

ДИСТАНЦИЯ ГРАФОВ КАТА-КОНДЕНСИРОВАННЫХ  
ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ  
ПРИ ИХ ПРЕОБРАЗОВАНИЯХ

А. А. Добрынин

Метрические характеристики молекулярных графов в виде топологических индексов широко используются при исследовании зависимостей типа "структура-свойство" [1]. Одним из известных топологических индексов является число Винера, которому в теории графов соответствует дистанция графа. Значения числа Винера хорошо коррелируют со многими физико-химическими свойствами классов соединений в органической химии. В [2-6] рассматривалось поведение числа Винера при структурных преобразованиях полициклических систем, характерных для спиро-, ката- и периконденсированных соединений, полициклических соединений с ациклическими ветвями, мостиковых полициклических соединений. Для большого числа соединений конкретного вида из этих классов и их преобразований сформулированы топологические правила для оценки значений числа Винера. В [7] в общем виде изучались дистанция графов, образованных из пары графов отождествлением единственных вершин, и изменение дистанции при преобразованиях графов. В [8] определены дистанция графа при отождествлении его ребра с ребром простого цикла произвольного четного порядка, изменение дистанции графов при изменении положения присоединения и порядка цикла. В [9] с общих позиций рассмотрена ди-

станция графов, образующихся отождествлением вершин некоторого подграфа в семействе графов, подробно изучены операции отождествления вершины и ребра, обсуждается операция отождествления простой цепи графов. Также рассмотрены такие операции, как соединение ребром двух графов, добавление ребра в графе и разбиение ребра новой вершиной. В настоящей работе изучается изменение дистанции при преобразовании графов одного класса гексагональных полициклических систем, примером которых являются молекулярные графы ката-конденсированных бензоидных углеводородов.

### 1. Определения и обозначения

Рассматриваются конечные неориентированные связные графы  $G(V, X)$  без петель и кратных ребер,  $V(G)$  - множество вершин графа,  $X(G)$  - множество ребер графа,  $|V(G)| = p_G$  - порядок графа. Пусть  $G$  является плоским топологическим графом. Гранью  $G$  называется область плоскости, ограниченная ребрами и не содержащая внутри себя ни вершин, ни ребер. Считаем, что все грани  $G$  являются шестиугольными и две произвольные грани в  $G$  либо являются смежными, т.е. имеют единственное общее ребро, либо не имеют общих вершин. Такому графу  $G$  поставим в соответствие его характеристический граф, отличающийся от двойственного к  $G$  графа только тем, что не содержит вершины, соответствующей бесконечной грани на плоскости вместе со всеми инцидентными ей ребрами. Граф  $G$  будем называть  $k$ -графом, если его характеристический граф является деревом. Другими словами, в  $k$ -графах не существует вершины, общей для трех и более граней. В [10] под  $k$ -графами понимаются ката- и пери-конденсированные бензоидные графы, вложимые в гексагональную решетку на плоскости. Граф  $G$  на рис. 1 является  $k$ -графом, а граф  $H$  не принадлежит множеству

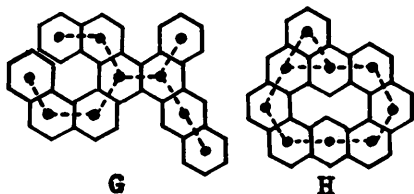


Рис. 1

$k$ -графов. Для  $G$  и  $H$  пунктиром изображены их характеристические графы. Из определения следует, что  $k$ -графы являются двудольными графами и все вершины имеют степень, равную 2 или 3. Грани графа

$G$  вместе с их границей будем называть кольцами графа. Кольца графа  $G$ , имеющие три ребра, инцидентных только вершинам степени 2, назовем концевыми. В любом  $k$ -графе существует не менее двух концевых колец. Если  $n$  - число вершин степени три в характеристическом графе, то  $k$ -граф имеет  $n + 2$  концевых колец. Операцией присоединения двух  $k$ -графов  $G$  и  $H$  назовем отождествление пары ребер  $(u, u_1) \in X(G)$  и  $(v, v_1) \in X(H)$ , инцидентных вершинам степени 2. Для графа  $L$ , являющегося результатом операции присоединения, используем запись  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$ , где вершины ребер, указанные первыми, отождествляются друг с другом. Граф  $L$  на рис. 2 образован операцией

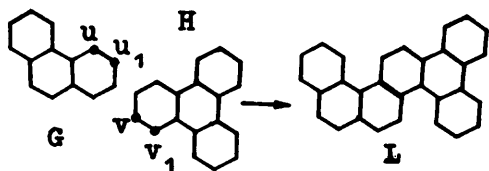


Рис. 2

присоединения двух  $k$ -графов. Из определения следует, что операция присоединения  $k$ -графов является замкнутой в классе  $k$ -графов, т.е. получаю-

щийся граф будет всегда принадлежать множеству  $k$ -графов. Пусть  $u, v \in V(G)$ , тогда обозначим  $d_G(u, v)$  расстояние между вершинами  $u$  и  $v$ , равное числу ребер в

кратчайшей простой цепи, соединяющей вершины  $u$  и  $v$ . Для вершины  $v \in V(G)$  и подграфа  $H \subseteq G$  определим следующие метрические характеристики: дистанция вершины  $v$  в графе  $G$

$$D_G(v) = \sum_{u \in V(G)} d_G(v, u), \text{ дистанция подграфа } H$$

$$\text{в графе } G \quad D_G(H) = \sum_{v \in V(H)} D_G(v), \text{ дистанция графа } G$$

$$D(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} D_G(v). \text{ Если ясно, в каком графе рассматрива}$$

ются расстояния, то обозначение графа не указывается. Далее рассматривается изменение значения дистанции  $k$ -графов, образованных из пары заданных  $k$ -графов  $G$  и  $H$ , при некоторых структурных преобразованиях.

Пусть граф  $L$  образован операцией присоединения  $k$ -графов  $G$  и  $H$ ,  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$ . Рассмотрим преобразование  $\phi$  графа  $L$  такое, что  $\phi(L) = (G, H, (u_2, u_3), (v_2, v_3))$  и  $L \neq \phi(L)$ . Требуется определить изменения дистанции графа  $L$  при осуществлении преобразования  $\phi$ , т.е.

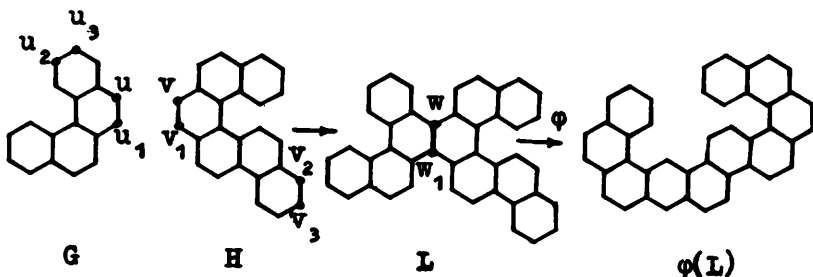


Рис. 3

оценить величину  $D(L) - D(\phi(L))$ . Содержательно преобразование  $\phi$  можно представлять так, что подграф  $H \subseteq L$  "отрывается" от подграфа  $G \subseteq L$  и снова присоединяется к  $G$  путем отождествления новых ребер графов  $G$  и  $H$  (рис.3).

## 2. Дистанция $k$ -графов

Рассмотрим для вершин  $u$  и  $v$  произвольного графа  $G$  множества  $V_u, V_v, V_{uv}$  такие, что  $V_u = \{w | d(u,w) < d(v,w)\}$ ,  $V_v = \{w | d(v,w) < d(u,w)\}$ ,  $V_{uv} = \{w | d(u,w) = d(v,w)\}$ . Из определения множеств  $V_u, V_v$  и  $V_{uv}$  следует, что их попарные пересечения являются пустыми, т.е.  $|V(G)| = |V_u| + |V_v| + |V_{uv}|$ . Если граф  $G$  является  $k$ -графом и вершины  $u$  и  $v$  смежны в  $G$ , то  $V_{uv} = \emptyset$ . Действительно, если бы нашлась вершина  $w \in V_{uv}$ , то в графе  $G$  существовал бы цикл нечетной длины, содержащий ребро  $(u,v)$ , что противоречит двудольности  $k$ -графов. Отсюда следует простая связь между дистанциями смежных вершин в  $G$ . Пусть  $|V_u| = \xi_u$  и  $|V_v| = \xi_v$ , тогда справедлива

**ЛЕММА 1.** Если смежные вершины  $u$  и  $v$  не принадлежат циклу нечетной длины, то выполняется  $D(u) - D(v) = \xi_v - \xi_u$ .

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Так как  $V(G) = V_u \cup V_v$  и  $V_u \cap V_v = \emptyset$ , то

$$\begin{aligned} D(u) &= \sum_{w \in V_u} d(u,w) + \sum_{w \in V_v} d(u,w) = \\ &= \sum_{w \in V_u} (d(v,w) - 1) + \sum_{w \in V_v} (d(v,w) + 1) = D(v) - \xi_u + \xi_v. \end{aligned}$$

Лемма доказана.

Рассмотрим возможные значения величин  $\xi_u$  и  $\xi_v$  для смежных вершин  $u, v$  степени 2 в  $k$ -графах. На рис. 4 представлены основные случаи расположения таких вершин в графе  $G$ , сплошной линией выделено множество вершин  $V_v$ . Для графа  $G$  на рис. 4а имеем  $\xi_v = 3$ ,  $\xi_u = p_G - 3$ , следовательно, всегда выполняются  $\xi_v \geq 3$ ,  $\xi_u \geq 3$ . Для определения величин  $\xi_u$  и  $\xi_v$  достаточно знать значение одной из них, так как  $\xi_u +$

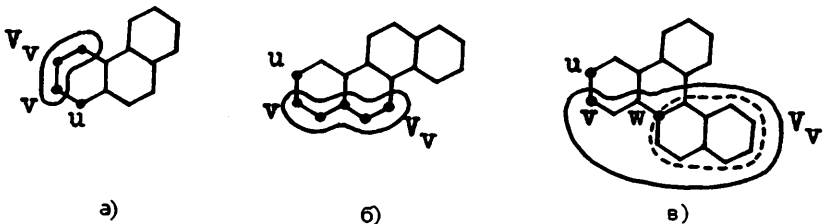


Рис: 4

+  $\xi_v = p_G$ . Отметим, что  $\xi_u$  и  $\xi_v$  определяются парой вершин, поэтому для ребер  $(u, v)$  и  $(u, v_1)$  значения  $\xi_u$  будут, вообще говоря, различны. Если  $u, v \in V(H)$ , то соответствующие величины обозначим  $h_u, h_v$ .

Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$ , тогда значение дистанции графа  $L$  можно выразить через дистанции графов  $G, H$  и дистанции отождествляемых вершин. Для произвольных графов выражения для дистанции графа  $L$  были получены в [9]. Ниже рассматривается значение  $D(L)$  для  $k$ -графов, вследствие чего выражение для  $D(L)$  принимает более простой вид.

ТЕОРЕМА 1.

$$D(L) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) + f(u_1, v_1),$$

где

$$f(u_1, v_1) = 2(\xi_{u_1} + h_{v_1} - \xi_u h_{v_1}) - (p_G + p_H) + 1.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим граф  $L$  на рис.3. Можно считать, что  $V(L) = (V_u U V_{u_1} U V_v U V_{v_1} U \{w, w_1\}) \setminus \{u, u_1, v, v_1\}$ , где вершина  $w$  получена отождествлением вершин  $u$  и  $v$ , а вершина  $w_1$  - отождествлением  $u_1$  и  $v_1$ . По определению дистанции вершины, подграфа и графа значение  $D(L)$  представляется в следующем виде:

$$D(L) = \frac{1}{2} (D_L(G) + D_L(H) - D_L(w) - D_L(w_1)). \quad (1)$$

Определим значения слагаемых из (1). Пусть вершина  $x \in V_u$  в  $G$ , тогда ее дистанция в графе  $L$  равна

$$\begin{aligned} D_L(x) &= D_G(x) + \sum_{y \in V(H) - \{v, v_1\}} (d_L(x, w) + d_L(w, y)) = \\ &= D_G(x) + (p_H - 2) d_L(x, w) + \sum_{y \in V(H) - \{v, v_1\}} d_L(w, y) = \\ &= D_G(x) + (p_H - 2) d_L(x, w) + D_H(v) - 1. \end{aligned} \quad (2)$$

Суммируя (2) по всем вершинам  $x \in V_u$ , получаем

$$\begin{aligned} \sum_{x \in V_u} D_L(x) &= \\ &= \sum_{x \in V_u} D_G(x) + (p_H - 2) \sum_{x \in V_u} d_L(x, w) + g_u (D_H(v) - 1). \end{aligned} \quad (3)$$

Аналогично для суммы дистанций вершин  $x \in V_{u_1}$  в графе  $G$  имеем

$$\begin{aligned} \sum_{x \in V_{u_1}} D_L(x) &= \sum_{x \in V_{u_1}} D_G(x) + \\ &+ (p_H - 2) \sum_{x \in V_{u_1}} d_L(x, w_1) + g_{u_1} (D_H(v_1) - 1). \end{aligned} \quad (4)$$

Заметим, что

$$\sum_{x \in V_u} D_L(x) + \sum_{x \in V_{u_1}} D_L(x) = D_L(G)$$

и

$$\sum_{x \in V_u} D_G(x) + \sum_{x \in V_{u_1}} D_G(x) = 2D(G) .$$

Тогда суммируя правые и левые части выражений (3) и (4), получаем

$$D_L(G) = 2D(G) + (p_H - 2) \left( \sum_{x \in V_u} d_L(x, w) + \sum_{x \in V_{u_1}} d_L(x, w_1) \right) + \varepsilon_u D_H(v) + \varepsilon_{u_1} D_H(v_1) - p_G .$$

Так как вершины  $w$  и  $w_1$  в графе  $L$  являются смежными, то

$$\begin{aligned} & \sum_{x \in V_u} d_L(x, w) + \sum_{x \in V_{u_1}} d_L(x, w_1) = \\ & = \sum_{x \in V_u} d_G(x, w) + \sum_{x \in V_{u_1}} (d_L(x, w) - 1) = D_G(u) - \varepsilon_{u_1} . \end{aligned}$$

Используя лемму 1 для  $D_H(v)$ , дистанцию подграфа  $G$  в графе  $L$  в итоге можно представить как

$$\begin{aligned} D_L(G) &= 2D(G) + (p_H - 2)D_G(u) + \varepsilon_u D_H(v) - \\ & - (p_H - 2)\varepsilon_{u_1} - p_G + \varepsilon_{u_1} (D_H(v) + h_v - h_{v_1}) = \\ & = 2D(G) + (p_H - 2)D_G(u) + p_G D_H(v) + \\ & + \varepsilon_{u_1} h_v - \varepsilon_{u_1} h_{v_1} - (p_H - 2)\varepsilon_{u_1} - p_G . \end{aligned} \quad (5)$$

При определении дистанции подграфа  $H$  в графе  $L$  все вычисления проводятся аналогично, так как подграфы  $G$  и  $H$  входят в граф  $L$  симметричным образом, следовательно,

$$\begin{aligned} D_L(H) &= 2D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + \\ & + p_H D_G(u) + h_{v_1} \varepsilon_u - h_v \varepsilon_{u_1} - \varepsilon_{u_1} h_{v_1} (p_G - 2) - p_H . \end{aligned} \quad (6)$$



Нетрудно заметить, что для вершин  $w, w_1 \in V(L)$  выполняется

$$D_L(w) = D_G(u) + D_H(v) - 1, \quad (7)$$

$$D_L(w_1) = D_G(u_1) + D_H(v_1) - 1.$$

Применяя лемму 1 для выражений (7), имеем

$$\begin{aligned} D_L(w_1) &= (\varepsilon_u - \varepsilon_{u_1} + D_G(u)) + (h_v - h_{v_1} + D_H(v)) - 1 = \\ &= D_G(u) + D_H(v) + \varepsilon_u + h_v - \varepsilon_{u_1} - h_{v_1} - 1 \end{aligned}$$

и

$$D_L(w) = D_G(u_1) + D_H(v_1) + \varepsilon_{u_1} + h_{v_1} - \varepsilon_u - h_v - 1. \quad (8)$$

Так как  $p_G = \varepsilon_u + \varepsilon_{u_1}$  и  $p_H = h_v + h_{v_1}$ , то  $\varepsilon_{u_1} h_v - \varepsilon_u h_{v_1} - (p_H - 2)\varepsilon_{u_1} = \varepsilon_{u_1}(p_H - h_{v_1}) - \varepsilon_u h_{v_1} - (p_H - 2)\varepsilon_{u_1} = -2\varepsilon_{u_1} h_{v_1} + 2\varepsilon_{u_1}$  и  $h_{v_1} \varepsilon_u - h_{v_1} \varepsilon_{u_1} - (p_G - 2)h_{v_1} = -2h_{v_1} \varepsilon_{u_1} + 2h_{v_1}$ . Подставив в выражение (1) значение дистанций  $D_L(G)$ ,  $D_L(H)$ ,  $D_L(w)$  и  $D_L(w_1)$  из (5)-(8) и выполнив упрощения, получаем

$$\begin{aligned} D(L) &= D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) + \\ &+ 2\varepsilon_{u_1} + 2h_{v_1} - 2\varepsilon_{u_1} h_{v_1} - (p_G + p_H) + 1. \end{aligned}$$

Теорема доказана.

Для графа  $\varphi(L) = (G, H, (u_2, u_3), (v_2, v_3))$  на рис. 3 имеем  $D(\varphi(L)) = 5765$ ,  $D(G) = 529$ ,  $D(H) = 1445$ ,  $D_G(u_2) = 69$ ,  $D_H(v_2) = 137$ ,  $p_G = 18$ ,  $p_H = 26$ ,  $\varepsilon_{u_3} = 5$ ,  $h_{v_3} = 3$ . Для графов  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u_2, u_3), (v_2, v_3))$  по теореме 1 выражение для разности их дистанций можно представить в следующем виде.

СЛЕДСТВИЕ 1.

$$D(L) - D(L_1) = (p_H - 2)(D_G(u) - D_G(u_2)) + \\ + (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_2)) + \\ + 2((g_{u_3} - 1)(h_{v_3} - 1) - (g_{u_1} - 1)(h_{v_1} - 1)).$$

Для графов на рис. 3 выполняется  $D_G(u) = 61$ ,  $D_H(v) = 113$ ,  $g_{u_1} = 11$ ,  $h_{v_1} = 15$  и  $D(L) = 4925$ ,  $D(\varphi(L)) = 5765$ . Выражение для  $D(L) - D(L_1)$  упрощается, если при образовании графа  $L_1$  в графе  $H$  отождествляется то же ребро, что и при образовании графа  $L$ . Другая возможность упрощения - близость в графах  $G$  и  $H$  отождествляемых ребер. Изучение таких преобразований, как будет показано далее, позволит строить примеры графов и классов графов с большим количеством колец и совпадающими значениями дистанций. В [11] исчерпывающим образом изучен вопрос о совпадении дистанций  $k$ -графов с числом колец до 9 включительно, приведены списки всех графов с указанным свойством. Однако для больших порядков число  $k$ -графов становится столь большим [12], что вычисление характеристик становится очень трудоемким. Поэтому изучение преобразований, сохраняющих дистанцию, для  $k$ -графов больших порядков имеет важное значение.

### 3. Локальные преобразования $k$ -графов

Выделим класс преобразований  $k$ -графов, для которых разность дистанций  $D(L) - D(\varphi(L))$  можно представить в более простом, чем в общем случае, виде. Для разности дистанций графов будут получены выражения, в которые не входят в явном виде дистанции вершин, что позволит более детально описать изменения дистанции графов. Этим требованиям отвечают локальные преобразования  $k$ -графов. Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и

$\varphi(L) = (G, H, (u_2, u_3), (v_2, v_3))$ . Преобразование  $\varphi$  графа  $L$  называется локальным, если в графе  $G$  ребро  $(u_2, u_3)$  совпадает или инцидентно ребру  $(u, u_1)$  и в графе  $H$  ребро  $(v_2, v_3)$  совпадает или инцидентно ребру  $(v, v_1)$ . Таким образом, при образовании графа  $L_1 = \varphi(L)$  в графах  $G$  и  $H$  отождествляются ребра тех же колец, что и при образовании графа  $L$ , поэтому структура графа  $L_1$  остается "похожей" на структуру графа  $L$ . Применяя к  $k$ -графу последовательно локальные преобразования, всегда будем получать  $k$ -графы. Очевидно, что два  $k$ -графа переводятся локальными преобразованиями друг в друга тогда и только тогда, когда их характеристические графы изоморфны. Например, любой граф из класса "гусениц" (характеристический граф не содержит вершин степени 3) с заданным числом колец может быть получен из любого другого графа этого класса локальными преобразованиями. Графы  $G_1 - G_{17}$  на рис. 5 получены с помощью всевозможных локальных преобразований из графа  $L$  (кольца графа  $H$  для наглядности пронумерованы). Среди локальных преобразований выделим следующие группы.

