавливает, что в случае отсутствия пути между вершинами u и v полагается, что $d_G^0(u, v) = 0$. Через $d_G^N(u, v)$ обозначим расстояние (см. [9]), которое устанавливает, что в этом случае $d_G^N(u, v) = |V(G)|$. Очевидно, что в произвольном графе на n вершинах расстояние между вершинами не может превышать $n - 1$. Далее будем обозначать как $W^0(G)$ и $W^N(G)$ индекс Винера, рассчитанный с использованием расстояний $d_G^0(u, v)$ и $d_G^N(u, v)$ соответственно.

Выделим несколько специальных неориентированных графов. Назовем *звездой* S_n дерево, в котором одна вершина смежна с остальными, а *путем* P_n дерево, в котором две вершины имеют степень один, а остальные вершины степень, равную двум. Через C_n обозначим граф, представляющий *замкнутую простую цепь*. При рассмотрении ориентированных графов, основные графы которых являются звездой или путем будем использовать эти же термины с уточнением касательно ориентации дуг. Так, через \vec{C}_n обозначим ориентацию графа C_n , в которой дуги ориентированы по кругу в одну сторону. Через \vec{P}_n обозначим ориентацию графа P_n , в которой дуги ориентированы таким образом, что полустепень исхода каждой вершины равна максимум единице.

2. Свойства индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$ для слабо связных ориентированных графов

Рассмотрим как изменяются значения индексов когда мы добавляем или удаляем дугу в ориентированном графе.

Лемма 1. *Добавление дуги в ориентированный граф G уменьшает значение индекса $W^N(G)$.*

Доказательство. Добавление дуги между вершинами u, v в граф G на n вершинах уменьшает значение $d_G^N(u, v)$ до единицы. Возможно также уменьшаются расстояния между другими вершинами графа, если добавленная дуга позволяет сформировать более короткий путь между ними. При этом не существует двух вершин, между которыми расстояние увеличивается. \square

Если мы добавим дугу между вершинами u, v в слабо связный ориентированный граф G , то по поводу изменения индекса $W^0(G)$ ничего определенного сказать нельзя. С одной стороны, добавление дуги может сформировать более короткий путь между вершинами. С другой стороны, у нас образуются новые пути, которые увеличивают значение расстояния d_G^0 до какого-то ненулевого значения, внося вклад в расчет индекса.

Лемма 2. *Удаление дуги из ориентированного графа G увеличивает значение индекса $W^N(G)$.*

Доказательство. Удаление дуги между вершинами u, v из графа G увеличивает значение расстояния $d_G^N(u, v)$ между ними. Между другими вершинами графа расстояние уменьшиться не может, поскольку удаление дуги не может сформировать более короткие пути между этими вершинами. \square

Что касается индекса $W^0(G)$, то здесь опять же, нет никакой определенности, вырастет, или уменьшится его значение. Допустим, дуга e входила в кратчайший путь между какими-то вершинами u, v . Тогда после ее удаления расстояние $d_G^0(u, v)$ может увеличиться, если есть альтернативная, но более длинный путь между этими вершинами, а может уменьшиться до нуля, если альтернативного пути не существует.

Можно заметить, что для слабо связного ориентированного графа справедливо тождество

$$W^N(G) - W^0(G) = m|V(G)|,$$

где m — количество пар вершин, между которыми отсутствует путь. Это позволяет сделать вывод, что для сильно связных ориентированных графов значение индексов совпадает, а для слабо связных (для которых не выполняется условие сильной связности) ориентированных графов они различны.

3. Экстремальные оценки индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$

Интерес представляет задача поиска верхней и нижней оценки индекса Винера в зависимости от количества вершин графа. Для деревьев известно [2], что если n — это количество вершин в дереве, то индекс Винера ограничен следующим образом:

$$W(S_n) \leq W(T_n) \leq W(P_n).$$

В [10] показано, что для любого неориентированного графа G выполняется $W(K_n) \leq W(G) \leq W(P_n)$, где K_n — полный граф.

Рассмотрим эту задачу для индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$. В работе [4] приводится нижняя оценка индекса Винера для сильно связного ориентированного графа:

$$W(G) \geq 2n(n-1) - m,$$

где n — это количество вершин, а m — количество дуг графа. С очевидностью, для сильно связных графов это же является нижней оценкой для индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$. Для нижней оценки $W^0(G)$ для слабо связного ориентированного графа можно использовать следующую гипотезу из [5].

Гипотеза 1. Для каждого (неориентированного) графа G минимальная оценка ориентации G' $W(G')$ достигается для некоторой ациклической ориентации G' .

В связи с этим можно доказать следующее утверждение.

Утверждение 1. Минимальное значение индекса $W^0(G)$ для слабо связного ориентированного графа на n вершинах, достигается для звезд, у которых все дуги либо исходят из одной вершины, либо заходят в одну вершину.

Доказательство. Минимальное количество ребер в связном неориентированном графе на n вершинах равно $n - 1$. Таким образом, в любой ориентации этого графа будет $n - 1$ дуга. Каждая дуга вносит в итоговое значение индекса $W^0(G)$ как минимум единицу. Следовательно, минимальное значение индекса $W^0(G)$ достигается для ациклических графов, где больше нет никаких других путей, кроме как $n - 1$ путь длины один. Это в точности звезды, в которых $n - 1$ дуга исходит из одной вершины, либо звезды, где эти дуги заходят в одну вершину. \square

Это позволяет установить оценку снизу для рассматриваемого класса графов:

$$n - 1 \leq W^0(G).$$

Сверху можно дать грубую оценку в виде

$$W^0(G) \leq n(n - 1)^2.$$

Действительно, длина наибольшего пути между парой вершин равна $n - 1$, а максимальное количество таких путей равно $n(n - 1)$. Для более точной оценки необходимо доказать несколько вспомогательных утверждений.

