

УДК 519.1

ИЗМЕНЕНИЕ ДИСТАНЦИИ ПРИ ЛОКАЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЯХ
ГРАФОВ С ЦИКЛАМИ НЕЧЕТНОЙ ДЛИНЫ

А.А.Добрынин

В в е д е н и е

Метрические инварианты графа, основанные на расстояниях между его вершинами, используются для приближенной характеристики его структуры. Как правило, такие инварианты представляют собой функции на множестве связных графов, ставящие в соответствие графу число или набор чисел. Одним из хорошо известных метрических инвариантов является дистанция графа, равная сумме расстояний между всеми парами его вершин. Исследования дистанции графов включают нахождение верхних и нижних оценок значений инварианта для различных классов графов, определение реализуемости чисел как значений инварианта на графах, изучение изменений дистанции при операциях над графами и т.п. [1-8]. Важной характеристикой инварианта является его способность различать неизоморфные графы. Говорят, что инвариант вырождается на заданном множестве графов, если значения инварианта совпадают для всех графов этого множества. Одним из способов изучения вырождения индекса является компьютерная генерация всех графов заданного класса с последующим вычислением значений инварианта. Так как обычно количество графов в интересных и важных для приложений классах графов растет экспоненциально с ростом чи-

сла вершин, то такой метод используется для графов небольших размеров. Другой подход состоит в указании способа построения графов с произвольным числом вершин и совпадающими значениями инварианта. Для этого из некоторого класса выбирается граф, который далее подвергается различным преобразованиям. Если при этом изменение дистанции удастся описать аналитическими выражениями, то тогда пытаются найти условия, обеспечивающие вырождение инварианта.

Дистанция графов достаточно хорошо характеризует компактность структуры, поэтому ее часто используют в приложениях для установления структурного подобия объектов или отношений между ними. Известно применение дистанции графов в химии, биологии, социологии и в других областях [6,7]. Так, активно развивающимся направлением в современной математической химии является построение топологических индексов (инвариантов) молекулярных графов химических соединений [9-13]. В основе такого подхода лежит постулат, согласно которому соединения со сходной структурой должны обладать близкими свойствами. Аналогом дистанции графа в органической химии является топологический индекс молекулярного графа, называемый числом Винера (индексом Винера). Большое количество работ посвящено изучению свойств индекса Винера для графов полициклических систем. Среди них основное внимание уделяется графам гексагональных систем, соответствующим молекулярным графам бензоидных (ароматических) углеводородов [6-18]. Для соединений этого класса установлены зависимости между их физико-химическими свойствами и значениями индекса. Известно использование индекса Винера для конструирования соединений с заданными свойствами (в том числе лекарств), описания конфигураций макромолекул, моделирования роста кристаллов. Успехи в применении индекса Винера стали причиной изучения его математических свойств для различных классов графов.

Исследования дистанции для графов с циклами нечетной длины (пятичленными циклами) были начаты в [19]. В настоящей работе будут продолжены исследования свойств дистанции графов неразветвленных пентагональных систем. Для графов этого класса будут определены преобразования, при которых структура графов меняется "незначительно". Основная цель состоит в получении аналитических выражений для описания изменения дистанции и определении условий, при которых инвариант вырождается. В работе используется подход, предложенный в [16] для изучения изменения дистанции при преобразованиях графов гексагональных систем.

1. Основные определения и вспомогательные результаты

Рассматриваются конечные связные плоские графы G без петель и кратных ребер с множеством вершин $V(G)$. Число вершин графа $p_G = |V(G)|$ называется его *порядком*. Определим класс графов, в которых все внутренние грани являются пятиугольными, и две произвольные грани либо являются смежными, т.е. имеют единственное общее ребро, либо не имеют общих вершин. Кроме того, никакие три пятиугольные грани не имеют общей вершины. Поставив в соответствие каждой пятиугольной грани новую вершину и соединив такие вершины, если соответствующие грани являются смежными, получим характеристический граф исходного графа. Границу пятиугольной грани будем называть кольцом графа. Обозначим P_r класс графов, состоящих из r колец, для которых их характеристический граф изоморфен простой цепи. Концевым кольцам соответствуют вершины характеристического графа степени один. Если кольца графа изображать правильными пятиугольниками, то ребра графа могут пересекаться. Графы класса P_r моделируют молекулярные структуры неразветвленных полициклических соединений. На рис.1 классу P_r принадлежат графы G_1 и G_2 . Порядок произвольного гра-

Ф_а из r колец равен $3r + 2$, и все вершины графа имеют степень 2 или 3.

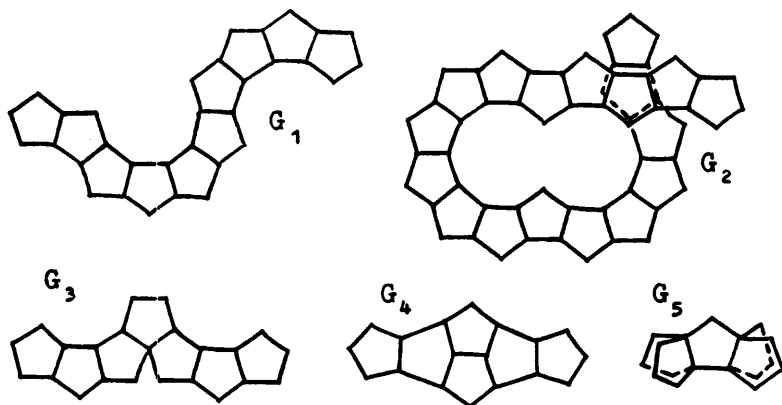


Рис. 1

Под расстоянием $d_G(u, v)$ между вершинами u и v в графе G понимается длина кратчайшей по числу ребер цепи, соединяющей вершины u и v в G . Дистанция вершины v в графе G есть сумма расстояний от v до всех других вершин графа, $D_G(v) = \sum_{u \in V(G)} d_G(u, v)$. Дистанция графа G есть его инвариант, определяемый как сумма расстояний между всеми парами вершин:

$$D(G) = \frac{1}{2} \sum_{u, v \in V(G)} d_G(u, v) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} D_G(v).$$

Этот инвариант именуется также трансмиссией графа (без множителя $1/2$) или числом Винера.