а) При образовании графа  $L_1$  отождествляемые ребра в графах  $G$  и  $H$  остаются теми же, что и при образовании графа  $L$ , но отождествляемые вершины этих ребер меняются местами (граф  $L_1$ ).

б) При образовании графа  $L_1$  одно отождествляемое ребро в графах  $G$  и  $H$  остается тем же, что и при образовании графа  $L$ , а другое является новым (графы  $L_2 - L_9$ ).

в) При образовании графа  $L_1$  в графах  $G$  и  $H$  отождествляются новые ребра (графы  $L_{10} - L_{17}$ ).

Если учитывать симметрию  $k$ -графов, то определение локальных преобразований естественным образом расширяется. Два ребра  $k$ -графа называются эквивалентными, если существует автоморфизм, переводящий вершины одного ребра в вершины другого,

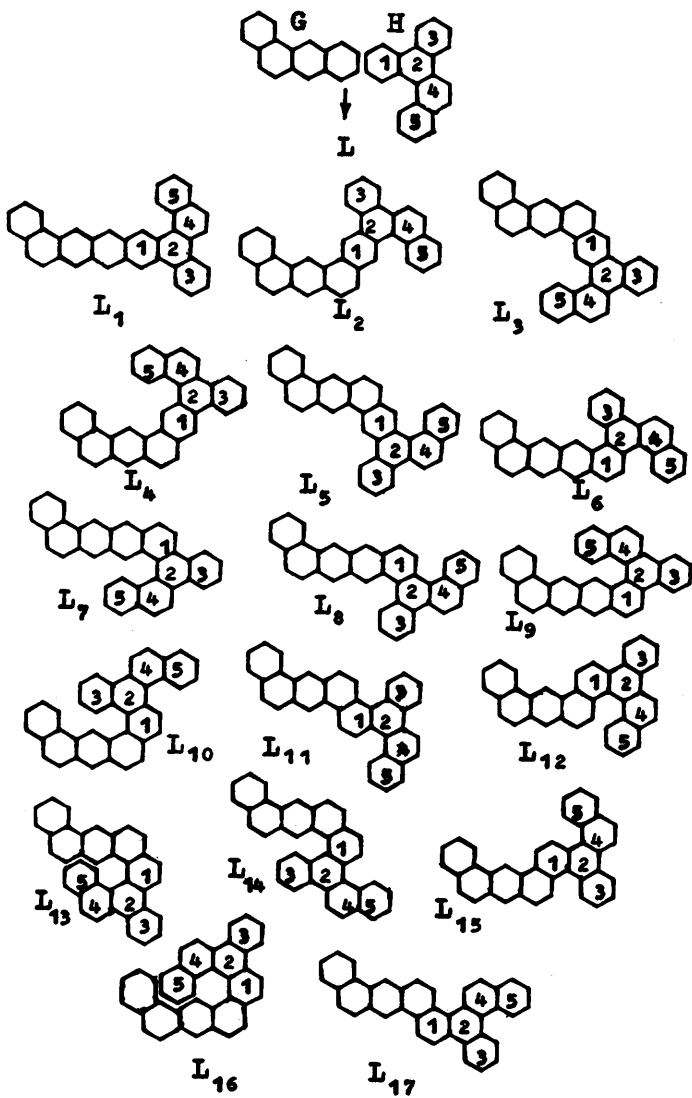


Рис. 5. Локальные преобразования графа  $L$

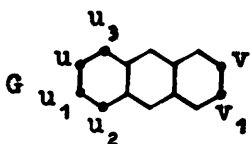


Рис. 6

т.е.  $(u, u_1) \sim (u_2, u_3)$ , если  $u, u_2 \in \theta_1$  (или  $u, u_3 \in \theta_1$ ) и  $u_1, u_3 \in \theta_2$  (или  $u_1, u_2 \in \theta_2$ ), где  $\theta_1, \theta_2$  - не обязательно различные орбиты группы автоморфизмов  $k$ -графа. В графе  $G$  на рис. 6 вершины  $u, u_1, v, v_1 \in \theta_1$  и  $u_2, u_3 \in \theta_2$ . Для графов  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u_2, u_3), (v_2, v_3))$  преобразование  $\Phi$  является локальным, если ребро  $(u_2, u_3)$  эквивалентно ребру  $(u, u_1)$  или инцидентно ребру, эквивалентному  $(u, u_1)$ , в графе  $H$  аналогично. Определим количество графов, получаемое операцией присоединения графов  $G$  и  $H$ . Пусть в графах  $G$  и  $H$   $m$  и  $n$  - количество попарно неэквивалентных ребер, и пусть из этого множества ребер  $m_1, n_1$  - количество ребер, в каждом из которых вершины принадлежат различным орбитам группы автоморфизмов. Тогда число неизоморфных графов, построенных из  $G$  и  $H$  операцией присоединения, не превосходит  $mn + m_1n_1$ , если  $G \neq H$ , и  $m_1(m_1+1) + \frac{1}{2}(m-m_1)(m-m_1+1)$  при  $G \approx H$ .

#### 4. Изменение дистанции графа при локальных преобразованиях

В этом пункте более подробно рассматриваются виды локальных преобразований  $k$ -графов. Приводятся выражения, описывающие изменение дистанции графов. Для каждого преобразования определяются условия, при которых дистанции исходного и полученного графа совпадают.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u, u_1), (v_1, v))$  (рис. 7), тогда  $D(L) - D(L_1) = (h_{v_1} - h_v)(\xi_u - \xi_{u_1})$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Используя теорему 1, выразим дистанцию графа  $L$  через дистанции вершин  $u$  и  $v$ , а дистанцию графа  $L_1$  - через дистанции вершин  $u$  и  $v_1$ . Имеем  $D(L) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) + 2(\xi_{u_1} + h_{v_1} - \xi_u, h_{v_1}) -$

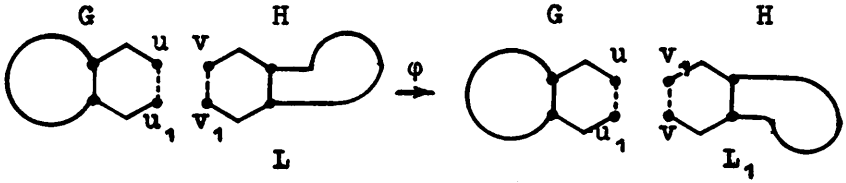


Рис. 7

$$\begin{aligned}
 & - (p_G + p_H) + 1 \text{ и } D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + \\
 & + (p_G - 2)D_H(v_1) + 2(\xi_{u_1} + h_v - \xi_{u_1} h_v) - (p_G + p_H) + 1. \text{ Для раз-} \\
 & \text{ности дистанций } D(L) - D(L_1) \text{ получим выражение } D(L) - D(L_1) = \\
 & = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_1)) + 2(h_{v_1} - h_v)(1 - \xi_{u_1}). \text{ Так как, по} \\
 & \text{лемме 1, } D_H(v) - D_H(v_1) = h_{v_1} - h_v, \text{ то } D(L) - D(L_1) = \\
 & = (p_G - 2)(h_{v_1} - h_v) + 2(h_{v_1} - h_v)(1 - \xi_{u_1}) = (h_{v_1} - h_v)(p_G - 2\xi_{u_1}) = \\
 & = (h_{v_1} - h_v)(\xi_u - \xi_{u_1}). \text{ Утверждение доказано.}
 \end{aligned}$$

СЛЕДСТВИЕ. Для описанного выше локального преобразования  $D(L) = D(L_1) \Leftrightarrow h_v = h_{v_1}$  или  $\xi_u = \xi_{u_1}$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО непосредственно следует из утверждения 1.

Опишем структуру  $K$ -графов, для которых выполняется условие  $\xi_u = \xi_{u_1}$ . На рис. 8 в общем виде представлена схема структуры таких графов. В подграфе  $G_1$  не должно быть смежных вершин степени 2, т.е. кольца в  $G_1$  расположены "в линию", в подграфах  $G_2$  и  $G_3$  число колец совпадает, кольца в  $G_2$  и  $G_3$  могут располагаться произвольно. Таким образом, используя рассматриваемое локальное преобразование, можно строить примеры  $K$ -графов с совпадающими значениями дистанции. Например, из графа  $L$  на рис. 9а можно построить 8 (включая  $L$ ) неизоморфных  $K$ -графов с совпадающими значениями дистанций  $D(L) = 33483$ .

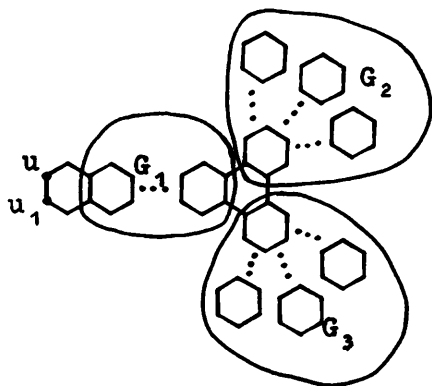


Рис. 8

Ребра, по которым граф  $L$  можно разбить на подграфы  $G$  и  $H$ , выделены двойной линией. Если вершины  $u$  и  $u_1, v$  и  $v_1$  принадлежат одной орбите группы автоморфизмов графов  $G$  и  $H$  соответственно, то  $L \cong L_1$ . Следовательно, графы на рис. 9б с дистанцией  $D(L) = D(L_1) = 2047$  содержат наименьшее количество колец среди неизоморф-

ных пар графов, получаемых с помощью рассматриваемого преобразования. Заметим, что для  $k$ -графов из класса "гусениц" всегда выполняется  $D(L) \neq D(L_1)$ , так как не выполняются условия следствия.