Лемма 3. Удаление из ориентированного дерева вершины, полустепень исхода которой равна нулю, позволяет получить новое ориентированное дерево.

Доказательство. Рассмотрим ориентированное дерево T и вершину u , полустепень исхода которой равна нулю. После удаления этой вершины из T мы получим граф T' . Докажем, что он является ориентированным деревом.

Поскольку полустепень исхода вершины u равна нулю, то эта вершина не может быть промежуточной в каком-то пути между другими вершинами в T . Следовательно, все пути из T также представлены в T' . Исключением являются пути, где u является заключительной вершиной. Следовательно, удаление вершины u не влияет на полустепени захода других вершин, которые равны единице. Единственное что изменяется, это полустепень исхода одной вершины $w \rightarrow u$. Следовательно, граф T' является ориентированным деревом. \square

Лемма 4. Среди всех ориентированных деревьев на n вершинах, индекс $W^0(T)$ максимален для дерева \vec{P}_n .

Доказательство. Лемма 3 позволяет нам использовать индукцию по количеству вершин для ориентированных деревьев.

Базис индукции. Для $n = 1$ единственным ориентированным деревом является дерево из одной изолированной вершины.

Индуктивный переход. Пусть $n > 1$. Рассмотрим вершину u в дереве T , полустепень исхода которой равна нулю. Обозначим через $T - u$ новое ориентированное дерево без вершины u . Тогда

$$W^0(T) = W^0(T - u) + \sum_{v \in V(T)} (d^0(v, u) + d^0(u, v)).$$

По предположению индукции $W^0(T - u)$ максимален только для деревьев, у которых полустепень исхода каждой вершины равна максимум единице. Так как полустепень исхода вершины u равна нулю, по определению расстояния для всех $v: d^0(u, v) = 0$.

Рассмотрим список расстояний от корня дерева T до u . В деревьях, где полустепень исхода каждой вершины равна максимум единице (и полустепень захода каждой вершины равна единице, за исключением корня дерева), это список $1, 2, \dots, n - 1$, все эти числа различны, причем расстояние от корня до u равно $n - 1$ и эта вершина является единственной вершиной с полустепенью исхода, равной нулю. Если T это произвольное дерево, то возникают вершины, от которых до u нет маршрутов, что во-первых, уменьшает максимальное значение в рассматриваемом списке, а во вторых обнуляет некоторые элементы этого списка. Таким образом, сумма $\sum_{v \in V(T)} d^0(v, u)$ максимальна, когда T является искомым деревом. \square

Формулировку следующего утверждения можно найти в [8], в настоящей статье мы его доказываем несколько более строго.

Утверждение 2. *Максимальное значение индекса $W^0(G)$ для слабо связных ориентированных графов на n вершинах достигается графа \vec{C}_n .*

Доказательство. Пусть у нас есть произвольный ориентированный граф G на n вершинах. Рассмотрим произвольную вершину u в G и подграф G' , состоящий из кратчайших путей из u до всех остальных вершин в G . В этом подграфе вершина u имеет нулевую полустепень захода, полустепень захода остальных вершин не является нулевой. Допустим в G' есть вершина v , полустепень захода которой больше единицы. Это означает, что из u в v ведут несколько кратчайших путей одинаковой длины. Удалим входящие в v дуги, кроме одной. Получим, что v имеет полустепень захода, равную единице. Проведем эту операцию для всех вершин, у которых полустепень захода больше единицы.

В результате получим ориентированное дерево $T(u)$, которое задает кратчайшие пути из вершины u до других достижимых от нее вершин графа.

Можно заметить, что

$$W^0(G) = \sum_{u \in V(G)} \sum_{v \in V(G)} d^0(u, v) = \sum_{u \in V(G)} \sum_{v \in T(u)} d^0(u, v).$$

Таким образом, максимум достигается, если для каждого u дерево $T(u)$ во-первых, содержит n вершин, а во-вторых, по лемме 4 максимальная полустепень исхода каждой вершины равна единице. Графом, который одновременно удовлетворяет этим требованиям, является контур C_n . \square

В этом случае оценка сверху составляет

$$W^0(G) \leq \sum_{u \in V(C_n)} \sum_{i=1}^{n-1} i = \sum_{u \in V(C_n)} \frac{n(n-1)}{2} = \frac{n^2(n-1)}{2}.$$

Минимум индекса $W^0(G)$ достигается для слабо связного, не являющегося сильно связным, а максимум для сильно связного графа. Следующее утверждение отвечает на вопрос, для каких слабо связных (для которых не выполняется свойство сильной связности) графов достигается максимум $W^0(G)$.

Утверждение 3. *Максимальное значение индекса $W^0(G)$ достигается для слабо связного графа на n вершинах, не являющегося сильно связным, который представляет собой контур \vec{C}_{n-1} , куда либо заходит, либо откуда выходит дуга в оставшуюся n -ую вершину.*

Доказательство. Пусть нам дан слабо связный граф G_n на n вершинах. Поскольку этот граф не является сильно связным, то он состоит из сильно связных компонент, которые соединены дугами, причем эти дуги не должны принадлежать ни одному контуру. Рассмотрим наибольшую по размеру сильно связную компоненту G_m . С остальным графом эта компонента соединена дугами. Какие-то дуги ведут в G_m , какие-то из G_m . Если все дуги ведут в одном направлении, то больше ничего не делаем. Если же это не так, то для дуг, которые ведут из $u \in G_m$ в v добавим в граф дугу, которая ведет из v в u . Это увеличит индекс $W^0(G_n)$, поскольку в графе появляются новые пути, однако не происходит сокращения длин каких-то путей, так как из v в u до проведения дуги не существовало путей, иначе бы v входила в $V(G_m)$. После этой операции к G_m добавятся вершины. Будем пополнять G_m пока все дуги не будут вести в одном направлении в оставшуюся часть графа, которую мы будем обозначать G_{n-m} .