Определим локальные преобразования для графов класса пентагональных систем. Пусть граф L принадлежит классу P_r . Разрежем граф L по произвольному ребру, обе вершины которого имеют степень 3. В результате граф L распадется на два новых графа G и H из класса пентагональных систем с меньшим числом колец.

Пусть далее графы G и H вновь соединяются друг с другом путем отождествления одного ребра тех же концевых колец. Отождествляемые ребра в G и H должны быть инцидентны только вершинам степени 2. Получаемый граф L_1 есть результат локального преобразования графа L . Таким образом, графы L и L_1 имеют одинаковое число пятиугольных колец и составлены из графов G и H . На рис.2 приводятся результаты локальных преобразований графа G_1

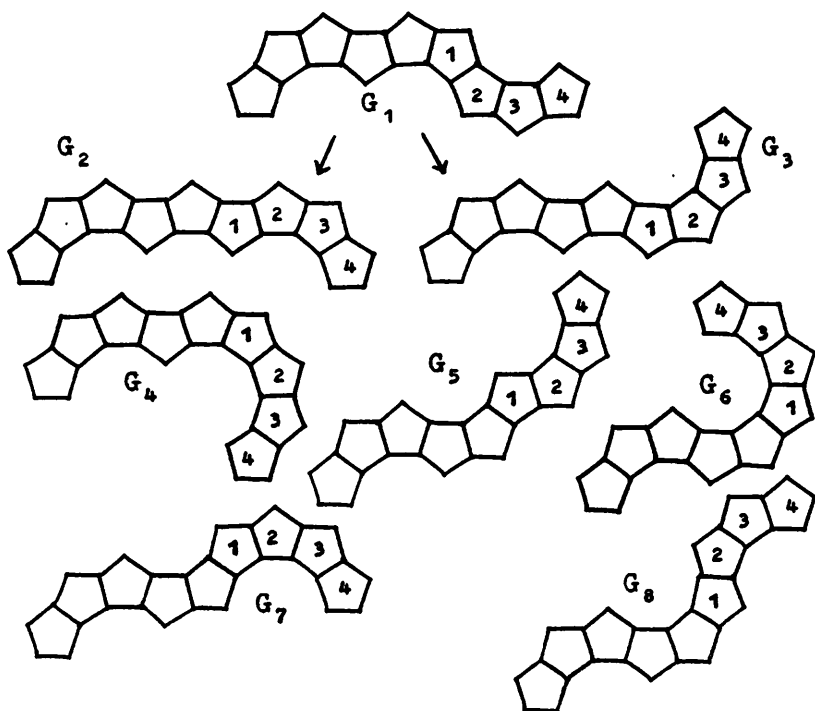


Рис. 2

с нумерацией колец подграфа H . Так как граф L разбивается на два графа, в которых далее отождествляются ребра тех же концевых колец, то структура графов L и L_1 остается "похожей". Оче-

видно, с помощью локальных преобразований для фиксированного разбиения графа L можно получить не более 7 других графов. Например, графы G_1 и G_5 на рис. 2 являются изоморфными. Локальные преобразования являются замкнутыми в классе графов P_r , т.е. результирующий граф всегда принадлежит P_r . Произвольный граф из класса P_r может быть переведен последовательным применением локальных преобразований в любой другой граф этого класса.

Так как нас часто будет интересовать не весь граф в целом, а только некоторая его часть, то пятиугольными кольцами будет изображаться часть графа, определяющая данное локальное преобразование. Часть графа, условно показанная в виде круга, может быть произвольным графом класса P_r (см. рис.3). В частности, эти части могут отсутствовать.

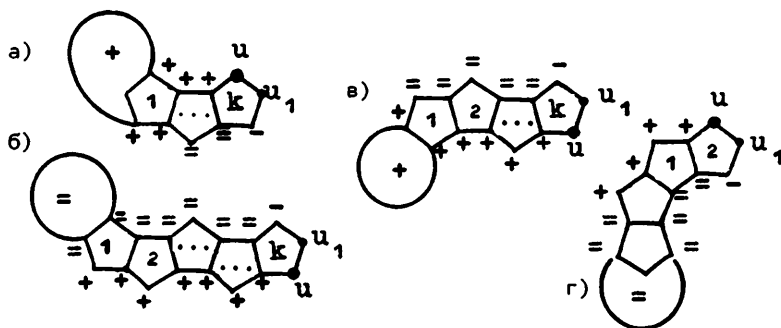


Рис. 3

Пусть u и u_1 являются произвольными смежными вершинами в графе $G \in P_r$. Определим для вершин u и u_1 следующие подмножества вершин $V_+(u, u_1) = \{v \mid d(v, u) = d(v, u_1) - 1\}$, $V_-(u, u_1) = \{v \mid d(v, u) = d(v, u_1)\}$ и $V_+(u, u_1) = \{v \mid d(v, u) = d(v, u_1) + 1\}$. Если необходимо различать графы, то множество $V_+(u, u_1)$ будет обозначаться как $V_+(G, u, u_1)$ или $V_+(H, u, u_1)$, а его мощность как $|V_+(G, u, u_1)| = g_+(u, u_1)$ или $|V_+(H, u, u_1)| = h_+(u, u_1)$.