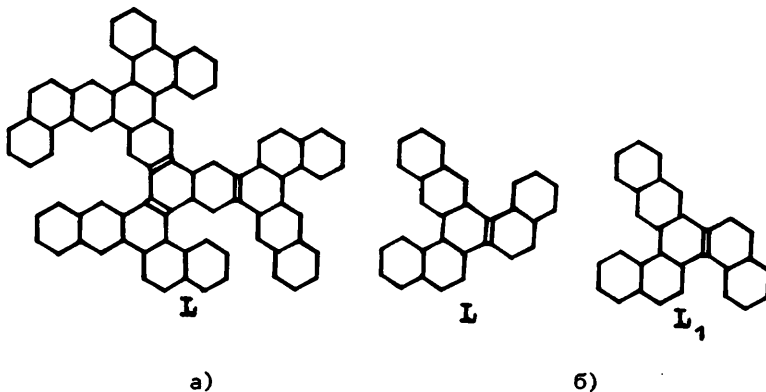


Рис. 9

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u, u_2), (v, v_1))$  (рис. 10), тогда

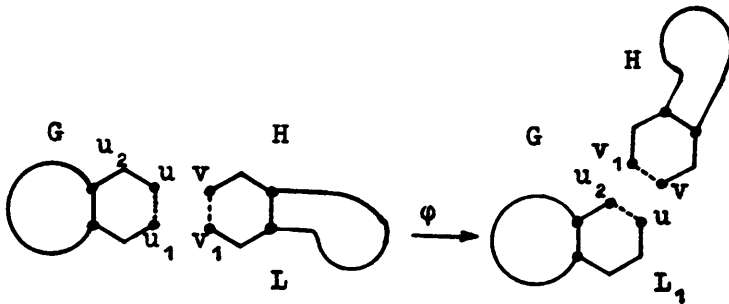
$$D(L) - D(L_1) = 2(\xi_{u_1} - \xi_{u_2})(1 - h_{v_1}).$$


Рис. 10

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. По теореме 1 дистанцию графов  $L$  и  $L_1$  можно представить через дистанции вершин  $u$  и  $v$  следующим образом:

$$D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) + 2(\xi_{u_1} + h_{v_1} - \xi_{u_1} h_{v_1}) - (p_G + p_H) + 1,$$

$$D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) + 2(\xi_{u_2} + h_{v_1} - \xi_{u_2} h_{v_1}) - (p_G + p_H) + 1.$$

Отсюда  $D(L) - D(L_1) = 2(\xi_{u_1} - \xi_{u_2} - \xi_{u_1} h_{v_1} + \xi_{u_2} h_{v_1}) = 2(\xi_{u_1} - \xi_{u_2})(1 - h_{v_1})$ . Утверждение доказано.

СЛЕДСТВИЕ. Для рассматриваемого в утверждении 2 локального преобразования всегда выполняется  $D(L) \neq D(L_1)$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть граф  $G$  имеет порядок  $p_G \geq 10$ . Так как всегда выполняется  $h_{v_1} \geq 3$ , то  $1 - h_{v_1} \neq 0$ . Вершины  $u_1, u_2$  имеют степень два и принадлежат концевому коль-



цу графа  $G$ ,  $d(u_1, u_2) = 2$ . Для таких вершин всегда выполняется условие  $\xi_{u_1} \neq \xi_{u_2}$ , так как, очевидно, либо  $\xi_{u_1} = p_G - 3$  и  $\xi_{u_2} \leq p_G - 5$ , либо  $\xi_{u_2} = p_G - 3$  и  $\xi_{u_1} \leq p_G - 5$ . Следствие доказано.

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u, u_2), (v, v_2))$  (рис. 11), тогда

$$D(L) - D(L_1) = 2((\xi_{u_2} - 1)(h_{v_2} - 1) - (\xi_{u_1} - 1)(h_{v_1} - 1)).$$

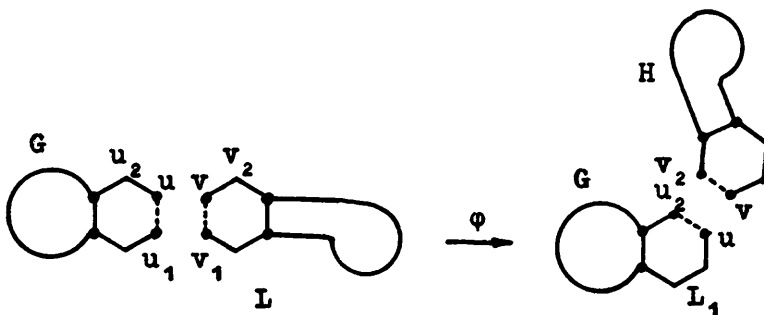


Рис. 11

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Дистанция графов  $L$  и  $L_1$  по теореме 1 представляется через дистанции вершин  $u$  и  $v$  в виде:  $D(L) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) + 2(\xi_{u_1} + h_{v_1} - \xi_{u_1} h_{v_1}) - (p_G + p_H) + 1$  и  $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) + 2(\xi_{u_2} + h_{v_2} - \xi_{u_2} h_{v_2}) - (p_G + p_H) + 1$ . Для разности дистанций графов  $L$  и  $L_1$  имеем  $D(L) - D(L_1) = 2(\xi_{u_1} - \xi_{u_2} - h_{v_1}(\xi_{u_1} - 1) + h_{v_2}(\xi_{u_2} - 1)) = 2((\xi_{u_1} - 1) \times (1 - h_{v_1}) + (\xi_{u_2} - 1)(h_{v_2} - 1))$ . Утверждение доказано.

СЛЕДСТВИЕ. При рассматриваемом в утверждении 3 локальном преобразовании для дистанций графов  $L$  и

$L_1$  выполняется

$$D(L) = D(L_1) \leftrightarrow \frac{\varepsilon_{u_2} - 1}{\varepsilon_{u_1} - 1} = \frac{h_{v_1} - 1}{h_{v_2} - 1}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО непосредственно следует из утверждения 3.

Для графов  $L$  и

$L_1$  на рис. 12 выпол-  
няется  $D(L) = D(L_1) =$   
 $= 3201$ , так как  $\varepsilon_{u_2} =$   
 $= h_{v_1} = 5$  и  $\varepsilon_{u_1} =$   
 $= h_{v_2} = 15$ . Пусть  
 $\varepsilon_{u_2} \neq h_{v_1}$  и  $\varepsilon_{u_1} \neq$   
 $\neq h_{v_2}$ , тогда для по-  
строения графов с сов-  
падающими значениями ди-  
станций нам потребуется

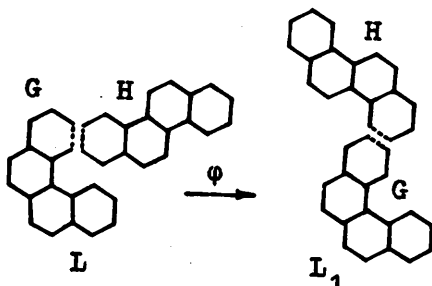


Рис. 12

ЛЕММА 2. Если для дроби  $a/b$ ,  $a < b$ , выполняются условия:

а) существует число  $m \in \mathbb{N}$  такое, что  $\frac{1}{4}(bm-2) \in \mathbb{N}$ ;

б) существуют числа  $s, n \in \mathbb{N}$  такие, что  $2(2s+n+1) = am$ , то существует  $k$ -граф  $G$  таковой, что  $(\varepsilon_{u_2} - 1) / (\varepsilon_{u_1} - 1) = a/b$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим граф  $G$  на рис. 13, в котором в подграфе  $G_1$  содержится  $n-1$  кольцо, в подграфе  $G_2$  -  $s$  колец, в подграфе  $G_4$  -  $r$  колец и в подграфе  $G_3$  -  $r-n-s$  колец, где  $r = \frac{1}{4}(bm-2)$ , а  $m, n, s$  - числа, удовлетворяющие условиям леммы 2. Кольца в подграфе  $G_1$  расположены "в линию", расположение колец в подграфах  $G_2$  и  $G_3$  произвольное. Вы-

числим значение  $(\varepsilon_{u_2} - 1)/(\varepsilon_{u_1} - 1)$  в построенном графе  $G$ .  
Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_{u_2} - 1}{\varepsilon_{u_1} - 1} &= \frac{|V(G_2)| + (\frac{1}{2} |V(G_1)| + 2) - 1}{(|V(G_4)| + 1) - 1} = \\ &= \frac{(4s+2) + (\frac{1}{2}[4(n-1)+2] + 2) - 1}{((4r+2)+1) - 1} = \frac{(4s+2n+3) - 1}{((4\frac{1}{4}(bm-2)+2)+1) - 1} = \\ &= \frac{(am+1) - 1}{(bm+1) - 1} = \frac{am}{bm} = \frac{a}{b}. \end{aligned}$$

Лемма доказана.

Если в условиях леммы 2 требовать  $a > b$ , то в графе  $G$  на рис.13 подграф  $G_4$  должен располагаться ближе к вершине

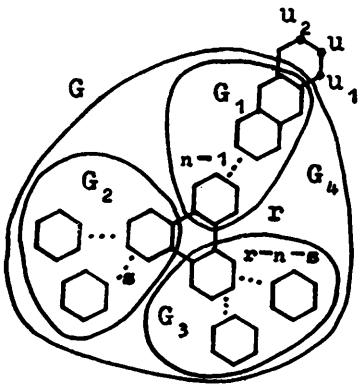


Рис. 13

$u_2$ , чем к вершине  $u_1$ . Пусть задан граф  $H$ . Опишем процедуру построения графа  $G$  такого, что для графов  $L$  и  $L_1$ , построенных из  $G$  и  $H$ , выполняется  $D(L) = D(L_1)$  при рассматриваемом локальном преобразовании. Построение графа  $G$  можно разбить на два шага. На первом шаге последовательно перебираются значения  $\mathcal{M} = 1, 2, 3, \dots$

и фиксируются те значения  $\mathcal{M}$ , для которых величина  $\mathcal{I} = \frac{1}{4}(bm-2)$  является целой. На втором шаге для значений  $\mathcal{M} = 1, 2, 3, \dots$  подбирается такое значение  $s$ , чтобы выполнялись условия  $2(2s+n+1) = am$  и  $n+s \leq r$ . Любая допустимая тройка  $(r, n, s)$ , построенная по  $a$  и  $b$ , определяет граф

$G$ . При  $s \geq 2$  и/или  $r-s-n \geq 2$  параметры  $(r, n, s)$  определяют несколько графов в силу произвольности присоединения колец в подграфах  $G_2$  и  $G_3$  графа  $G$  на рис.13. Рассмотрим граф  $H$  на рис. 14а,  $h_{v_1} = 5$ ,  $h_{v_2} = 7$ . Построим