В том случае если между какими-то $u, v \in V(G_{n-m})$ не существует пути, то добавим дугу, ведущую из u в v . Это добавит пути в графе G , но не уменьшит какие-то из существовавших путей, поскольку для этого u и v должны лежать на каком-то из них. В результате проведенное действие увеличивает индекс $W^0(G_n)$. Будем продолжать такое добавление дуг пока это возможно.

В результате граф будет представлять собой две сильно связные компоненты, при этом дуги будут вести из одной компоненты в другую в одном направлении. Если таких дуг несколько, то мы можем удалить все, кроме одной. Это не разрушает пути в графе, поскольку эти дуги не влияют на пути внутри сильно связных компонент, а между ними остается путь через оставшуюся дугу. Это может увеличить какие-то из путей между сильно связными компонентами, что увеличивает индекс $W^0(G_n)$, который теперь состоит из двух сильно связных компонент, соединенных дугой. Обозначим их через G_k и G_{n-k} , и дуга пусть ведет из G_k в G_{n-k} . Тогда

$$W^0(G_n) = W^0(G_k) + W^0(G_{n-k}) + \sum_{\substack{u \in V(G_k) \\ v \in V(G_{n-k})}} d^0(u, v).$$

Можно заметить, что $W^0(G_k) \leq W^0(\vec{C}_k)$, $W^0(G_{n-k}) \leq W^0(\vec{C}_{n-k})$ и для всех $u \in V(G_k), v \in V(G_{n-k})$:

$$d^0(u, v) = d^0(u, x) + 1 + d^0(y, v),$$

где x и y — это концы дуги, соединяющей компоненты связности. При этом набор расстояний $d^0(u, x)$ и $d^0(y, v)$ максимален в том случае, когда $G_k = \vec{C}_k$ и $G_{n-k} = \vec{C}_{n-k}$. Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} W^0(G_n) &\leq W^0(\vec{C}_k) + W^0(\vec{C}_{n-k}) + \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{i=0}^{n-k-1} (j+1+i) = \\ &= \frac{k^2(k-1)}{2} + \frac{(n-k)^2(n-k-1)}{2} + \sum_{j=0}^{k-1} \left(j(n-k) + (n-k) + \frac{(n-k-1)(n-k)}{2} \right) = \\ &= \frac{k^2(k-1)}{2} + \frac{(n-k)^2(n-k-1)}{2} + \frac{(n-k)(k-1)k}{2} + (n-k)k + \frac{(n-k-1)(n-k)k}{2} = \\ &= \frac{k^2(k-1)}{2} + \frac{(n-k)^2(n-k-1)}{2} + \frac{(k-1+2+n-k-1)(n-k)k}{2} = \\ &= \frac{k^2(k-1)}{2} + \frac{(n-k)^2(n-k-1)}{2} + \frac{nk(n-k)}{2} = (n-1)k^2 - (n^2-n)k + \frac{n^3-n^2}{2} \rightarrow \max_{1 \leq k < n}. \end{aligned}$$

Функция $f(k) = (n-1)k^2 - (n^2-n)k + \frac{n^3-n^2}{2}$ является параболой с ветвями вверх. Тогда $f'(k) = 2(n-1)k - n(n-1)$, приравняем к нулю и получим, что $k = \frac{n}{2}$. То есть для описанного класса графов минимум достигается в середине исследуемого промежутка, соответственно максимум достигается

на краях, т. е. когда одна из компонент связности является вершиной, и туда либо ведет дуга, либо оттуда исходит дуга. \square

Перейдем теперь к рассмотрению оценок для индекса $W^N(G)$.

Утверждение 4. *Минимальное значение индекса $W^N(G)$ для слабо связанных ориентированных графов на n вершинах достигается для графов, у которых все вершины попарно соединены дугами.*

Доказательство. По определению, для любой пары вершин u, v справедливо, что $1 \leq d^N(u, v) \leq n$. Следовательно, в графах, где все вершины попарно соединены дугами, достигается минимальное значение индекса $W^N(G)$. Максимальное количество дуг в таком графе равно $n(n-1)$, следовательно для любого графа $n(n-1) \leq W^N(G)$. \square

Можно заметить, что минимальное значение индекса $W^N(G)$ достигается для слабо связанного ориентированного графа, который является сильно связным. Если мы будем рассматривать графы, не обладающие свойством сильной связности, то справедливо следующее утверждение.

Утверждение 5. *Минимальное значение индекса $W^N(G)$ для слабо связанных ориентированных графов на n вершинах, не обладающих свойством сильной связности, достигается для графов, где есть одна вершина, связанная одинаково ориентированными по отношению к ней дугами, инцидентными подграфу на $n-1$ вершине, которые попарно соединены дугами.*

Доказательство. Для того чтобы не выполнялось свойство сильной связности необходимо чтобы существовала пара вершин в графе, между которыми отсутствует путь. Следовательно граф состоит из множества сильно связанных подграфов, которые связывают дуги, причем эти дуги не должны принадлежать ни одному контуру.