и т.п. Будем считать, что вершины u и u_1 в указанные множества не включаются. Тогда эти множества попарно не пересекаются и $V(G) = V_+(u, u_1) \cup V_=(u, u_1) \cup V_-(u, u_1) \cup \{u, u_1\}$. Такие же множества можно определить для вершины u_1 . Очевидно, что $V_=(u, u_1) = V_=(u_1, u)$, $V_-(u, u_1) = V_+(u_1, u)$ и $V_+(u, u_1) = V_-(u_1, u)$.

ЛЕММА 1. Распределение вершин графа G по множествам $V_+(u, u_1)$, $V_=(u, u_1)$ и $V_-(u, u_1)$ для смежных вершин u и u_1 концевых кольца определяется четырьмя конфигурациями, изображенными на рис. 3 (каждая вершина отмечена знаком соответствующего множества):

а) для графа на рис. 3а выполняется $g_-(u, u_1) = 1$, $g_=(u, u_1) = 2$ и $g_+(u, u_1) = 3r - 3$;

б) число линейно соединенных колец k в графе на рис. 3б является нечетным, $k \geq 5$. Тогда выполняется $g_+(u, u_1) = (3k-1)/2$, $g_-(u, u_1) = 1$ и $g_=(u, u_1) = 3r - (3k + 1)/2$;

в) число линейно соединенных колец k в графе на рис. 3в является четным, $k \geq 4$. В этом случае имеем $g_+(u, u_1) = 3(r-k/2)$, $g_-(u, u_1) = 1$ и $g_=(u, u_1) = 3k/2 - 1$;

г) для случая с $k = 2$ на рис. 3г справедливо $g_+(u, u_1) = 4$, $g_-(u, u_1) = 1$ и $g_=(u, u_1) = 3r - 5$.

Пусть вершины u и u_1 степени 2 принадлежат концевому кольцу графа и $d(u, u_1) = 2$. Положение этих вершин в графе обеспечивает для множеств $V_+(u, u_1)$, $V_=(u, u_1)$ и $V_-(u, u_1)$ выполнение всех указанных выше свойств.

ЛЕММА 2. Распределение вершин графа G по множествам $V_+(u, u_1)$, $V_=(u, u_1)$ и $V_-(u, u_1)$ для вершин u и u_1 концевых кольца, $d(u, u_1) = 2$, определяется тремя конфигурациями, изображенными на рис. 4 (каждая вершина отмечена знаком соответствующего множества):

а) число линейно соединенных колец k в графе на рис. 4а является нечетным, $k \geq 5$. Тогда выполняется $g_+(u, u_1) = 3r - (3k+1)/2$, $g_-(u, u_1) = 2$ и $g_=(u, u_1) = 3(k-1)/2$;

б) число линейно соединенных колец k в графе на рис. 4б является четным, $k \geq 4$. В этом случае имеем $g_+(u, u_1) = 3k/2 - 1$, $g_-(u, u_1) = 2$ и $g_=(u, u_1) = 3(r-k/2) - 1$;

в) для случая $k = 2$ (рис. 4в) справедливо $g_-(u, u_1) = 2$, $g_+(u, u_1) = 3r - 5$ и $g_=(u, u_1) = 3$.

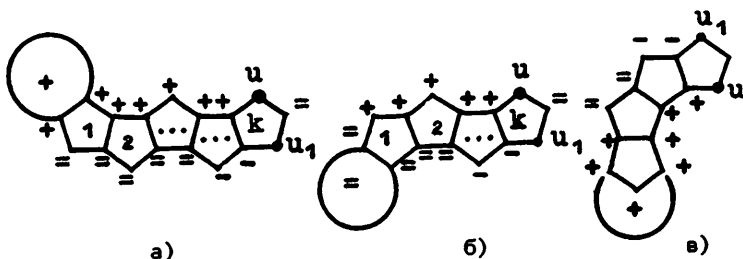


Рис. 4

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО лемм 1 и 2 непосредственно следует из структуры графов на рис. 3, 4. ■

Часть графа, занумерованного на рис. 3, 4 числами $1, 2, \dots, k$ будем называть *линейной частью* длины k графа. Согласно приведенным выше леммам разность дистанций вершин степени 2 в концевом кольце графа линейно зависит от числа колец графа и числа колец в его линейной части.

ЛЕММА 3. Разность дистанций вершин u и u_1 степени 2 в концевом кольце графа может быть представлена в виде

$$D(u) - D(u_1) = g_-(u, u_1) - g_+(u, u_1) = g_+(u_1, u) - g_-(u_1, u).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для разности дистанций вершин u и u_1 имеем

$$\begin{aligned}
 D(u) - D(u_1) &= \sum_{v \in V(G)} d(u, v) - \sum_{v \in V(G)} d(u_1, v) = \\
 &= \sum_{v \in V_+(u, u_1)} d(u, v) + \sum_{v \in V_-(u, u_1)} d(u, v) + \\
 &+ \sum_{v \in V_=(u, u_1)} d(u, v) + d(u, u_1) - \\
 &- \left(\sum_{v \in V_+(u, u_1)} d(u_1, v) + \sum_{v \in V_-(u, u_1)} d(u_1, v) + \right. \\
 &+ \left. \sum_{v \in V_=(u, u_1)} d(u_1, v) + d(u_1, u) \right) = \\
 &= \sum_{v \in V_+(u, u_1)} d(u, v) + \sum_{v \in V_-(u, u_1)} d(u, v) - \\
 &- \sum_{v \in V_+(u, u_1)} (d(u, v) - 1) - \sum_{v \in V_-(u, u_1)} (d(u, v) + 1) = \\
 &= |V_+(u, u_1)| - |V_-(u, u_1)|. \blacksquare
 \end{aligned}$$

2. Дистанция графа, образованного из двух графов соединением концевых колец

Пусть граф $L \in P_\Gamma$ образован из графов G и H отождествлением ребра (u, v) графа G и ребра (u, v) графа H как показано на рис. 5. Дистанцию графа L можно представить через дистанцию графов G и H и дистанции вершин, инцидентных отождествляемым ребрам.