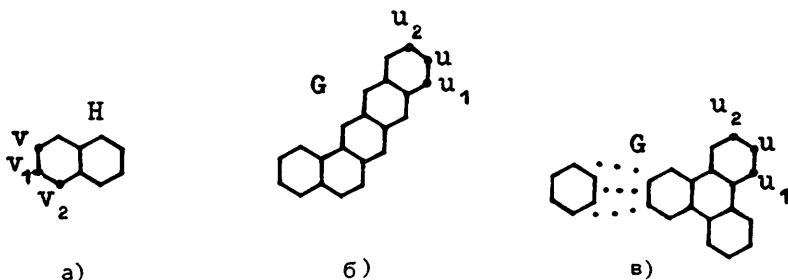


Рис. 14

граф  $G$  такой, что  $(g_{u_2} - 1)/(g_{u_1} - 1) = (h_{v_1} - 1)/(h_{v_2} - 1) = 2/3$ . Для  $b = 3$  первое значение  $m$ , для которого  $r = \frac{1}{4}(3m-2) \in \mathbb{N}$ , есть  $m = 6$ . Таким образом,  $r = 4$ , граф  $G$  содержит  $r + 1 = 5$  колец и имеет порядок 22. Далее необходимо подобрать такие числа  $s$  и  $n$ , чтобы выполнялось  $2(2s + n + 1) = 12$  или  $2s + n = 5$ ,  $n + s \leq r$ . Этим условиям удовлетворяют значения  $s = 1$ ,  $n = 3$  и  $s = 2$ ,  $n = 1$ , и тройки  $(4, 3, 1)$  и  $(4, 1, 2)$  определяют граф  $G$ . Для набора параметров  $(4, 3, 1)$  существует единственный граф  $G$  (рис. 14б), а для набора  $(4, 1, 2)$  существуют три неизоморфных графа  $G$  (рис. 14в). Заметим, что случай  $a = b$ , при котором  $h_{v_1} = h_{v_2}$ , возможен только, когда  $H$  состоит из одного кольца.

Тогда построить граф  $G$  описанным выше способом невозможно, так как  $d(u_1, u_2) = 2$  в конечном кольце, а для таких вершин всегда выполняется  $\xi_{u_1} \neq \xi_{u_2}$ .

УТВЕРЖДЕНИЕ 4. Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u, u_2), (v, v_2))$  (рис. 15), тогда

$$D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(h_{v_1} - h_v) + \\ + 2((\varepsilon_{u_2} - 1)(h_{v_2} - 1) - (\varepsilon_{u_1} - 1)(h_{v_1} - 1)).$$

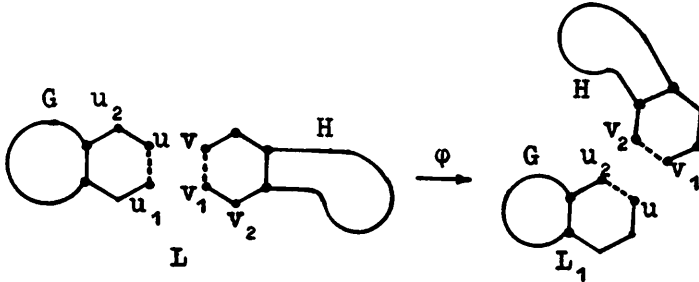


Рис. 15

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Выразим дистанцию графа  $L$  через дистанции вершин  $u$  и  $v$ , а дистанцию графа  $L_1$  через дистанции вершин  $u$  и  $v_1$ . Имеем  $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) + 2(\varepsilon_{u_1} + h_{v_1} - \varepsilon_{u_1} h_{v_1}) - (p_G + p_H) + 1$  и  $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v_1) + 2(\varepsilon_{u_2} + h_{v_2} - \varepsilon_{u_2} h_{v_2}) - (p_G + p_H) + 1$ . Следовательно,

$$D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_1)) + \\ + 2(\varepsilon_{u_1} + \varepsilon_{u_2} + h_{v_1}(1 - \varepsilon_{u_1}) - h_{v_2}(1 - \varepsilon_{u_2})).$$

Так как, по лемме 1,  $D_H(v) - D_H(v_1) = h_{v_1} - h_v$ , то  $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(h_{v_1} - h_v) + 2((\varepsilon_{u_2} - 1)(h_{v_2} - 1) - (\varepsilon_{u_1} - 1)(h_{v_1} - 1))$ . Утверждение доказано.

Для рассматриваемого в утверждении 4 преобразования дистанции графов  $L$  и  $L_1$  при  $h_{v_1} = h_v$ ,  $\xi_{u_2} = h_{v_1}$  и  $\xi_{u_1} = h_{v_2}$  совпадают. Для таких графов на рис. 16 выполняется  $D(L) = D(L_1) = 8305$ . Используя лемму 2, можно подбирать такие графы  $G$  и  $H$ , для которых  $\xi_{u_2} \neq h_{v_1}$  и  $\xi_{u_1} \neq h_{v_2}$ ,  $h_v = h_{v_1}$ . Граф  $H$  выбираем произвольно с условием  $h_v = h_{v_1}$ . Определив в  $H$  значения  $h_v$  и  $h_{v_1}$ , для пост-

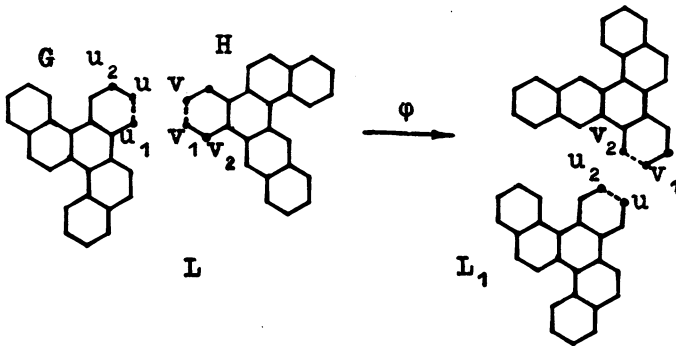


Рис. 16

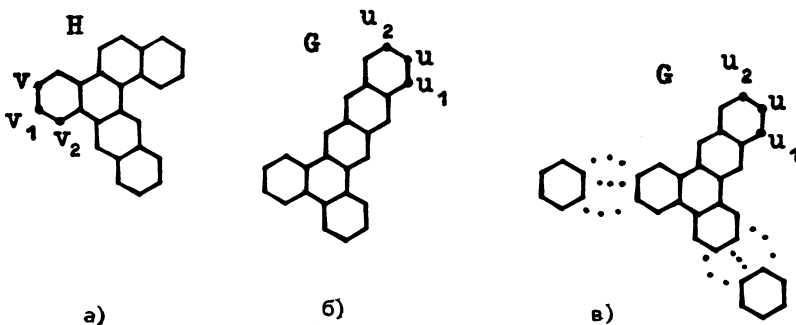


Рис. 17

роения графа  $G$  можно воспользоваться леммой 2. На рис. 17а приводится граф  $H$  со значениями  $h_{v_2} = 23$  и  $h_v = h_{v_1} = 13$ . Построим граф  $G$  со значением  $(g_{u_2} - 1)/(g_{u_1} - 1) = (h_{v_1} - 1)/(h_{v_2} - 1) = 6/11$ . При  $m = 2$  имеем  $r = \frac{1}{4}(6m - 2) = 5$ , следовательно,  $G$  содержит  $r + 1 = 6$  колец, а пары метры  $s$  и  $n$  должны удовлетворять условиям  $2s + n = 5$  и  $n + s \leq r$ . Допустимые значения для  $n$  и  $s$  суть  $s = 1, n = 3$  и  $s = 2, n = 1$ . Графы, определяемые тройками  $(5, 3, 1)$  и  $(5, 1, 2)$ , приведены на рис. 17. Для  $(5, 3, 1)$  существует единственный граф (рис. 17б), а для  $(5, 1, 2)$  существует шесть неизоморфных графов (рис. 17в).

УТВЕРЖДЕНИЕ 5. Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u, u_2), (v_2, v_1))$  (рис. 18), тогда для графов  $L$  и  $L_1$  выполняется

$$D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(h_{v_2} - h_{v_1}) + (p_H - 2)(g_{u_2} - g_{u_1}) + 2((g_{u_1} - 1)(h_{v_2} - 1) - (g_{u_2} - 1)(h_{v_1} - 1)).$$

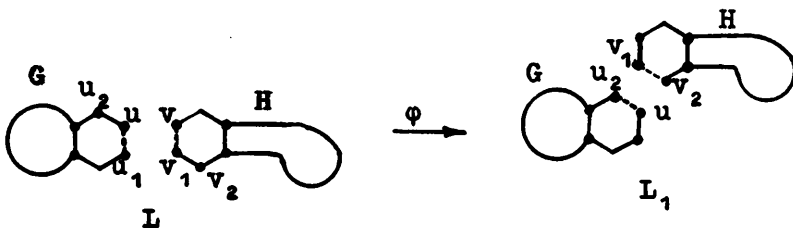


Рис. 18

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Выразим дистанцию графа  $L$  через дистанции вершин  $u$  и  $v$ , а дистанцию графа  $L_1$  - через дистанцию вершин  $u_2$  и  $v_1$ . Имеем  $D(L) = D(G) + D(H) +$

$$\begin{aligned}
& + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) + 2(\varepsilon_{u_1} + h_{v_1} - \varepsilon_{u_1} h_{v_1}) - \\
& - (p_G + p_H) + 1 \quad \text{и} \quad D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_1) + \\
& + (p_H - 2)D_G(u_2) + 2(\varepsilon_u + h_{v_2} - \varepsilon_u h_{v_2}) - (p_G + p_H) + 1. \quad \text{Тогда} \\
& D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(\bar{v}) - D_H(\bar{v}_1)) + (p_H - 2)(D_G(u) - \\
& - D_G(u_2)) + 2((\varepsilon_u - 1)(h_{v_2} - 1) - (\varepsilon_{u_2} - 1)(h_{v_1} - 1)). \\
& \text{По лемме 1, } D_H(\bar{v}) - D_H(\bar{v}_1) = h_{v_1} - h_{v_2} \quad \text{и} \quad D_G(u) - D_G(u_2) = \\
& = \varepsilon_{u_2} - \varepsilon_u. \quad \text{Окончательно для разности дистанций получим} \\
& D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(h_{v_1} - h_{v_2}) + (p_H - 2)(\varepsilon_{u_2} - \varepsilon_u) + 2((\varepsilon_u - 1) \times \\
& \times (h_{v_2} - 1) - (\varepsilon_{u_1} - 1)(h_{v_1} - 1)). \quad \text{Утверждение доказано.}
\end{aligned}$$

Из утверждения 5 следует, что дистанции графов  $L$  и  $L_1$  будут совпадать при выполнении условий  $h_{v_1} = h_{v_2} = \varepsilon_{u_2} = \varepsilon_u$  и  $\varepsilon_{u_1} = h_{v_2}$ . На рис. 19 для таких графов  $D(L) = D(L_1) = 8265$ . Для построения более сложных примеров можно использовать лемму 2. Граф  $H$  подбирается таким, чтобы выполнялось равенство  $h_{v_1} = h_{v_2}$ . Для построения графа  $G$  необходимо выполнение дополнительного условия  $|V(G_2)| = |V(G_3)|$  в графе на рис. 13 или  $2s = r - n$ . Построенные ранее графы  $G$  на рис. 17 удовлетворяют этим условиям.