Пусть исходный граф G_n на n вершинах состоит из двух сильно связанных компонент, между которыми есть произвольно направленные дуги. Пусть первая компонента G_k имеет размер k , тогда вторая компонента G_{n-k} имеет размер $n-k$. Тогда справедливо, что

$$W^N(G_n) = W^N(G_k) + W^N(G_{n-k}) + \sum_{\substack{u \in V(G_k) \\ v \in V(G_{n-k})}} (d^N(u, v) + d^N(v, u)).$$

Из утверждения 4 следует, что $W^N(G_k) \geq k(k-1)$, а $W^N(G_{n-k}) \geq (n-k)(n-k-1)$. Для любых $u \in V(G_k), v \in V(G_{n-k})$ справедливо, что $d^N(u, v) + d^N(v, u) \geq 1+n$, поскольку в какую-то сторону у нас путь отсутствует, и тогда расстояние между рассматриваемой парой вершин равно n (для определенности возьмем, что путь отсутствует из G_{n-k} в G_k), а в другую сторону он минимально может быть равен единице. Исходя из этого справедливо следующее:

$$W^N(G_n) \geq k(k-1) + (n-k)(n-k-1) + n(n-k)k + 1(n-k)k = (1-n)k^2 + (n^2-n)k + n^2 - n.$$

Это выражение минимально при $k=1$, либо $k=n-1$, что в обоих случаях приводит нас к искомому графу.

В том случае, когда исходный граф G_n состоит из m сильно связанных компонент, то можно заметить, что в совокупности $m-1$ компонента имеет значение индекса меньше, чем граф из утверждения 4, соответственно мы легко сводим этот случай к рассмотренному. \square

Из леммы 2 следует, что для идентификации графов, для которых достигается максимум $W^N(G)$ нам необходимо рассматривать слабо связанные графы, основной граф которых является деревом.

Если рассмотреть произвольные, не обязательно слабо связанные графы на n вершинах, то с очевидностью максимальное значение индекса $W^N(G)$ достигается для графов, у которых нет дуг.

В этом случае для каждой вершины u расстояние до любой другой вершины v равно n и фактически набор расстояний от u состоит из $n - 1$ элемента, равного n . В результате мы получаем, что индекс $W^N(G)$ для таких графов равен $n^2(n - 1)$.

Утверждение 6. *Максимальное значение индекса $W^N(G)$ для слабо связанных ориентированных графов на n вершинах достигается для звезд, у которых все дуги либо исходят из одной вершины, либо заходят в одну вершину.*

Доказательство. Согласно лемме 1 добавление дуги в граф G уменьшает индекс $W^N(G)$, причем если проводится дуга от вершины u к вершине v , то $d^N(u, v)$ становится равным единице и, возможно, уменьшаются некоторые другие расстояния между вершинами графа.

Рассмотрим ориентированный граф G , в котором отсутствуют дуги. Соответственно, для максимизации индекса $W^N(G)$ слабо связанного графа нам необходимо добавить в граф G $n - 1$ дугу таким образом, чтобы только одно расстояние становилось равным единице, а другие расстояния не изменялись. Выберем произвольную вершину u в графе и начнем добавлять исходящие дуги из этой вершины до остальных $n - 1$ вершины. Пусть на очередном шаге у нас появилась дуга из u в v . После этого расстояние $d^N(u, v)$ стало равно единице, однако расстояния до других вершин из вершины v не изменились, поскольку из v по построению не будет исходить ни одной дуги.

Построение слабо связанного графа было проведено таким образом, чтобы на каждом шаге минимально уменьшать значение индекса $W^N(G)$. Следовательно, после $n - 1$ шага мы получим граф, имеющий максимальное значение индекса $W^N(G)$. Для таких графов $W^N(G) = n(n - 1)^2 + (n - 1)$.

Аналогичные рассуждения можно провести при построении графа, где все дуги заходят в одну вершину. \square

Итак, для произвольного слабо связанного графа G на n вершинах выполняется

$$n(n - 1) \leq W^N(G) \leq n(n - 1)^2 + (n - 1).$$

Из вышесказанного можно сделать вывод, что индекс $W^N(G)$ характеризует слабо связанные графы несколько отличным от индекса $W^0(G)$ образом.

С одной стороны мы наблюдаем двойственность индексов: для одного и того же класса графов на n вершинах индекс $W^0(G)$ является минимальным, в то время как индекс $W^N(G)$ является максимальным. Следующей интересной точкой наблюдения являются ориентированные по кругу контуры \vec{C}_n . Это минимальные по количеству дуг сильно связанные графы, и здесь индекс $W^0(G)$ достигает максимума. Для сильно связанных графов индексы $W^0(G)$ и $W^N(G)$ совпадают. Если добавлять дуги в сильно связанный граф, то по лемме 1 индекс $W^N(G)$ будет уменьшаться, а вместе с ним и индекс $W^0(G)$. В результате мы приходим к классу графов, где все вершины попарно соединены дугами, для которого индекс $W^N(G)$ принимает глобальный минимум, а индекс $W^0(G)$ — локальный.

4. Экспериментальные исследования изменения индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$

Мы провели экспериментальные исследования для демонстрации как изменяются индексы $W^0(G)$ и $W^N(G)$ по мере случайного добавления ребер в слабо связанный граф. Как следует из предыдущего раздела, эти индексы различны для слабо связанных графов, которые не являются сильно связанными. Поэтому интересным является то, как будет изменяться первый или второй индекс по мере добавления дуг в граф. Общая схема экспериментов заключается в следующем:

1. Случайным образом генерируется слабо связанный граф.
2. В этот граф случайно добавляются дуги до тех пор, пока граф не станет сильно связанным.