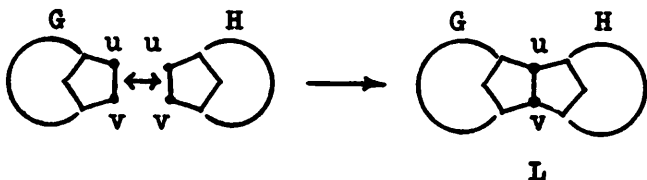


Рис. 5

ТЕОРЕМА. Для дистанции графа $L \in P_r$ выполняется равенство

$$D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(u) + \\ + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, v),$$

где $\varphi(u, v) = g_-(u, v)h_-(u, v) + 2g_-(u, v)h_-(u, v) + \\ + h_-(u, v)g_-(u, v).$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Дистанцию графа L можно представить как

$$2D(L) = \sum_{w \in V(L)} D_L(w) = \sum_{w \in V(G) - \{u, v\}} D_L(w) + \\ + \sum_{w \in V(H) - \{u, v\}} D_L(w) + D_L(u) + D_L(v). \quad (1)$$

Вычислим каждое слагаемое в выражении (1). Для вычисления первой суммы рассмотрим дистанции вершин из множеств $V_+(G, u, v)$, $V_-(G, u, v)$ и $V_=(G, u, v)$. Обозначим для краткости $h_-(u, v) = h_-$, $g_+(u, v) = g_+$ и т.д.

Пусть вершина $x \in V_+(G, u, v)$, тогда можно записать

$$D_L(x) = D_G(x) + \sum_{w \in V(L) - V(G)} d_L(x, w) = D_G(x) + \\ + \sum_{w \in V_+(H, u, v)} (d_G(x, u) + d_H(u, w)) + \\ + \sum_{w \in V_=(H, u, v)} (d_G(x, u) + d_H(u, w)) + \\ + \sum_{w \in V_-(H, u, v)} (d_G(x, u) + d_H(u, w)) = \\ = D_G(x) + d_G(x, u)h_+ + d_G(x, u)h_- + \\ + d_G(x, u)h_+ + \sum_{w \in V(H) - \{u, v\}} d_H(u, w) = \\ = D_G(x) + (p_H - 2)d_G(x, u) + (D_H(u) - 1). \quad (2)$$

Пусть вершина $x \in V_{\pm}(G, u, v)$, тогда аналогично имеем

$$\begin{aligned} D_L(x) &= D_G(x) + d_G(x, u)h_+ + \\ &+ \sum_{w \in V_+(H, u, v)} d_H(u, w) + d_G(x, u)h_- + \\ &+ \sum_{w \in V_=(H, u, v)} d_H(u, w) + d_G(x, v)h_- + \\ &+ \sum_{w \in V_-(H, u, v)} d_H(v, w). \end{aligned}$$

Так как $d_G(x, v) = d_G(x, u)$ и $\sum_{w \in V_-(H, u, v)} d_H(v, w) =$
 $= \sum_{w \in V_-(H, u, v)} d_H(u, w) - h_-$, то

$$D_L(x) = D_G(x) + (p_H - 2)d_G(x, u) + (D_H(u) - 1) - h_-.$$

Пусть вершина $x \in V_-(G, u, v)$, тогда выполняются равенства

$$\begin{aligned} D_L(x) &= D_G(x) + \sum_{w \in V_+(H, u, v)} (d_G(x, v) + d_H(v, w)) + \\ &+ \sum_{w \in V_=(H, u, v)} (d_G(x, v) + d_H(v, w)) + \\ &+ \sum_{w \in V_-(H, u, v)} (d_G(x, v) + d_H(v, w)) = D_G(x) + \\ &+ \sum_{w \in V_+(H, u, v)} ((d_G(x, u) - 1) + (d_H(u, w) + 1)) + \\ &+ \sum_{w \in V_=(H, u, v)} ((d_G(x, u) - 1) + d_H(u, w)) + \\ &+ \sum_{w \in V_-(H, u, v)} ((d_G(x, u) - 1) + (d_H(u, w) - 1)) = \\ &= D_G(x) + (p_H - 2)d_G(x, u) + (D_H(u) - 1) - 2h_- - h_- = \end{aligned} \quad (4)$$

Суммируем дистанции вершин в каждом из множеств $V_+(G, u, v)$, $V_=(G, u, v)$ и $V_-(G, u, v)$, используя равенства (2)-(4):

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V_+(G, u, v)} D_L(x) &= \sum_{x \in V_+(G, u, v)} D_G(x) + \\
&+ (p_H - 2) \sum_{x \in V_+(G, u, v)} d_G(x, u) + \\
&+ g_+(D_H(u) - 1), \tag{5}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V_-(G, u, v)} D_L(x) &= \sum_{x \in V_-(G, u, v)} D_G(x) + \\
&+ (p_H - 2) \sum_{x \in V_-(G, u, v)} d_G(x, u) + \\
&+ g_-(D_H(u) - 1) - g_{-h_-}, \tag{6}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V_-(G, u, v)} D_L(x) &= \sum_{x \in V_-(G, u, v)} D_G(x) + \\
&+ (p_H - 2) \sum_{x \in V_-(G, u, v)} d_G(x, u) + \\
&+ g_-(D_H(u) - 1) - 2g_{-h_-} - g_{-h_-}. \tag{7}
\end{aligned}$$

