dr hab. Monika Pilśniak
Wydział Matematyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

# Recenzja rozprawy doktorskiej Katarzyny Broniszewskiej „Indeksy topologiczne w teorii grafów"

## 1. Tematyka

Problematyka pracy związana jest z tzw. chemiczną teorią grafów. W dziedzinie tej indeks topologiczny jest rodzajem deskryptora molekularnego obliczanego na podstawie grafu molekularnego modelującego związek chemiczny. Wskaźniki topologiczne są z jednej strony parametrami liczbowymi grafu, które charakteryzują jego topologię i zazwyczaj są jego niezmiennikami, z drugiej zaś strony są stosowane w badaniu ilościowych zależności struktura-aktywność, w których aktywność biologiczna lub inne właściwości cząsteczek są skorelowane z ich strukturą chemiczną. Cząsteczki chemiczne modelował grafami już Cayley. To on zauważył ich drzewiastą strukturę i związki z pewnymi właściwościami chemicznymi i fizycznymi. W 1947 r. H. Wiener zaproponował liczenie sumy wszystkich odległości w grafie modelującym molekularną strukturę. Opisał on związek tej liczby z temperaturą wrzenia odpowiedniego związku chemicznego.

Tematyka rozprawy dotyka trzech indeksów topologicznych, które są modyfikacjami indeksu Wienera. W pierwszym przypadku badany jest uogólniony biegunowy indeks Wienera $W_k(G)$ grafu $G$, czyli liczba nieuporządkowanych par wierzchołków w odległości $k$. W drugim przypadku rozważane są już bardziej czułe indeksy, w które ingeruje odchylenie (acentryczność) wierzchołka $\varepsilon(v)$ (czyli największa odległość od $v$), suma wszystkich odległości od tego wierzchołka $D(v)$ oraz liczba jego wszystkich wierzchołków sąsiednich



MP

deg$(v)$. Mianowicie rozważany jest indeks AEDS, jako suma

$$\sum_{v \in V(G)} \frac{\varepsilon(v) D(v)}{\deg(v)},$$

oraz indeks EDS jako suma

$$\sum_{v \in V(G)} \varepsilon(v) D(v).$$

Zdefiniowawszy nowy indeks, pytamy zwykle o wartości tego indeksu dla drzew albo innych, podobnych struktur. W tym kontekście ciekawym kierunkiem wydaje się badanie wartości indeksów topologicznych dla $t$-drzew czy kaktusów. Badania teoretyczne rozwijają się ostatnio również z dużą intensywnością dla innych klas grafów, takich jak grafy kubiczne, grafy wierzchołkowo przechodnie, grafy bez trójkątów, czy grafy bez cykli. Dowodzi się nierówności typu Nordhausa-Gadduma, czy ogólnych ograniczeń dolnych i górnych dla poszczególnych indeksów. Każdego roku w czołowych czasopismach matematyki dyskretnej ukazuje się kilka prac z najnowszymi wynikami dotyczącymi omawianych indeksów.

Tematyka rozprawy jest zatem ważna, aktualna, ciągle rozwijana i może stanowić dobrą motywację do oryginalnych badań.

## 2. Wyniki

Omówienie zawartości pracy pani Katarzyny Broniszewskiej muszę zacząć od pierwszego rozdziału, który – jak twierdzi Doktorantka – „zawiera podstawowe definicje wykorzystywane w pracy". Otóż niestety zdecydowanie nie wszystkie, brakuje definicji krawędzi przyległych, podgrafu, drzewa i wielu innych (warto może byłoby powołać się na jakiś podrecznik, gdzie czytelnik mógłby znaleźć te pominięte, choć lepiej, żeby znalazły się wszystkie potrzebne w rozprawie). Ponadto definicje powinny być postawione precyzyjnie i niesprzecznie. A tu graf ma z definicji jeden zbiór wierzchołków, tymczasem graf dwudzielny ma w def.1.1.10 dwa zbiory wierzchołków. W innym miejscu przy definicji złączenia dwóch grafów pada ogólnikowe stwierdzenie „przy zachowaniu wewnętrznej budowy"...