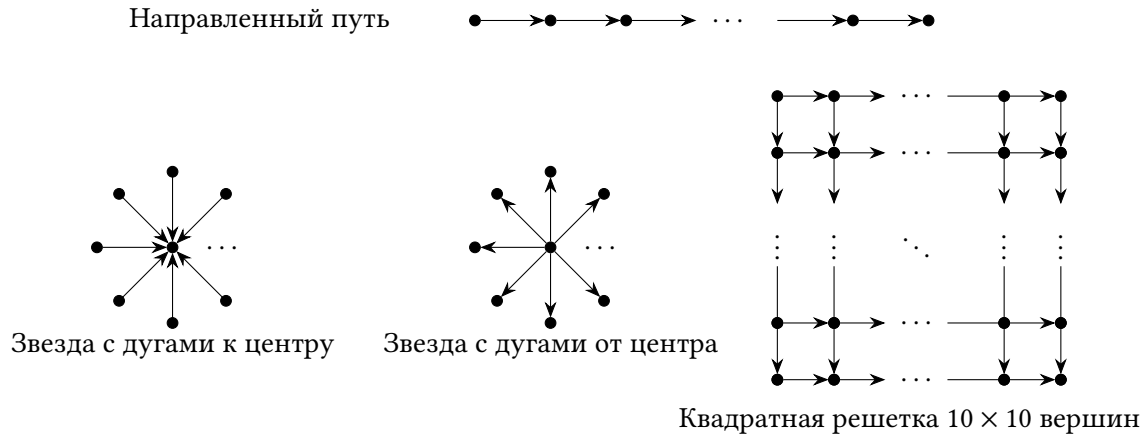


Fig. 1. Starting graphs with fixed structure

Рис. 1. Фиксированные стартовые графы

Генерирование случайных графов является сложной задачей (см. например [11]), требующей определения класса графов, которые будут генерироваться, а также процедуры, которая позволяет возвращать граф из этого класса с заданным распределением вероятностей. Мы отклоняемся от этой схемы и генерируем граф следующим образом:

1. Рассмотрим графы с количеством вершин $n = 100$. В начале в графе отсутствуют дуги.
2. Сгенерируем список, состоящий из всех A_n^2 дуг в лексикографическом порядке.
3. При помощи алгоритма [12, 13] получаем случайную перестановку списка дуг. Каждая перестановка возвращается равновероятным образом.
4. Добавляем в граф из получившейся перестановки дуги по порядку до тех пор, пока он не станет слабо связным. Назовем этот граф стартовым, поскольку с него начинается расчет индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$.
5. Продолжаем процесс добавления дуг до тех пор, пока не получим сильно связный граф. Получающиеся в рамках этого процесса графы будем называть промежуточными.

При проведении эксперимента мы не проверяем изоморфизм получившихся стартовых графов, поэтому вполне возможно, что какие-то из проанализированных графов являются изоморфными. Стоит также отметить, что из-за большого количества сгенерированных графов слишком трудно хранить матрицы смежности каждого графа для последующей проверки уникальности или изоморфизма. Вместо этого каждый граф идентифицируется по хэшу SHA-512 от строкового представления матрицы смежности графа.

В настоящей работе мы рассматриваем некоторые классы стартовых графов:

- случайный слабо связный граф представляет результат работы представленного алгоритма в чистом виде;
- направленный путь \vec{P}_n , а также рассматриваемые виды звезд и квадратная решетка изображены на рис. 1 и не предполагают случайного формирования стартового графа. Выбор в качестве одного из стартовых графов квадратной решетки обусловлен статьей [14], где рассматривается задача поиска максимальной ориентации для неориентированной квадратной решетки;
- случайная звезда получается путем случайной ориентации дуг звезды;
- случайная ориентация дерева представляет собой результат работы представленного алгоритма, с учетом модификации шага 4, которая при рассмотрении очередной дуги не добавляет в граф те из них, которые приводят к возникновению циклов в основном графе;
- при генерации случайной ориентации графа P_n мы добавляем дугу $(v_i v_{i+1})$ или $(v_{i+1} v_i)$ при условии отсутствия дуги, следующей в обратном направлении;

Table 1. Summary data on the studied graphs within the framework of the conducted experiments**Таблица 1.** Сводные данные по исследованным графам в рамках проведенных экспериментов

Стартовый граф	Кол-во уникальных стартовых графов	Кол-во повторных стартовых графов	Кол-во исследованных слабо связанных графов	Минимальное кол-во сгенерированных промежуточных графов для стартового графа	Среднее кол-во сгенерированных промежуточных графов для стартового графа	Максимальное кол-во сгенерированных промежуточных графов для стартового графа
Направленный путь	1	11 199	1 628 790	2	150	969
Случайная ориентация графа P_n	11 100	0	4 884 260	25	438	1 375
Случайная ориентация графа C_n	11 100	0	4 903 134	4	440	1 155
Звезда с дугами к центру	1	11 099	5 542 988	6	497	1 389
Звезда с дугами от центра	1	11 099	5 513 473	7	495	1 506
Случайная звезда	11 100	0	5 524 721	12	493	1 330
Случайная ориентация дерева	11 100	0	5 227 851	11	469	1 309
Квадратная решетка	1	11 149	1 641 593	1	153	1 203
Случайный слабо связный граф	11 150	0	3 495 362	1	312	1 226

- случайная ориентация графа C_n получается по тому же принципу, что и в предыдущем пункте, с учетом необходимости выбрать ориентацию дуги между первой и последней вершинами.