Суммируя равенства (5)-(7) и учитывая, что

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V_+(G, u, v)} D_L(x) + \sum_{x \in V_-(G, u, v)} D_L(x) + \\
+ \sum_{x \in V_-(G, u, v)} D_L(x) &= \\
= \sum_{x \in V(G) - \{u, v\}} D_L(x),
\end{aligned}$$

получим выражение для первой суммы из правой части (1):

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V(G) - \{u, v\}} D_L(x) &= \sum_{x \in V(G) - \{u, v\}} D_G(x) + \\
&+ (p_H - 2) \sum_{x \in V(G) - \{u, v\}} d_G(x, u) + \\
&+ (p_G - 2)(D_H(u) - 1) - g_{-h_-} - 2g_{-h_-} - g_{-h_-} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{x \in V(G) - \{u, v\}} D_G(x) + (p_H - 2)D_G(u) + \\
&+ (p_G - 2)D_H(u) - (p_H + p_G - 4) - \\
&- g_- h_- - 2g_- h_- - g_- h_-. \quad (8)
\end{aligned}$$

Так как подграфы G и H расположены в графе L симметрично (рис. 5), то для дистанций вершин из множеств $V_+(H, u, v)$, $V_-(H, u, v)$ и $V_0(H, u, v)$ все рассуждения аналогичны. В результате получим

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V(H) - \{u, v\}} D_L(x) &= \sum_{x \in V(H) - \{u, v\}} D_H(x) + \\
&+ (p_G - 2)D_H(u) + (p_H - 2)D_G(u) - \\
&- (p_G + p_H - 4) - h_- g_- - 2h_- g_- - h_- g_-. \quad (9)
\end{aligned}$$

Суммируя равенства (8) и (9), имеем

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V(G) - \{u, v\}} D_L(x) + \sum_{x \in V(H) - \{u, v\}} D_L(x) &= \\
&= \sum_{x \in V(G) - \{u, v\}} D_G(x) + \sum_{x \in V(H) - \{u, v\}} D_H(x) + \\
&+ 2(p_G - 2)D_H(u) + 2(p_H - 2)D_G(u) - \\
&- 2(p_G + p_H - 4) - (2g_- h_- - 4g_- h_- - 2g_- h_-). \quad (10)
\end{aligned}$$

Подставляя в (1) значения для дистанций вершин из (10) и учитывая, что $D_L(u) = D_G(u) + D_H(u) - 1$ и $D_L(v) = D_G(v) + D_H(v) - 1$, для дистанции графа L получим окончательное выражение $2D(L) =$
 $= 2D(G) + 2D(H) + 2(p_G - 2)D_H(u) + 2(p_H - 2)D_G(u) - 2(p_G + p_H - 4) -$
 $- 2(g_- h_- + 2g_- h_- + h_- g_-) - 2. \blacksquare$

СЛЕДСТВИЕ. Если графы $L, L_1 \in P_r$ получены друг из друга локальными преобразованиями, то $D(L) - D(L_1) =$
 $= f(p_G, p_H, g_-, g_+, h_-, h_+, h_+)$, где f есть полином второй степени.

Для доказательства следствия достаточно применить теорему и лемму 3.

Таким образом, разность значений дистанции графов определяется только распределением вершин по некоторым множествам и не зависит в явном виде от расстояний между вершинами графов.

3. Изменение дистанции при локальных преобразованиях графа

Рассмотрим изменение дистанции при локальных преобразованиях структуры графов. Основное внимание будет уделяться преобразованиям, при которых возможно вырождение инварианта.

Графы класса P_r с совпадающими значениями дистанции впервые появляются при $r = 9$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. Если для графов пентагональных систем L и L_1 выполняется $D(L) = D(L_1)$, то $r_L \geq 9$ и $r_{L_1} \geq 9$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Утверждение следует из результатов конструктивного перечисления и вычисления дистанции для всех графов пентагональных систем с числом колец $3 \leq r_L \leq 9$ [19]. ■

Рассмотрим схему локального преобразования на рис.6а. При изображении графов в отождествляемом ребре большим кружком будут выделяться вершины, для которых в формуле теоремы указана их дистанция, а малым кружком отмечаться смежные вершины.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис.6а. Тогда для разности дистанции выполняется $D(L) - D(L_1) = 9(r_H - r_G - 1)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанцию графов L и L_1 можно представить через дистанцию G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_1) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v_1, w)$.

Тогда $D(L)-D(L_1) = (p_G-2)(D_H(v) - D_H(v_1)) - \varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_1, v_1, w)$. По леммам 3 и 1 (случай "г") имеем $D_H(v)-D_H(v_1) = 4-3r_H$. Применяя лемму 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$, находим значения параметров $g_- = 2$, $g_+ = 3r_G - 3$ и $h_- = 2$, $h_+ = 1$. Тогда $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 12r_G - 10$. Для величины $\varphi(u, u_1, v_1, w)$ имеем $g_- = 2$, $g_+ = 3r_G - 3$ и $h_- = 3r_H - 5$, $h_+ = 4$, откуда $\varphi(u, u_1, v_1, w) = 9r_G r_H + 9r_G - 9r_H - 1$. Подставляя необходимые значения в выражение для разности дистанций графов L и L_1 , получим $D(L)-D(L_1) = -9r_G + 9r_H - 9$. ■

Отметим, что в рассмотренном локальном преобразовании гоаф H присоединяется к одному и тому же ребру графа G . Вырождение дистанции определяется для этого преобразования простым соотношением между числом колец графов G и H .