Рассмотрим несколько примеров преобразований  $k$ -графов, не являющихся локальными, при которых дистанции графов совпадают. Для графов  $L$  и  $L_1$  на рис. 20 выполняются  $\varepsilon_{u_2} = 7$ ,  $\varepsilon_{u_3} = 15$ ,  $\varepsilon_u = \varepsilon_{u_1} = 11$ ,  $D_G(u) = D_G(u_1) = 77$ ,  $D_G(u_2) = 81$ ,  $D_G(u_3) = 73$  и  $D(L) = D(L_1) = 1381$ . Графы  $L$  и  $L_1$  на рис. 21 образованы отождествлением ребер одного и того же концевое кольцо,  $G \simeq H$ . Имеем  $D(L) = D(L_1) = 8385$  и  $D_G(u) = D_G(u_2)$ ,  $D_H(v) = D_H(v_3)$ ,  $\varepsilon_{u_3} = \varepsilon_{u_1}$ ,  $h_{v_1} = h_{v_2}$ . Графы  $L$  и  $L_1$  на рис. 22 образуют семейство пар



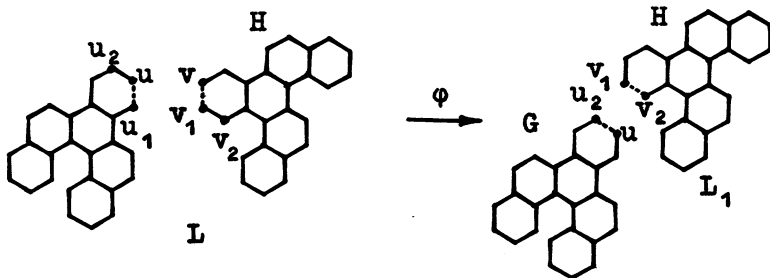


Рис. 19

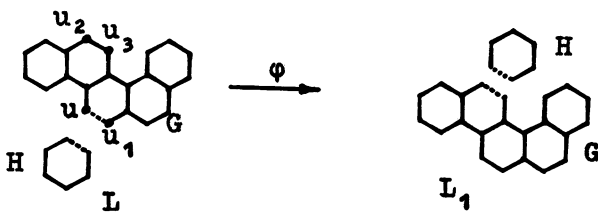


Рис. 20

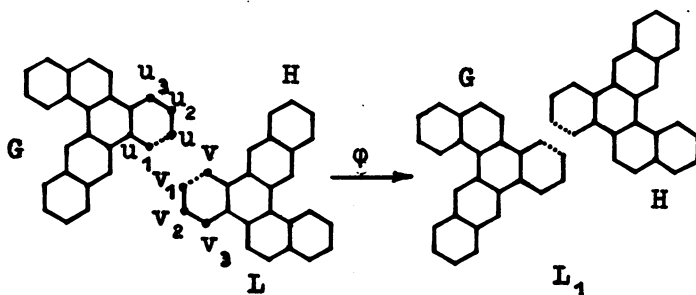


Рис. 21

графов с совпадающими дистанциями. Действительно, как нетрудно установить,  $\xi_{u_2} = \xi_{u_1}$  и  $D_G(u) = D_G(u_3)$ .

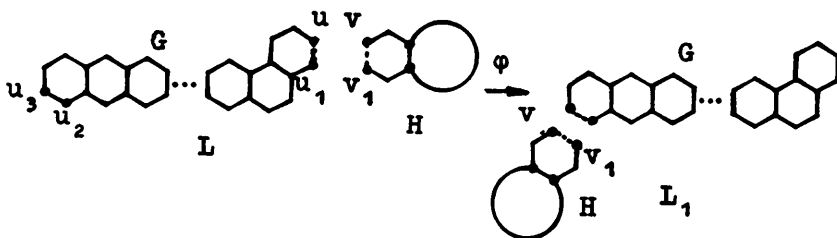


Рис. 22

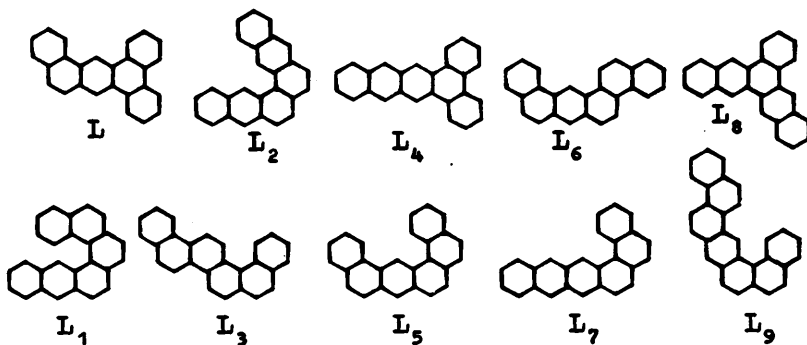


Рис. 23

Пусть имеются произвольные  $K$ -графы  $L$  и  $L_1$ , для которых  $D(L) = D(L_1)$ . Всегда ли можно найти пару  $K$ -графов  $G$  и  $H$  таких, что  $L$  и  $L_1$  образованы из  $G$  и  $H$  операцией присоединения? Для  $K$ -графов с числом колец 5 существует единственная пара графов с совпадающей дистанцией  $D(L) = D(L_1) = 971$ . Эти графы получаются из семейства графов на

рис. 22 при  $H \cong C_6$ . Но уже среди  $K$ -графов с числом колец 6 существует 5 пар таких, которые нельзя разбить каким-либо образом на  $K$ -графы  $G$  и  $H$ . Для таких графов на рис.23 выполняется  $D(L) = D(L_1) = 1453$ ,  $D(L_2) = D(L_3) = 1504$ ,  $D(L_4) = D(L_5) = 1585$ ,  $D(L_6) = D(L_7) = 1533$  и  $D(L_8) = D(L_9) = 1445$ .

### 5. Совпадение метрических характеристик графов при локальных преобразованиях

Среди локальных преобразований  $K$ -графов существуют такие, при которых сохраняются метрические характеристики для каждой вершины, и, следовательно, все дистанционные и эксцентриситетные метрические характеристики самих графов [13]. Для этого достаточно показать совпадение матриц слоев графов  $L$  и  $L_1$ . Матрицей слоев графа  $G$  называется матрица  $\lambda(G) = \|\lambda_{ij}\|$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ ,  $j = 1, 2, \dots, d(G)$ , где  $\lambda_{ij}$  - число вершин, находящихся на расстоянии  $j$  от вершины  $v_i$ ,  $d(G)$  - диаметр графа  $G$ . Следующее утверждение устанавливает условия равенства матриц слоев графов  $L$  и  $L_1$ , формулируемые в терминах матриц слоев графов  $G$  и  $H$ . Обозначим через  $\lambda_G(v)$  строку, соответствующую вершине  $v$  в матрице  $\lambda(G)$  графа  $G$ .

УТВЕРЖДЕНИЕ 6. Пусть  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$  и  $L_1 = (G, H, (u, u_1), (v_1, v))$ , тогда для любой  $w \in V(L)$

$$\lambda_L(w) = \lambda_{L_1}(w) \Leftrightarrow \lambda_G(u) = \lambda_G(u_1)$$

и  $\lambda_H(v) = \lambda_H(v_1)$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Необходимость. Пусть  $\lambda_L(w) = \lambda_{L_1}(w)$  и для вершины  $w \in V_u$  в графе  $G$   $d(w, u) = w$ , тогда по построению графов  $L$  и  $L_1$  элементы их матриц слоев можно представить в виде:

$$\lambda_{w,j}(L) = \begin{cases} \lambda_{w,j}(G), & j \leq m, \\ \lambda_{w,j}(G) + \lambda_{v,j-m}(H), & j > m; \end{cases} \quad (9)$$

$$\lambda_{w,j}(L_1) = \begin{cases} \lambda_{w,j}(G), & j \leq m, \\ \lambda_{w,j}(G) + \lambda_{v_1,j-m}(H), & j > m. \end{cases}$$

Из условия  $\lambda_{w,j}(L) - \lambda_{w,j}(L_1) = 0$  следует, что  $\lambda_{v,k}(H) = \lambda_{v_1,k}(H)$  для всех значений  $k$ . Для вершины  $w \in V_{u_1}$  в графе  $G$  и вершин  $w \in V(H)$  рассуждения аналогичны. Достаточность следует из представления (9) элементов матриц слоев графов  $L$  и  $L_1$  и равенства строк, соответствующих вершинам  $u$ ,  $u_1$  и  $v, v_1$  в матрицах слоев  $\lambda(G)$  и  $\lambda(H)$ . Утверждение доказано.