Статистика по исследованным графам приведена в таблице 1, а также на рис. 2. Мы видим, что распределение количества графов, которые необходимо построить до момента получения связного графа зависит от стартового графа.

На рис. 3 показаны результаты изменения индекса Винера по мере добавления дуг к стартовому графу в рамках проведенных экспериментов. На изображениях синим изображен индекс $W^0(G)$, а красным — индекс $W^N(G)$. На графиках изображены данные по всем экспериментам, чем более интенсивным цветом окрашена область на графике, тем в большем количестве экспериментов достигались значения из этой области. Для исследуемых графов из $n = 100$ вершин нижняя и верхняя границы индекса $W^0(G)$ равны 99 и 495 000 соответственно и показаны синим цветом. Верхняя граница индекса $W^0(G)$ для слабо связанных графов, не являющихся сильно связными, равна 490 099 (она близка к верхней границе для произвольных слабо связанных графов и на графиках не различима). Для индекса $W^N(G)$ нижняя и верхняя границы равны 9 900 и 980 199 соответственно и показаны красным цветом. Нижняя граница индекса $W^N(G)$ для слабо связанных графов, не являющихся сильно связными, равна 19 701 и отмечена линией из точек.

Приведенные графики позволяют сделать следующие выводы. Изменение индексов $W^0(G)$, и $W^N(G)$ по мере добавления дуг в граф не является полиномиальным и зависит от стартового графа. В целом на графиках видно что сначала происходит медленное убывание индекса $W^N(G)$, за которым следует резкое снижение значения этого индекса, а также резкий рост индекса $W^0(G)$, за которым следует его медленное убывание.

Есть стартовые графы, где изменения происходят похожим образом, например, случайная ориентация графа P_n , случайная ориентация графа C_n . Не слишком отличается характер изменений при рассмотрении случайной ориентации дерева (небольшие различия заметны в самом начале эксперимента, начальное значение индекса $W^0(G)$ несколько выше, чем у предыдущих графов). Действительно, эти графы либо принадлежат одному классу рассматриваемых графов, как ори-

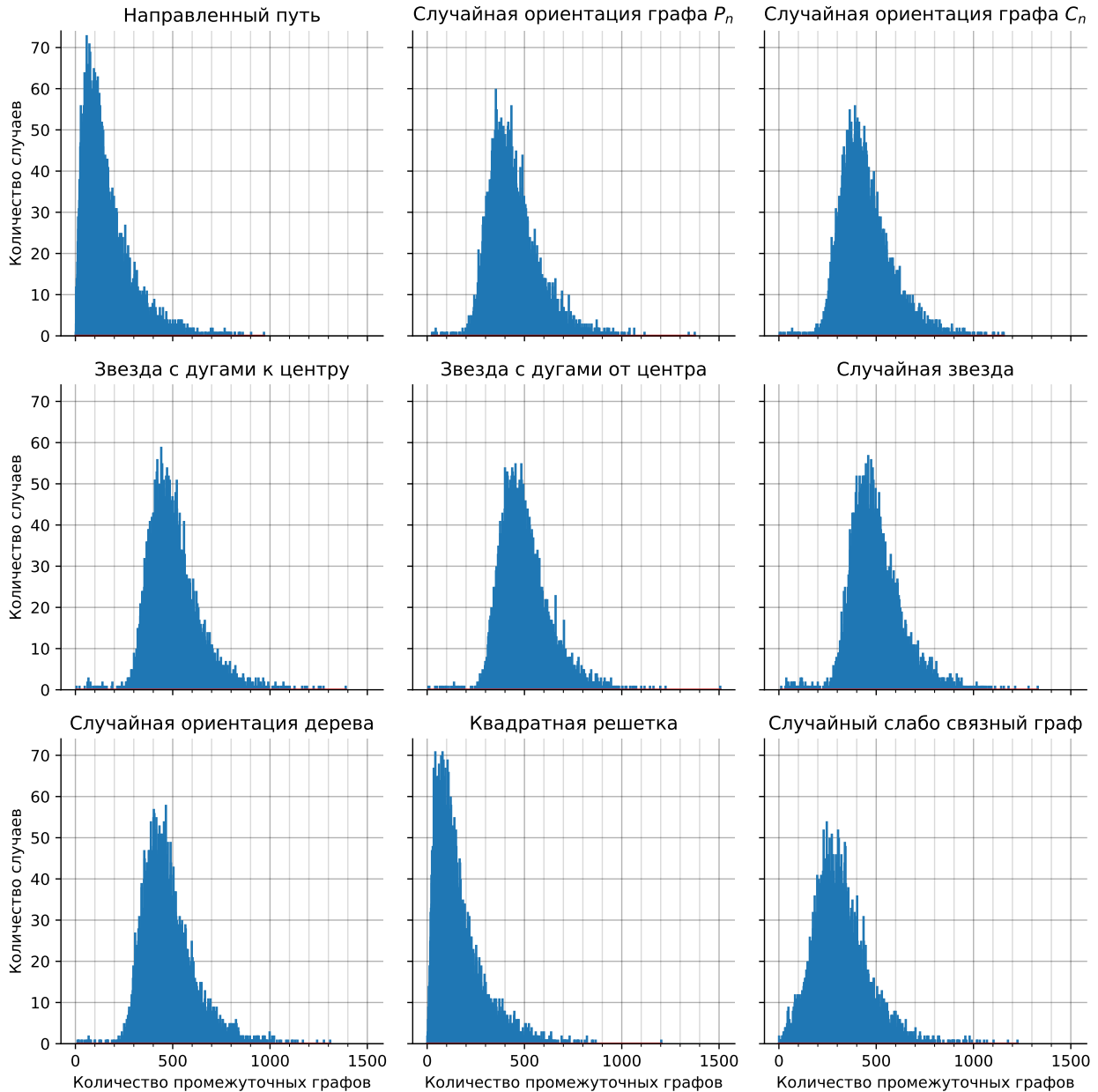


Fig. 2. Distributions of the number of constructed intermediate graphs from the starting graph to the strongly connected graph