СЛЕДСТВИЕ 1. Для графов L и L_1 на рис. 6а выполняется равенство $D(L) = D(L_1)$ тогда и только тогда, когда $r_H - r_G = 1$.

СЛЕДСТВИЕ 2. Если $D(L) = D(L_1)$, то графы L и L_1 содержат нечетное число колец.

Впервые графы с совпадающими значениями дистанции при данном преобразовании появляются среди графов с числом колец равным 9. Из схемы преобразования следует, что для $r_L = 9$ можно построить 4 пары таких графов. Однако, за исключением единственного случая графы в таких парах будут изоморфны друг другу (см. рис. 6б). Для наглядности конфигурации из пятиугольных колец будут выделяться на рисунке фрагментами характеристического графа. Здесь и далее под числом колец графов указывается значение инварианта. Для $r_L = 11$ возможно построение 10 пар графов с совпадающей дистанцией, но неизоморфные графы существуют только в 6 парах. На рис. 6в приводятся примеры таких графов. Графы с $D(L) = 3501$ показывают, что граф L можно разбить на подграфы G и H разным способом для осуществления одного и того же локального преобразования.

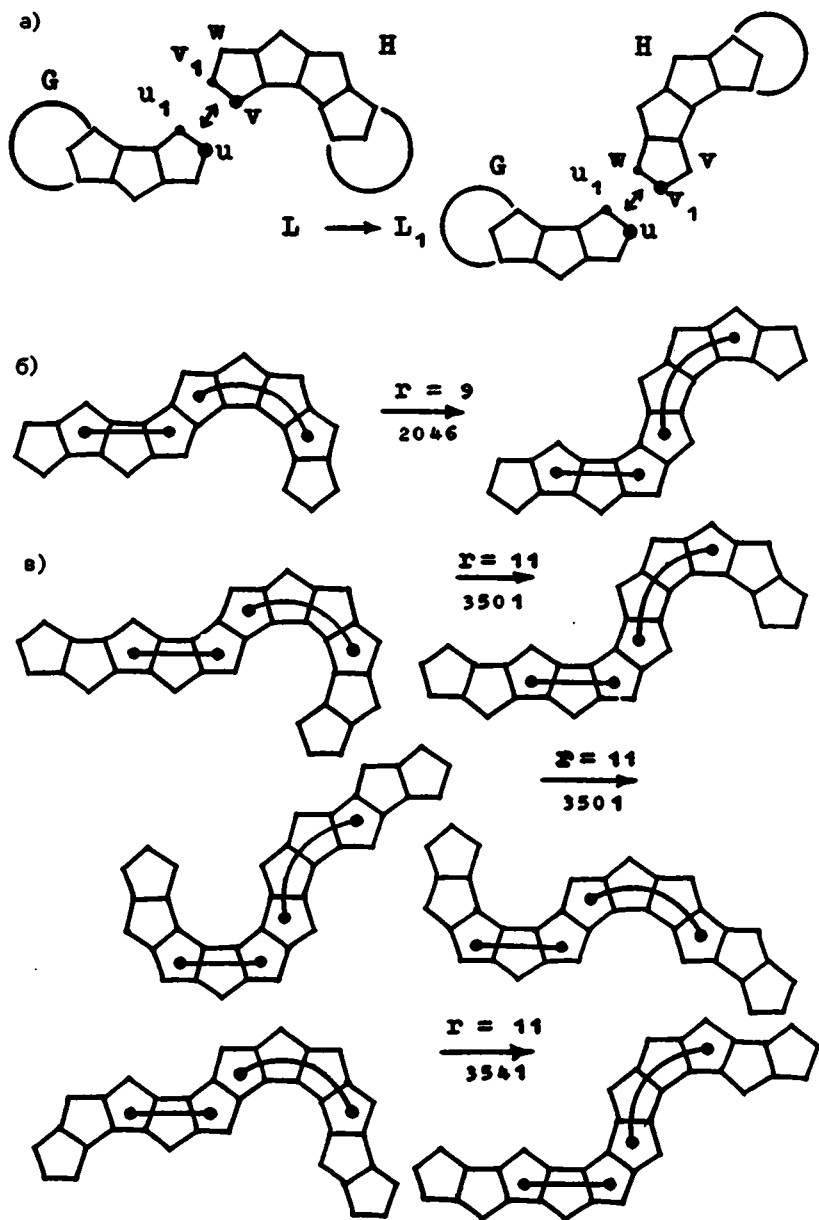


Рис.6. Локальное преобразование графов для утверждения 2

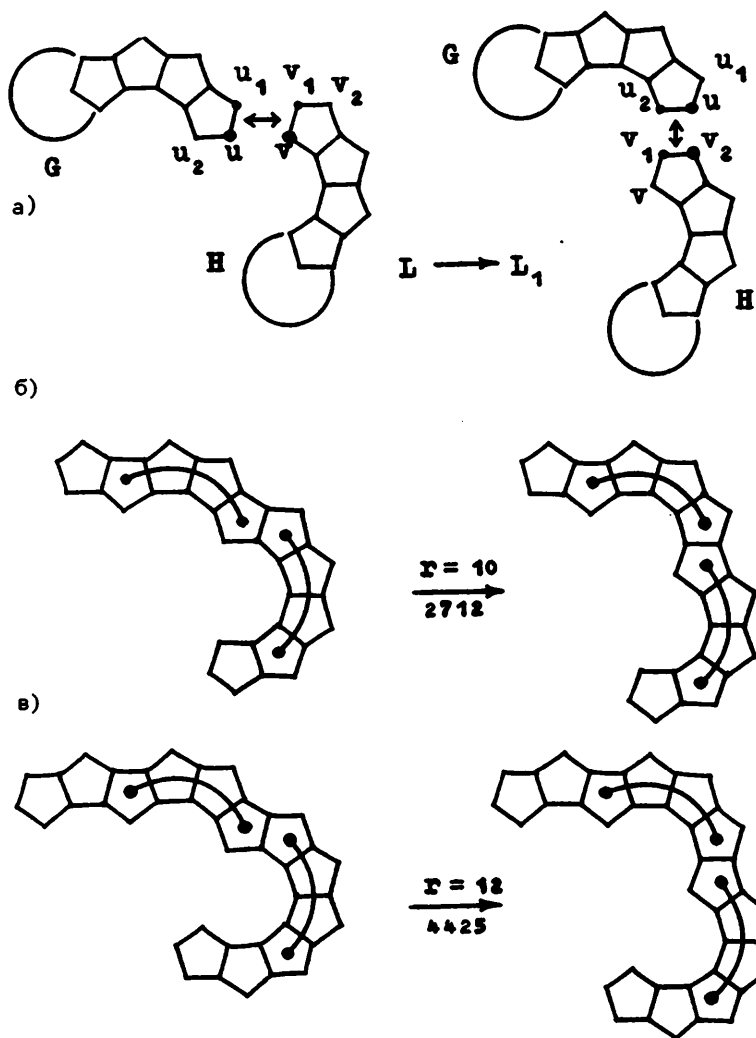


Рис. 7

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис. 7а. Тогда для разности дистанции выполняется $D(L) - D(L_1) = 9(r_G - r_H)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_2) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_2, v_2, v_1)$.

Тогда $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_2)) - \varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_2, v_2, v_1)$. По леммам 3 и 2 (случай "в") имеем $D_H(v) - D_H(v_2) = -3r_H + 7$. Используя лемму 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$, находим параметры $g_- = 3r_G - 5$, $g_+ = 4$ и $h_- = 2$, $h_+ = 1$. Следовательно, $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 3r_G + 11$. Для величины $\varphi(u, u_2, v_2, v_1)$ имеем $g_- = 2$, $g_+ = 3r_G - 3$, $h_- = 3r_H - 5$, $h_+ = 1$, откуда $\varphi(u, u_2, v_2, v_1) = 9r_G r_H - 9r_G - 9r_H + 11$. Подставляя необходимые значения в выражение для разности дистанций графов L и L_1 , получим $D(L) - D(L_1) = 9r_G - 9r_H$. ■

Для вырождения дистанции при данном преобразовании достаточно совпадения числа колец в графах G и H .