MR

Jednak co ważniejsze, niektóre z tych definicji, które się pojawiają, są wprowadzone w niestandardowy sposób, jak definicja ścieżki czy cyklu. Teoretycznie matematyk może pod danym pojęciem zdefiniować co chce, byleby potem konsekwentnie używał tego w budowanej teorii. Pani Broniszewska jednak powołuje się w dalszej części rozprawy na prace, w których autorzy posługują się standardową definicją ścieżki, cyklu, czy kaktusa (por. str. 13). Co więcej, twierdzenia, których współautorem jest pani Broniszewska, bywają nieprawdziwe lub trywialne z tak przyjętymi definicjami jak w rozdziale pierwszym.

W dalszej części recenzji omówię więc wyniki Doktorantki, przyjmując definicje ogólnie znane (np. R. Diestel, *Graph Theory*, Springer-Verlag, 2010) i zgodne ze stosowanymi w cytowanych w rozprawie pracach innych autorów.

W rozdziale drugim w przypadku uogólnionego biegunowego indeksu Wienera $W_k(G)$ Autorka rozważa klasę grafów zwanych $t$-drzewami, jednak tylko dla $t = 2$ i z pominięciem zbadania przypadku $k = 2$ i $k = 3$. Twierdzenie 2.4.10 dotyczy istnienia 2-drzewa z „ekstremalną", tzn. maksymalną?, wartością uogólnionego biegunowego indeksu Wienera $W_k(G)$ dla dowolnego parzystego $k \geqslant 4$. Jest to jedyne twierdzenie współautorstwa Doktorantki w tym rozdziale. Dowód jest konstrukcyjny, jednak jego przedstawienie przypomina notatki z roboczego spotkania. Przed sformułowaniem twierdzenia 2.4.10. przez kolejne trzy strony prezentowane są przeróżne przeliczenia w różnych przypadkach. Brakuje jednak komentarzy i oddzielenia przypadków. Jest to tym bardziej ważne, że wyprowadzone są pewne zależności, które wydają się być istotną częścią dowodu. Samo sformułowanie twierdzenia 2.4.10. pozostawia wiele do życzenia – nie stanowi ono całości, ponieważ nie są określone parametry $p_-$, $p_+$ ani funkcja $g(k)$ (może niepotrzebnie są w ogóle wspominane). To co następuje po sformułowaniu twierdzenia, trudno nazwać dowodem, raz z przyczyn wspomnianych powyżej (gdy istotna, zdaje się, część dowodu została wyłaczona przed twierdzenie), a po wtóre – jedyne rozumowanie dowodowe jest sformułowane stosunkowo luźno, bez niezbędnej w pracach matematycznych precyzji. Np. pada stwierdzenie: „poprzez rozwiązanie tych nierówności (czysto analitycznych – przyp. recenzenta) możemy skonstruować dwudrzewo". Rozwiązaniem nierówności może być przedział, a nie graf...

Początkowe 12 stron rozdziału drugiego to obszerne wprowadzenie w badania dotyczące indeksu Wienera i jego różnorakich modyfikacji. Dobór tych wyników trochę dziwi i momentami wydaje się chaotyczny – niektóre twierdzenia powtarzają się (szczegóły wskazuję w rozdziale 3), a nic nie wiemy o najnowszych osiągnięciach tak, jakby badania w tej dziedzinie skończyły się w roku 2011 i jedynie w ostatnich latach pojawił się uogólniony indeks Wienera. Tymczasem jak już wspomniałam w rozdziale 1, dziedzina tzw. chemicznej teorii grafów bardzo dynamicznie rozwija sie w wielu kierunkach.

W rozdziale trzecim Autorka rozważa dwa indeksy AEDS i EDS. Dla pierwszego z nich Doktorantka jest współautorką ograniczeń dolnych i górnych, które poprawiają wyniki Hua i Yu, wnikając bardziej w strukturę grafu i istotnie wykorzystując liczbę wierzchołków o acentryczności 2 oraz maksymalny i minimalny stopień wierzchołków z większą acentrycznością (twierdzenia 3.1.4, 3.1.5 i 3.1.6.). Ich dowody są stosunkowo prostym zastosowaniem definicji i oznaczeń, oraz wynikiem prostych rachunkowych przekształceń. Zaskakuje jednocześnie formułowanie banalnych, niemal natychmiastowych wniosków z tych twierdzeń w formie lematów (por. lemat 3.1.1. – 3.1.5.). Mimo to Autorka sili się na prowadzenie „dowodów".