Согласно утверждению 6 для построения графов  $L$  и  $L_1$  с совпадающей матрицей слоев достаточно иметь графы  $G$  и  $H$ , в которых существуют пары неэквивалентных вершин, имеющие одинаковые строки в матрицах слоев. Графы  $L$  и  $L_1$  наименьшего порядка имеют 10 колец (рис. 24). Действительно, в графах с числом колец  $h \leq 4$  одинаковое значение дистанции имеют только эквивалентные вер-

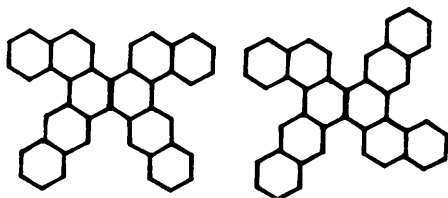


Рис. 24

шины, в чем нетрудно убедиться непосредственно. Условия утверждения 6 гарантируют не только сохранение всей матрицы слоев графа, но и сохранение строк вершин в матрице слоев, т.е. для  $w \in V(G)$  и  $w_1 \in V(H)$  выполняются  $\lambda_L(w) = \lambda_{L_1}(w)$  и  $\lambda_L(w_1) = \lambda_{L_1}(w_1)$ . В более общих случаях существенную роль

выполняют условия утверждения 6, гарантирующие не только сохранение всей матрицы слоев графа, но и сохранение строк вершин в матрице слоев, т.е. для  $w \in V(G)$  и  $w_1 \in V(H)$  выполняются  $\lambda_L(w) = \lambda_{L_1}(w)$  и  $\lambda_L(w_1) = \lambda_{L_1}(w_1)$ . В более общих случаях существенную роль

игрют распределения вершин в множествах  $V_{u_1}, V_{u_2}, V_{u_3}, V_{u_1}, V_{u_2}, V_{u_3}$  и т.п. Для графа  $G$  на рис. 21 для вершин ребер  $(u, u_1)$ ,  $(u_2, u_3)$  выполняются  $\lambda_G(u) = \lambda_G(u_2)$  и  $\lambda_G(u_1) = \lambda_G(u_3)$ , но графы  $L$  и  $L_1$ , построенные из  $G$  и  $H$  ( $G \approx H$ ), имеют различные матрицы слоев.

## 6. Алгоритмы порождения графов со значениями дистанции в заданном интервале

Рассматриваются алгоритмы порождения  $k$ -графов с заданными ограничениями на значение их дистанций из пары графов  $G$  и  $H$ . Для вычисления дистанций графов по теореме 1 необходимы значения  $\mathcal{E}_u, \mathcal{E}_v$  для вершин отождествляемых ребер графов  $G$  и  $H$ . В алгоритме 1 осуществляется вычисление значения  $\mathcal{E}_v$ , определяемого ребром  $(u, v)$  в графе  $G$ . Для определения  $\mathcal{E}_v$  используем представление  $k$ -графа в виде граничной степенной последовательности, единственным образом представляющей  $k$ -граф, вложимый в правильную шестиугольную решетку на плоскости [10]. Граничной степенной последовательностью  $k$ -графа порядка  $p$  называется последовательность степеней его вершин  $d_{i_1}, d_{i_2}, \dots, d_{i_p}$ , где  $d_{i_j}$  - степень вершины  $v_{i_j}$ , причем вершина  $v_{i_j}$  смежна с вершинами  $v_{i_{j-1}}$  и  $v_{i_{j+1}}$ ,  $j = 2, 3, \dots, p-1$ , вершина  $v_{i_1}$  смежна с вершиной  $v_{i_p}$ , и каждое ребро  $(v_{i_j}, v_{i_{j+1}})$ ,  $j = 1, 2, \dots, p-1$ , принадлежит единственной шестиугольной грани  $k$ -графа. Граничная степенная последовательность  $k$ -графа, таким образом, представляет собой последовательность чисел 2 и 3. Далее считаем, что  $k$ -графы представлены граничными степенными последовательностями и известно положение степеней вершин  $u$  и  $v$ . Рассмотрим варианты расположения вершин  $u$  и  $v$  в граничной степенной последовательности.

1. Вершины  $u$  и  $v$  принадлежат концевому кольцу, и вершина  $v$  или  $u$  смежна с вершиной степени 3 (рис. 4а). Соответствующий фрагмент граничной степенной последовательности имеет вид:

$$\begin{array}{ccccccc} & & u & v & & & \\ \alpha & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 \beta, \\ & & v & u & & & \end{array}$$

где здесь и ниже  $\alpha$ ,  $\beta$  - некоторые подпоследовательности граничной последовательности графа. Тогда  $g_v = 3$  и  $g_u = p_G - 3$ .

2. Пусть вершины  $u$  и  $v$  принадлежат концевому кольцу и первое вхождение подпоследовательности  $33$  при движении вправо и влево от вершин  $u$  и  $v$  находится ближе к вершине  $u$  (рис. 4б). Фрагмент граничной степенной последовательности имеет вид:

$$\alpha \underbrace{2 \ 3 \ 2 \ 2 \ 3 \leftarrow \dots \leftarrow 3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3}_{i \text{ позиций}} \begin{array}{c} v \ u \\ \leftarrow \dots \rightarrow \end{array} \underbrace{\dots \rightarrow 3 \ 2 \ 3 \ 3 \beta}_{i \text{ позиций}}$$

В этом случае  $g_v = i+2$  и  $g_u = p_G - (i+2)$ .

3. Первое вхождение подпоследовательности  $33$  находится на одинаковом расстоянии при движении вправо и влево от вершин  $u$  и  $v$  (рис. 4в). Фрагмент граничной последовательности имеет вид:

$$\alpha \underbrace{3 \ 3 \ 2 \leftarrow \dots \leftarrow 3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3}_{i} \begin{array}{c} u \ v \\ \leftarrow \dots \rightarrow \end{array} \underbrace{\dots \rightarrow 2 \ 3 \ 3 \beta}_{i}$$

В этом случае  $g_v = (i+2)+a$  и  $g_u = p_G - (i+2+a)$ , где  $a$  - количество вершин в подграфе, выделенном на рис. 4в пунктирной линией. Для определения величины  $a$  необходимо решить следующую задачу: для заданной вершины степени 3 (вершины  $w$  на рис. 4в) необходимо найти в граничной последовательности смежную с ней вершину такую, что удаление этой пары вершин вместе с инцидентными ребрами делает граф несвязным, т.е. по соответствующему ребру граф можно "разрезать" на два новых графа. Тогда количе -

ство вершин в граничной последовательности между найденными вершинами есть величина  $a$ .

Алгоритм 1  $(G, u, v, g_v)$ .

Вход: Граничная степенная последовательность графа  $G$  с указанием положения вершин  $u$  и  $v$  :

$$\begin{array}{c} u \ v \\ \alpha \ 3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3 \ \beta. \end{array}$$

Выход: Значение  $g_v$ .

Метод:  $g_v \leftarrow 0$ .

Шаг 1. Определить первое вхождение подпоследовательности  $3 \ 3$  при обходе граничной последовательности вправо от вершины  $v$  :

$$\begin{array}{c} u \ v \qquad \qquad \qquad w \\ \alpha \ 3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3 \ \rightarrow \dots \rightarrow 2 \ 3 \ 3 \ \beta. \\ \qquad \qquad \qquad \underbrace{\hspace{10em}}_{i \qquad \qquad \qquad x} \end{array}$$

Позицию вершины  $w$  обозначим  $x$ .

$$g_v \leftarrow i.$$

Шаг 2: Определить первое вхождение подпоследовательности  $3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3$  при обходе граничной последовательности от позиции  $x$  вправо:

$$\begin{array}{c} x \\ \alpha \ 2 \ 3 \ 3 \ \rightarrow \dots \rightarrow 3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3 \ \beta. \end{array}$$

Шаг 3: Удалить из найденной подпоследовательности  $3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3$  все вершины степени 2, а степени 3 уменьшить на 1:

$$\alpha \ 3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3 \ \beta \Rightarrow \alpha \ 2 \ 2 \ \beta.$$

$$\text{Шаг 4: } g_v \leftarrow g_v + 4.$$

Если левая вершина степени 3 в редуцируемой подпоследовательности  $3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3$  на шаге 3 не является вершиной  $w$ , найденной на шаге 1

то обозначить через  $x$  позицию первой вершины степени 3 при обходе граничной последовательности влево от редуцируемой на шаге 3 подпоследовательности  $3 \ 2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 3$ ;

идти на шаг 2

иначе  $\varepsilon_V \leftarrow \varepsilon_V + 1$

все

Конец.

В алгоритме 1 осуществляются последовательное удаление концевых колец в соответствующем подграфе и необходимая коррекция граничной степенной последовательности (шаг 2). Указатель позиции  $X$  используется для ускорения определения следующего кольца-кандидата на удаление. На шаге 4 проверяется наличие колец для удаления. Трудоемкость алгоритма определяется трудоемкостью поиска первого вхождения подпоследовательности 33 на шаге 1 и поиска вхождений подпоследовательности 322223 на шаге 3. Так как число операций для нахождения удаляемых концевых колец подграфа есть величина порядка  $O(\varepsilon_V)$ , то трудоемкость алгоритма 1 составляет  $O(\varepsilon_V)$ .

В алгоритме 2 из пары заданных графов  $G$  и  $H$  строятся всевозможные неизоморфные графы, значения дистанций которых принадлежат интервалу  $[a, b]$ . Для того чтобы порождаемые графы были неизоморфными, используется информация об эквивалентных ребрах в графах  $G$  и  $H$ . Пусть, для простоты,  $G \neq H$ .

Алгоритм 2 ( $G, H, a, b, \text{GRAPHS}, \text{CATAG}, \text{CATAN}$ ).

Вход: 1. Графы  $G, H$  порядков  $P_G$  и  $P_H$ .

2. Целые числа  $a, b$ .

Выход: Множество попарно неизоморфных графов  $\text{GRAPHS}$  и множество ребер  $\text{CATAG} \subseteq X(G)$ ,  $\text{CATAN} \subseteq X(H)$  такие, что если  $L \in \text{GRAPHS}$ , то  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$ ,  $(u, u_1) \in \text{CATAG}$ ,  $(v, v_1) \in \text{CATAN}$  и  $a \leq D(L) \leq b$ .

Метод: 1.  $\text{GRAPHS}, \text{CATAG}, \text{CATAN} \leftarrow \emptyset$ .

2. Определить орбиты группы автоморфизмов графов  $G$  и  $H$ .

3. Выделить в  $G$  и  $H$  ребра, инцидентные вершинам степени 2 с учетом симметрии. Пусть  $K_G \subseteq X(G)$  и  $K_H \subseteq X(H)$  — ребра-кандидаты в графах  $G$  и  $H$  для отождествления.



4. Для неэквивалентных вершин ребер из  $KG$  и  $KH$  вычислить значения их дистанций. Пусть  $D(G) = M$  и  $D(H) = N$ .

5. Для всех  $(u, u_1) \in KG$  цикл

Для всех  $(v, v_1) \in KH$  цикл

Пусть  $D_G(u) = m$  и  $D_H(v) = n$ .

5.1. Выполнить алгоритм 1  $(G, u, u_1, \xi_{u_1})$ .

5.2. Выполнить алгоритм 1  $(H, v, v_1, h_{v_1})$ .