СЛЕДСТВИЕ 1. Для графов L и L_1 на рис. 7а выполняется равенство $D(L) = D(L_1)$ тогда и только тогда, когда $r_H = r_G$.

СЛЕДСТВИЕ 2. Если $D(L) = D(L_1)$, то графы L и L_1 содержат четное число колец.

Такие графы впервые появляются в классе графов с числом колец $r_L = 10$. Для графов с 10 кольцами существует единственная пара (см. рис. 7б), для $r_L = 12$ существует 5 пар графов с данным свойством, одна из которых показана на рис. 7в.

УТВЕРЖДЕНИЕ 4. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис. 8а (числа k_G и k_H являются четными и $k_G \geq 4$, $k_H \geq 4$). Тогда для разности дистанций выполняется $D(L) - D(L_1) = 9(k_G - k_H)/2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде $D(L) =$

$$= D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1) \\ \text{и } D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_2) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \\ - \varphi(u, u_2, v_2, v_1).$$

Тогда $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_2)) - \varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_2, v_2, v_1)$. По леммам 3 и 2 (случай "б") имеем $D_H(v) - D_H(v_2) = 3(1 - k_H/2)$. Применяя лемму 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$, находим значения параметров $g_+ = 3k_G/2 - 1$, $g_- = 3(r_G - k_G/2)$ и $h_+ = 2$, $h_- = 1$. Следовательно, $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 12r_G - 9k_G/2 - 1$. Для величины $\varphi(u, u_2, v_2, v_1)$ имеем $g_+ = 2$, $g_- = 3r_G - 3$ и $h_+ = 3k_H/2 - 1$, $h_- = 1$, откуда $\varphi(u, u_2, v_2, v_1) = 9r_G r_H/2 + 3r_G - 9r_H/2 - 1$. Подставляя необходимые значения в формулу для разности дистанции графов L и L_1 , получим $D(L) - D(L_1) = 9k_G/2 - 9k_H/2$. ■

Изменение дистанции графов L и L_1 не зависит от количества колец в графах G и H , а определяется только количеством колец в линейной части графов G и H .

СЛЕДСТВИЕ. Для графов L и L_1 на рис. 8а выполняется равенство $D(L) = D(L_1)$ тогда и только тогда, когда $k_H = k_G$.

Впервые такие графы появляются в классе графов с числом колец 9 (единственная пара, рис. 8б). Для $r_L = 10$ существуют две пары графов, одна из которых показана на рис. 8в. Примеры графов с данным свойством и числом колец 11 и 12 приводятся на рис. 8г.