Przez kolejne pięć stron poznajemy znane z literatury dokładne wartości (i ich szacowania) indeksu AEDS względem innych parametrów grafowych. Jednak w tym kierunku Doktorantka nie prowadzi badań. Za to w następnym podrozdziale przedstawia specyficzną konstrukcję dla bardzo szczególnej klasy grafów. Brakuje tu ewidentnie motywacji rozważania tak wyjątkowych grafów, zwanych połączeniem $H$ i gwiazdy, i ich indeksu AEDS. Ewentualne zastosowania chemiczne mogłyby tłumaczyć tak nietypowe badania. Nie wiemy, czy pożądane są duże, czy małe wartości badanego indeksu. W tym kontekście twierdzenie 3.1.15, pokazujące malejącą tendencję wartości indeksu AEDS w przypadku tej specyficznej transformacji ściągania krawędzi w bardzo wąskiej klasie grafów, nie wydaje się ciekawym wynikiem. Podobnie jak w przypadku twierdzenia 2.4.10, pierwsza część dowodu została wyizolowana wcześniej bez jakiegokolwiek komentarza. Cały dowód jest konsekwencją prowadzonych prostych przekształceń i rachunków.

W podrozdziale 3.2 omawiany jest indeks EDS. Autorka zgrabnie przytoczyła znane wyniki dla drzew, grafów unicyklicznych i grafów powstałych z $\delta$-transformacji. Następnie powtarzając metody dowodu Hua, Xu i Wena, prezentuje swój współautorski wynik dla delikatnie uogólnionych kaktusów (twierdzenie 3.2.9). Lemat 3.2.2 jest natychmiastowym wnioskiem niewymagającym formułowania. Natomiast twierdzenie 3.2.10 określać ma dolne ograniczenie indeksu EDS dla klasy grafów dość specyficznie wcześniej zdefiniowanych. Jednak z drugiej części twierdzenia i z dowodu wynika, że nie jest to dolne ograniczenie a wartość dokładna.

MB

**Podsumowanie**

Wszystkie opublikowane prace Doktorantki są współautorskie (poz. 5-8 w spisie literatury). Prezentowane wyniki nie należą niestety do wybitnych osiągnięć w poruszanej tematyce. Doktorantka nie cytuje prawie w ogóle bieżących wyników z ostatnich lat (jak pisałam w rozdziale pierwszym, w każdym z poruszanych tematów pojawia się rokrocznie kilka artykułów w najlepszych czasopismach matematycznych), ani też osiągniete wyniki nie wpisują się w bieżące badania w tym temacie. Wspomniane rezultaty odbiegają znacznie ogólnością rozważań i metodami stosowanymi w tej dziedzinie.

Praca sprawia wrażenie spisanej pośpiesznie, czasem bardziej skrótowo niż w opublikowanych artykułach (np. na rys. 2.5. brakuje podpisów grafów). Ewidentnie brakuje komentarzy wiążacych kolejno prezentowane twierdzenia, lematy, konstrukcje i zasadność ich kolejności, czy wręcz potrzebę ich podawania. Brak narracji powoduje podejrzenia, że Doktorantka nie wie, jak wyglada formalnie poprawnie przeprowadzony dowód - spośród pięciu głównych twierdzeń współautorstwa pani Broniszewskiej żaden dowód nie jest przedstawiony z precyzyjną dokładnością dedukcji od założeń do tezy, czego oczekuje się od dowodu matematycznego. Przed dowodem twierdzenia 2.4.10 oraz twierdzenia 3.1.15 znajduje sie rozważanie mnóstwa przypadków, nieopatrzonych zresztą żadnym komentarzem, ani nawet nowe wątki nie są oddzielone akapitami, z których potem nagle wynikają podobno tezy odpowiednich twierdzeń.

Z jednej strony praca zawiera zbyt długie wtręty historyczne, z których nie korzysta się w dalszych rozważaniach, ani nie uogólnia ich. Nie mają one bowiem zwiazku z wynikami Doktorantki, a z drugiej strony ewidentnie brakuje narracji i przemyślanych przykładów potwierdzających orientację Doktorantki w temacie badawczym i świadomego prowadzenia pracy naukowej.