Рис. 2. Распределения количества построенных промежуточных графов от стартового до сильно связанного графа

ентация P_n и случайная ориентация дерева, либо не слишком сильно отличаются друг от друга по структуре, как в случае ориентации графов P_n и C_n .

Похожи также изменения при добавлении дуг к тем звездам, которые в нашем эксперименте имеют фиксированную структуру. В том случае, если ориентация дуг графа выбирается случайным образом, это тоже может вести к изменениям. Это ярко видно на примере, когда ориентация дуг звезды выбирается случайным образом. Аналогичные выводы мы можем сделать, когда происходит переход от фиксированной ориентации графа P_n к случайной.

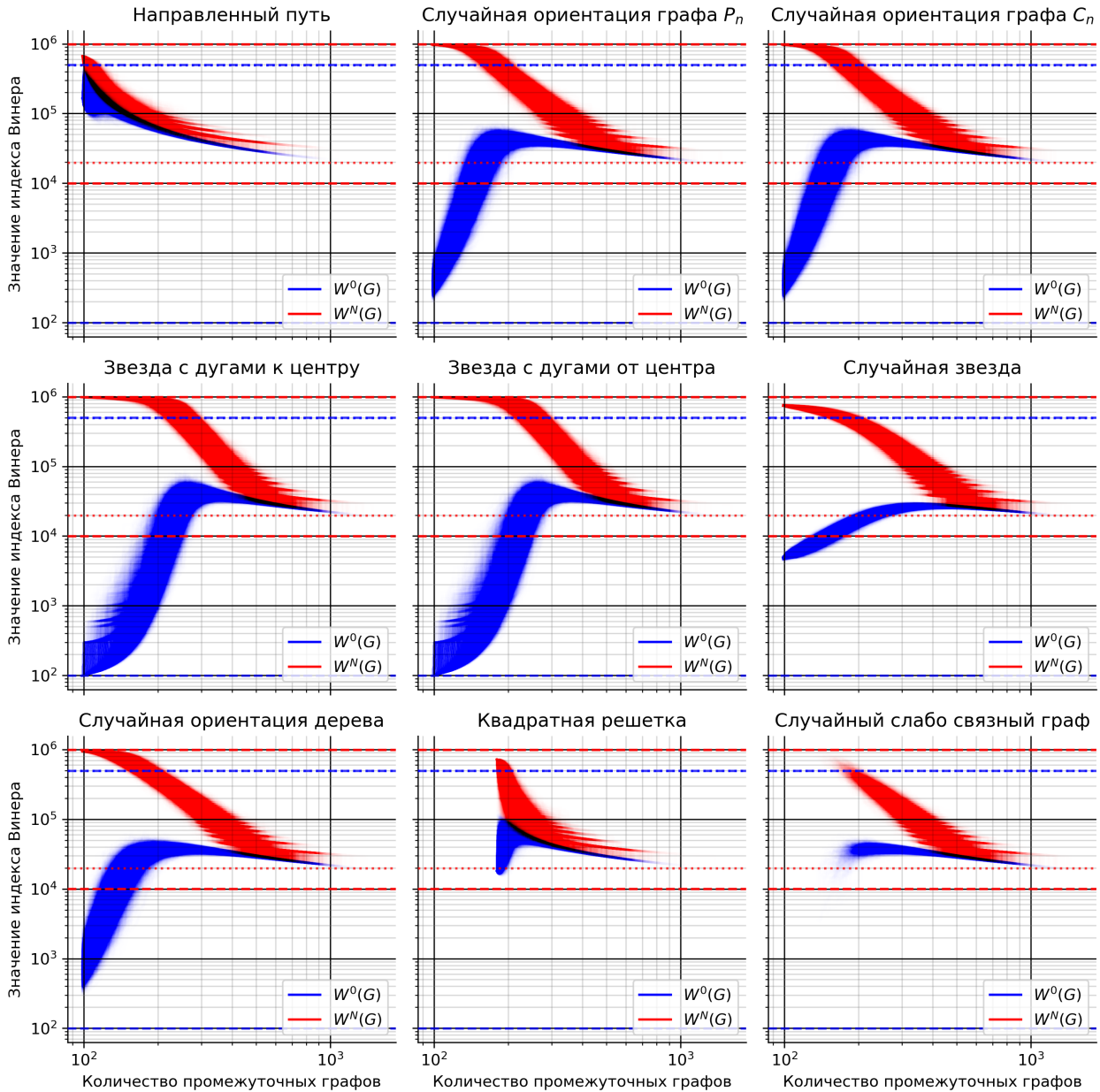


Fig. 3. Changes of the indices $W^0(G)$ and $W^N(G)$ for the considered weakly connected directed graphs

Рис. 3. Изменения индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$ для рассматриваемых слабо ориентированных графов

На всех правых частях графиков можно видеть «полосы» в визуализации изменения индекса $W^N(G)$. Это означает, что при развитии процесса добавления дуг мы приходим к разным подклассам графов с похожими значениями индекса $W^N(G)$, в которых при добавлении дуги лишь сокращаются длины существующих путей, однако добавление нескольких дуг делает граф сильно связным.