5.3. Вычислить значение  $D(L) = M + N + (p_H - 2)m + (p_G - 2)n + 2(\xi_{u_1} + h_{v_1} - \xi_{u_1} h_{v_1}) - (p_G + p_H) + 1$ .

5.4. Если  $a \leq D(L) \leq b$  то

$L \rightarrow \text{GRAPHS}, (u, u_1) \rightarrow \text{CATAG}, (v, v_1) \rightarrow \text{CATAH}$ .

Все

Все

6. Проверить графы из  $\text{GRAPHS}$  на изоморфность.

Конец.

Подбирая значения  $a$  и  $b$ , алгоритм 2 можно использовать для порождения различных множеств графов. Так, если необходимо определить, существует ли граф, построенный из заданных графов  $G$  и  $H$  со значением дистанции, равным  $k$ , то полагаем  $a = b = k$ .

В [14,15] показано, что для  $k$ -графа  $L$ , состоящего из  $h$  колец, выполняется  $D(L) \leq \psi(h)$ , где  $\psi(h) = \frac{1}{3}(16h^3 + 36h^2 + 26h + 3)$ . Для построения всевозможных графов из  $k$ -графов  $G$  и  $H$  полагаем  $a = 0$  и  $b = \psi(\frac{1}{4}(p_G + p_H) - 1)$ .

На рис.25 показан пример работы алгоритма 2 для заданных графов  $G$  и  $H$ . Ребрами-кандидатами для отождествления в графе  $G$  с учетом симметрии являются  $(1,2)$ ,  $(2,3)$ ,  $(3,4)$  и  $(5,6)$ , а в графе  $H$  -  $(1,2)$ ,  $(2,3)$ . Вершины ребер  $(5,6)$  в графе  $G$  и

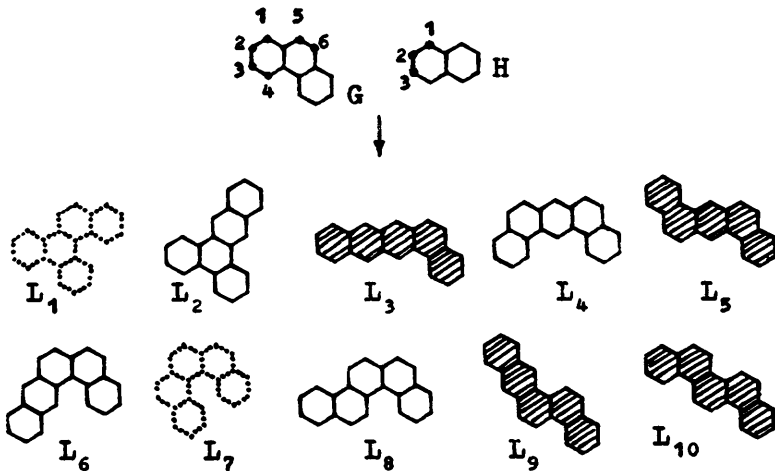


Рис. 25

(2,3) в графе  $H$  принадлежат одной орбите группы автоморфизмов, следовательно, по формуле из п.3 число неизоморфных графов, построенных из  $G$  и  $H$ , должно быть не более 11. Графы  $L_1-L_{10}$  на рис. 25 построены при  $a=0$  и  $b=1011$ , т.е. неизоморфных графов оказалось 10 (отождествление ребер (1,2), (1,2) и (3,4), (1,2) дало изоморфные графы), а графы  $L_2, L_4, L_6, L_8$  построены при  $a=900$  и  $b=960$ . Действительно,  $D(L_1)=883$ ,  $D(L_2)=907$ ,  $D(L_3)=987$ ,  $D(L_4)=955$ ,  $D(L_5)=971$ ,  $D(L_6)=939$ ,  $D(L_7)=899$ ,  $D(L_8)=931$ ,  $D(L_9)=971$ ,  $D(L_{10})=963$ . Если  $K$ -графы представлены не граничной степенной последовательностью, или рассматриваются  $K$ -графы, не вложимые в гексагональную решетку, то для вычисления величины  $\xi_V$  следует использовать другой подходящий алгоритм.

В следующем алгоритме осуществляется построение графов, значение дистанций которых отличается от значения дистанции заданного графа в указанном интервале. Все графы строятся из пары заданных графов  $G$  и  $H$ .

Алгоритм 3  $(G, H, a, b, \text{GRAPHS}, \text{CATAG}, \text{CATAH})$ .

- Вход: 1. Графы  $G, H$  порядков  $P_G$  и  $P_H$ .  
2. Граф  $L = (G, H, (u, u_1), (v, v_1))$ ,  $D(L) = N$ .  
3. Целые числа  $a, b$ .

Выход: Множество попарно неизоморфных графов **GRAPHS** и множества ребер  $\text{CATAG} \subseteq X(G)$ ,  $\text{CATAH} \subseteq X(H)$  такие, что если  $L_1 \in \text{GRAPHS}$ , то  $L_1 = (G, H, (u_2, u_3), (v_2, v_3))$ ,  $L_1 \neq L$ ,  $(u_2, u_3) \in \text{CATAG}$ ,  $(v_2, v_3) \in \text{CATAH}$  и  $a \leq D(L) - D(L_1) \leq b$ .

- Метод: 1. **GRAPHS, CATAG, CATAH**  $\leftarrow \emptyset$ .  
2. Выполнить алгоритм 2  $(G, H, N - b, N - a, \text{GRAPHS}, \text{CATAG}, \text{CATAH})$ .

3. Проверить графы из множества **GRAPHS** на изоморфность.

Конец.

Если в алгоритме 3 положить  $a \leq b$ ,  $b = 0$ , то для любого графа  $L_1 \in \text{GRAPHS}$  выполняется  $D(L_1) \geq D(L)$ , а в случае  $a = 0, b \geq 0$  дистанции полученных графов будут меньше  $D(L_1) \leq D(L)$ . Рассмотрим граф  $L_5$  на рис. 25, и пусть  $a = -16$ ,  $b = 10$ , тогда результатом работы алгоритма 3 будут графы  $L_3, L_9$  и  $L_{10}$ .

### З а к л ю ч е н и е

В работе изучалась дистанция  $k$ -графов - плоских топологических графов, в которых все грани являются соединенными по ребру шестиугольниками и никакие три и более граней не имеют общей вершины. Примером таких графов являются молекулярные графы ката-конденсированных бензоидных углеводородов. Для  $k$ -графа  $L$ , полученного отождествлением ребра  $k$ -графа  $G$  с ребром  $k$ -графа  $H$ , дистанция представлена через

значения дистанций графов  $G$ ,  $H$  и дистанций отождествляемых вершин. Для графа  $L$  рассматривались преобразования, в результате которых  $L$  распадается на графы  $G$  и  $H$ , а в последних отождествляются новые ребра. Среди таких преобразований выделен класс локальных преобразований, при которых структура  $k$ -графа изменяется "незначительно", вследствие чего выражения, описывающие изменение дистанции графа, приобретают простой вид. Для графов  $G$  и  $H$  сформулированы условия, обеспечивающие сохранение дистанции при локальных преобразованиях  $k$ -графов. Результатом является возможность строить  $k$ -графы сколь угодно больших порядков с совпадающими значениями дистанций. В работе приводятся алгоритмы порождения  $k$ -графов из пары заданных  $k$ -графов со значениями дистанций, лежащими в заданном интервале.

#### Л и т е р а т у р а

1. РУВРЭ Д. Следует ли заниматься разработкой топологических индексов? //Химические приложения топологии и теории графов. - М., 1987. - С. 183-205.
2. MEKENYAN O., BONCHEV D., TRINAJSTIĆ N. Topological rules for spirocompounds //Math. Chem. (MATCH). - 1979. - N 6. - P. 93-115.
3. Idem. A topological characterization of cyclic structures with acyclic branches //Math. Chem. (MATCH). - 1981.- - N 11. - P. 145-168.
4. Idem. Topological Characterization of Cyclic Structures //Intern. J. Quantum Chem. - 1980. - Vol. 17. -P.845-893.
5. Idem. Algebraic Characterization of Bridged Polycyclic Compounds //Intern. J. Quantum. Chem. - 1981.-Vol.19.-P.929 - 955.
6. MEKENYAN O., BONCHEV D. Structural Complexity and Molecular Properties of Cyclic Systems with Acyclic Branches //Croat. Chem. Acta. - 1983. -Vol. 56. -P. 237-261.
7. СКОРОБОГАТОВ В.А., ДОБРЫНИН А.А. Влияние структурных преобразований графа на значения его дистанции //Анализ данных в экспертных системах. - Новосибирск, 1986. -Вып. 117: Вычислительные системы. -С. 103-113.

8. ДОБРЫНИН А.А. Дистанция молекулярных графов полициклических соединений //Там же. - С. 114-122.

9. POLANSKY O.E., BONCHEV D. The Wiener Number of Graphs. 1.General Theory and Changes Due to Graph Operations //Math. Chem. (MATCH). - 1986. - N 21. -P. 133-186.

10. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В. Графы полициклических соединений //Вопросы алгоритмического анализа структурной информации.-Новосибирск, 1987.-Вып. 119: Вычислительные системы. -С. 71-90.

11. GUTMAN J., MARKOVIĆ S., LUKOVIĆ U., RADIVOJTVIĆ S., BANIĆ S. On Wiener Numbers of Benzenoid Hydrocarbons //ZBOR - NIK RADOWA Prirodno-matematičkog fakulteta u Kragujevcu.-1987. -Vol. 8. -P. 15-34.

12. KNOP J.V., MULLER W.R., SZYMANSKY K., TRINAJSTIĆ N. Computer generation of certain classes of molecules. -Zagreb: SKTH/Kemija u industrija. - 1985. - 166 p.

13. СКОРОБОГАТОВ В.А., ХВОРОСТОВ П.В. Анализ метрических свойств графов //Методы обнаружения закономерностей с помощью ЭВМ. - Новосибирск, 1981. -Вып. 91: Вычислительные системы. С. 3-20.

14. GUTMAN I. Wiener Numbers of Benzenoid Hydrocarbons:Two Theorems //Chemical Physics Letters. -1987. - Vol. 136. -N2. -P. 134-136.

15. GUTMAN I., POLANSKY O.E. Wiener Numbers of Polyacens and Related Benzenoid Molecules //Math. Chem. (MATCH). - 1986. - N 20. -P. 115-123.

Поступила в ред.-изд.отд.

31 марта 1988 года