Na podstawie ocenianej pracy nie mogę stwierdzić, że Doktorantka wykazuje ogólną wiedzę teoretyczną z teorii grafów. Zakładam, że ją posiada, ale nie umiała jej jasno zapisać. Wydaje się jednak, że kandydat do stopnia naukowego z matematyki powinien umieć precyzyjnie i jedoznacznie zdefiniować pojęcia oraz prezentować formę dowodów, która potwierdzałaby, że umie przeprowadzić poprawne i spójne wnioskowanie przyczynowo-skutkowe.

W związku z tym muszę wnioskować o poprawę pracy.

## 3. Szczegółowe uwagi techniczne i językowe

- W żadnym miejscu nie są badane obiekty nieprzeliczalne. Zatem za każdym razem zamiast „ilość" powinno być „liczba" (wierzchołków, krawędzi, grup, przykładów itd.).
- Dobrym zwyczajem jest nie zaczynać zdania od symbolu (por. definicja 1.1.1.)
- Sporo jest błędów interpunkcyjnych – język polski wymaga przecinków w wielu miejscach, w których nie zostały użyte (począwszy od streszczenia).
- Nie brakuje też literówek (począwszy od streszczenia).
- Miejscami szwankuje styl, np. „wykształca się klasa indeksów" (str. 4), „rozszerzeń do indeksu Wienera" (str. 12), powtórzenia (str. 13).
- Osobna numeracja definicji, osobna twierdzeń i osobna lematów bardzo utrudnia znajdowanie szukanych wyników.
- We wstępie, podobnie jak w dalszej części pracy, brakuje informacji co jest głównym wynikiem poszczególnych rozdziałów i które wyniki są dziełem Doktorantki. W rozdziale drugim, jak i w trzecim, motywacja i wyniki historyczne nie są oddzielone od rozważań Autorki narracją (str. 22, 32), co bardzo utrudnia czytanie. Nie wiemy też, czemu akurat taki jest zaproponowany dobór wyników historycznych, w szczególności z pominięciem tych najnowszych.
- Przy niektórych definicjach, tak kluczowych jak definicje 2.4.2. i 3.1.1., brakuje nazwisk autorów i roku wprowadzenia. To samo dotyczy wszystkich twierdzeń i lematów, które są co najwyżej opatrzone numerem z bibliografii.
- Niewygodna prezentacja definicji podstawowych. Lepiej przedstawia się definicje w jednolitym tekście wytłuszczając słowa definiowane.
- Nie znajduję uzasadnienia stosowania anglicyzmów (komponent, graf separowalny, tranzytywny, produkt grafów...). W języku polskim mamy odpowiedniki tych pojęć i dobrze byłoby, żeby kandydat na doktora

nauk matematycznych je znał. Dla przykładu: kolorowanie (nie pokolorowanie) nazywamy właściwym, a nie legalnym czy dozwolonym. Nie ma też potrzeby tłumaczenia na angielski polskich nazw skoro praca jest pisana po polsku – wystarczy je porządnie zdefiniować.

- Czytelność rysunków: brakuje litery $G$ w pętli na rys. 2.1. i 2.2. (bez tego wydaje się, że w wierzchołku $w$ mamy pętlę albo cykl); brakuje nazw grafów na rys. 2.5.
- Niedopuszczalna jest redakcja twierdzeń, w których znaczną część zajmują definicje (por. 2.3.1., 2.3.2., 3.1.1).
- Rysunki 2.2. i 3.7 przedstawiają ten sam graf co rysunek 2.1. Autorka jednak w tekście niesłusznie zauważa między nimi różnice.
- Twierdzenie 2.4.1. i 2.4.2. to ten sam wynik, podobnie twierdzenia 2.4.3. i 2.4.4. - należałoby ujednolicić oznaczenia.
- Rodzina $T_{n,k}$ jest definiowana dwukrotnie na str. 17 i 18.
- Przez dodanie krawędzi do drzewa powstaje graf unicykliczny, a nie drzewo (por. lemat 2.4.2.)
- W lemacie 2.4.2. $x$ jest wierzchołkiem, wiec nie można pisać $x \in T$, gdy $T$ jest grafem.
- Konstrukcja drzewa $T(r, t)$ na str. 19 jest nieprecyzyjna.
- Długość najkrótszego cyklu w grafie to talia. Obwód to długość najdłuższego cyklu w grafie – definicja 2.4.1.
- Interpunkcja matematyczna w definicji $W_k(G)$ na str. 21 jest niepoprawna.
- W omawianiu $W_2(T)$ na str. 21 błędnie występuje oznaczenie $G$ w indeksie zagrzebskim (a nie indeksie Zagreb).
- Wartość $W_3(T)$ otrzymana na str. 22 jest natychmiastowym wnioskiem z tw. 2.4.6. Wystarczyłby tylko komentarz.
- Następny komentarz (przed wprowadzeniem uogólnienia indeksu zagrzebskiego) jest oczywisty i prawdziwy dla wszystkich grafów, nie tylko dla drzew.