Далее можно видеть, что в своей эволюции некоторые графы с точки зрения индексов $W^0(G)$ и $W^N(G)$ становятся слабо отличимыми от случайного слабо связного графа. Правые части многих

графиков похожи на то как развивается процесс, если стартовый граф является случайным слабо связным графом.

Некоторые стартовые графы имеют свои особенности. Это наблюдается и в форме графиков для таких фиксированных стартовых графов как направленный путь и квадратная решетка. Некоторые особенности видны и в случае фиксированных звезд. В самом начале изменения индекса $W^0(G)$ мы видим несколько скачкообразных увеличений индекса, каждое из которых в дальнейшем постепенно увеличивается.

Заключение

В работе рассматривается индекс Винера для слабо ориентированных графов с уточнением расстояния между вершинами из [9], где $d(u, v) = |V(G)|$ при отсутствии пути из u в v . Показано, что такое уточнение наделяет индекс Винера другими свойствами, отличными от классического $d(u, v) = 0$. В статье приводится доказательство того, для каких графов индекс $W^N(G)$ принимает свои наибольшее и наименьшее значения. Интересным является тот факт, что индекс $W^N(G)$, в отличие от индекса $W^0(G)$, является монотонным.

Приводятся также результаты экспериментального анализа изменения индексов $W^N(G)$ и $W^0(G)$ для слабо связных ориентированных графов при случайном добавлении дуг в граф. Для этого выбраны несколько фиксированных, а также случайных графов, с которых начинается процесс добавления дуг, который приводит в конце концов к сильно связному графу, где выполняется $W^0(G) = W^N(G)$. В результате экспериментов установлено, что имеют место отличия в характере изменения индексов. В целом видно, что индексы изменяются неполиномиально и для некоторых графов характер изменений похож и имеет определенные особенности. Из всего этого можно сделать вывод, что изучение индекса Винера $W^N(G)$ для исследования топологических свойств графовых моделей может иметь практическую ценность.

References

- [1] H. Wiener, "Structural determination of paraffin boiling points", *Journal of American Chemical Society*, vol. 69, no. 1, pp. 17–20, 1947.
- [2] A. Dobrynin, R. Entringer, and I. Gutman, "Wiener index of trees: Theory and applications", *Acta Applicandae Mathematicae*, vol. 66, pp. 211–249, 2001. doi: [10.1023/a:1010767517079](https://doi.org/10.1023/a:1010767517079).
- [3] F. Harary, "Status and contrastatus", *Sociometry*, vol. 22, no. 1, pp. 23–43, 1959.
- [4] C. Ng and H. Teh, "On finite graphs of diameter 2", *Nanta Math*, vol. 1, pp. 72–75, 1966/67.
- [5] M. Knor, R. Škrekovski, and A. Tepoh, "Some remarks on Wiener index of oriented graphs", *Applied Mathematics and Computation*, vol. 273, pp. 631–636, 2016. doi: [10.1016/j.amc.2015.10.033](https://doi.org/10.1016/j.amc.2015.10.033).
- [6] M. Knor, R. Škrekovski, and A. Tepoh, "Orientations of graphs with maximum Wiener index", *Discrete Applied Mathematics*, vol. 211, pp. 121–129, 2016. doi: [10.1016/j.dam.2016.04.015](https://doi.org/10.1016/j.dam.2016.04.015).
- [7] P. Dankelmann, "On the Wiener index of orientations of graphs", *Discrete Applied Mathematics*, vol. 336, pp. 125–131, 2023. doi: [10.1016/j.dam.2023.04.004](https://doi.org/10.1016/j.dam.2023.04.004).
- [8] M. Knor, R. Škrekovski, and T. A., "Digraphs with large maximum Wiener index", *Applied Mathematics and Computation*, vol. 284, pp. 260–267, 2016. doi: [10.1016/j.amc.2016.03.007](https://doi.org/10.1016/j.amc.2016.03.007).
- [9] R. Botafogo, E. Rivlin, and B. Shneiderman, "Structural analysis of hypertexts: Identifying hierarchies and useful metrics", *ACM Transactions on Information Systems*, vol. 10, no. 2, pp. 142–180, 1992. doi: [10.1145/146802.146826](https://doi.org/10.1145/146802.146826).
- [10] D. West, *Introduction to Graph Theory*, Second Edition. Pearson Education, 2001.

- [11] C. Greenhill, “Generating graphs randomly”, in (London Mathematical Society Lecture Note Series), K. Dabrowski, M. Gadouleau, N. Georgiou, M. Johnson, G. Mertzios, and D. Paulusma, Eds., London Mathematical Society Lecture Note Series. Cambridge University Press, 2021, pp. 133–186.
- [12] R. Durstenfeld, “Algorithm 235: Random permutation”, *Communications of ACM*, vol. 7, no. 7, p. 420, 1964. DOI: [10.1145/364520.364540](https://doi.org/10.1145/364520.364540).
- [13] D. Knuth, *The Art of Computer Programming: Seminumerical Algorithms*, 3rd ed. Addison-Wesley, 1998, vol. 2.
- [14] M. Knor and R. Skrekovski, “On maximum Wiener index of directed grids”, *The Art of Discrete and Applied Mathematics*, vol. 6, no. 3, #P3.02, 2023. DOI: [10.26493/2590-9770.1526.2b3](https://doi.org/10.26493/2590-9770.1526.2b3).