- Sformułowanie „wartość indeksu może się zmieniać w górę albo w dół" (str. 23) można stosować w notatkach jedynie. Kilka wierszy wcześniej napisano, że rozpatrywany indeks może się jedynie zwiększać w czasie proponowanej transformacji, co jest nieprawdą - por. przykład na rysunku 2.5.
- Przyjmując oznaczenia ze stron 23–24 i rozważając lewy graf w środkowym rzędzie z rys. 2.5, mamy $p = 3$, $k = 4$, $n = 12$ i nierówność (2.6) ani poprzedzające je równanie są prawdziwe...
- Nagle od strony 25 Autorka rozważa wartości „ekstremalne" (maksymalne, minimalne?). W celu ich wyznaczenia różniczkuje funkcję $f$, bada miejsca zerowe pochodnej, ale nie analizuje brzegu dziedziny.
- Oznaczenia parametrów mające więcej niż jedną literę nie piszemy kursywą, np. max, deg, a nie $max, deg$ (por. str.33).
- Str. 35: z Twierdzenia 3.1.4. $\longrightarrow$ z twierdzenia 3.1.4.; analogicznie na str. 53.
- Str. 35: 6-tej $\longrightarrow$ szóstej.
- Sformułowanie warunku jako „poza" w definicji $\eta$ na str. 44 jest nieeleganckie i niedopuszczalne.
- Podając dwie alternatywne defnicje, jak np. w definicji 3.2.1., należy pokazać ich równoważność.
- W twierdzeniu 3.2.8 definiowany jest graf (zamiast przed twierdzeniem) tak nieprecyzyjnie, że nie wiadomo jak on wygląda. Co ma znaczyć „dołączenie niezależnych krawędzi wzdłuż wierzchołków"?
- Przypadek 2. w dowodzie tw. 3.2.10: korzysta się z lematu 3.2.1. bez sprawdzenia założeń. Po czym wykonuje się obliczenia niczym nieuzasadnione i wnioskuje, że to kończy dowód. Wypadałoby prezentować taką formę dowodów, która nie budziłaby wątpliwości, czy Doktorantka umie przeprowadzić poprawne, precyzyjne i spójne wnioskowanie przyczynowo-skutkowe.
- Dwa ostatnie zdania na str. 58: Jak indeks może porządkować klasę grafów?



MW

- W zakończeniu warto byłoby omówić problemy otwarte, dalsze kierunki badań, albo chociaż podać konkrety (nie „pewne rezultaty dla pewnych innych klas grafów"), czy postawiony cel pracy został osiągnięty i w jaki sposób.

- Spis literatury zawiera pozycje w różnych formatach.

## 4. Konkluzja

Podsumowując, nie jestem w stanie dopuścić pani mgr Katarzyny Broniszewskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Uważam, że w przedstawionej mi do oceny formie praca nie spełnia ustawowych wymogów stawianych rozprawom doktorskim. Oczekuję, że rozprawa zostanie poprawiona co najmniej pod wzgledem formalnym – zostaną poprawnie i precyzyjnie sformułowane definicje i twierdzenia oraz jasno przedstawione rozumowania pozwalające śledzić dowód. Zdecydowanie ocenę podniósłby choćby jeden istotny wynik wpisujący się w nurt aktualnych badań w poruszanej tematyce.

Monika Pilśniak

Monika Pilśniak

Kraków, 3 czerwca 2019 r.