УТВЕРЖДЕНИЕ 5. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис. 9а (число k_G является нечетным и $k_G \geq 5$, $r_H \geq 4$). Тогда для разности дистанции выполняется $D(L) - D(L_1) = 9(r_G - r_H - (k_G - 3)/2)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде

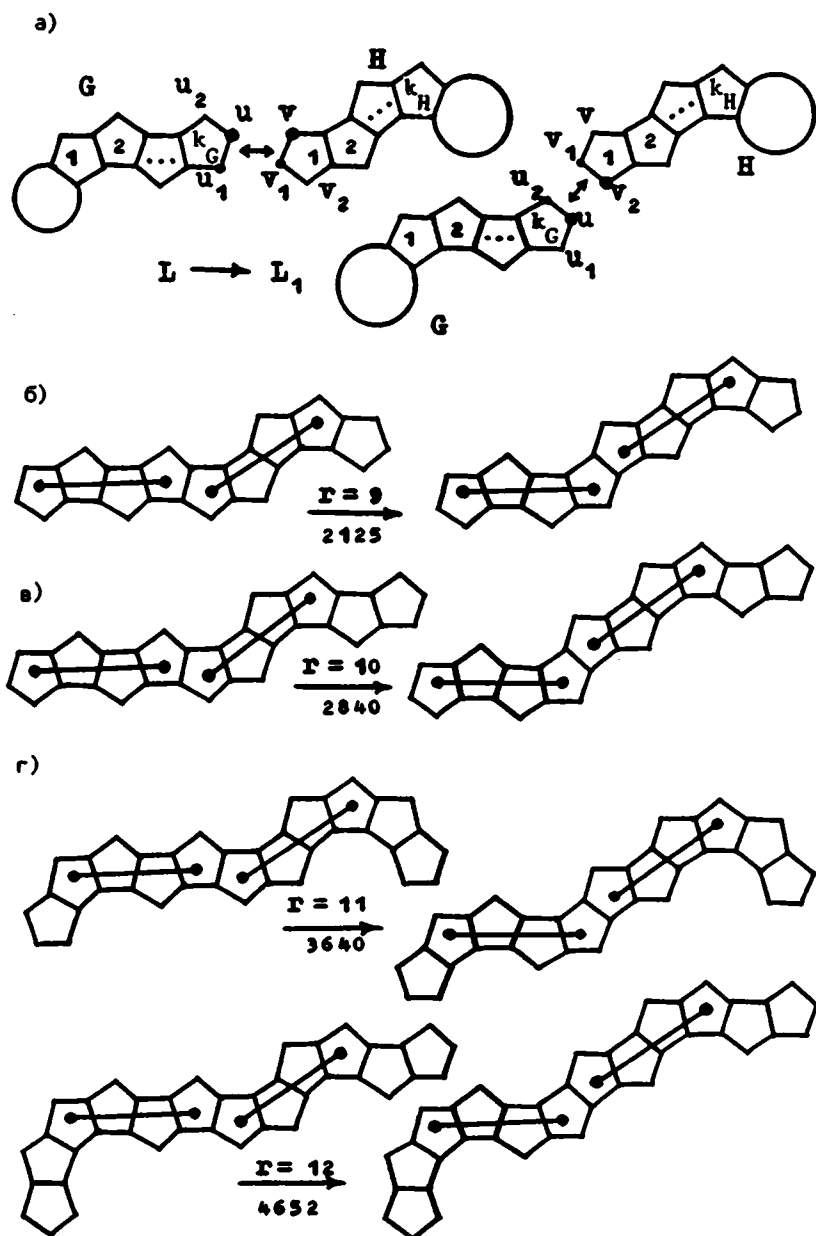


Рис.8. Локальное преобразование графов для утверждения 4

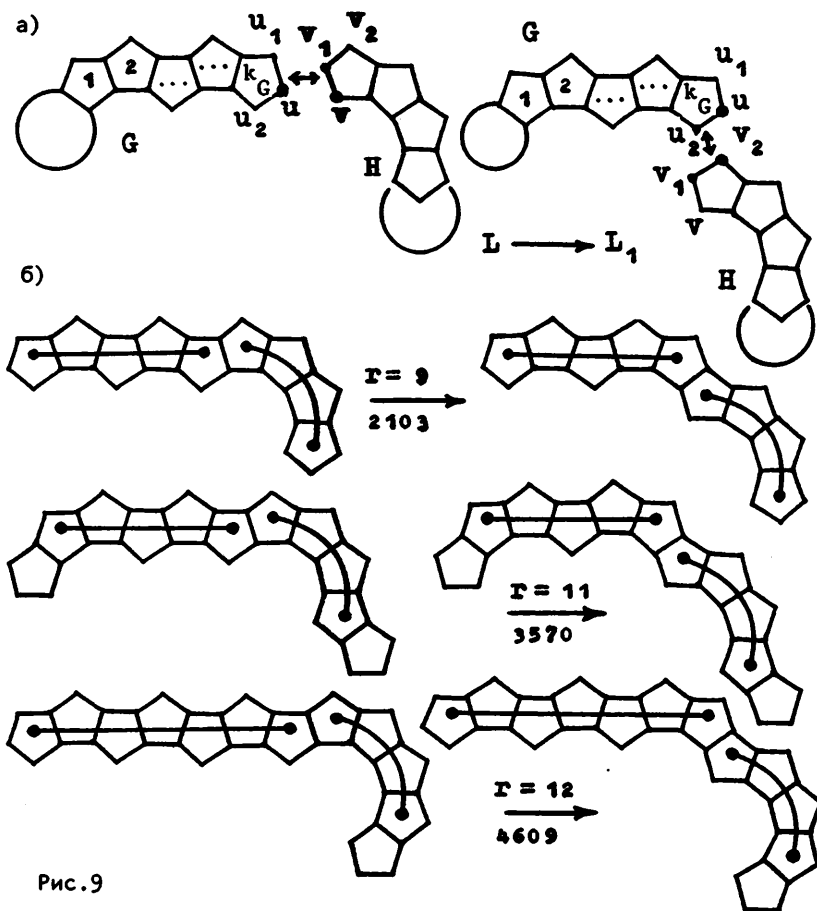


Рис.9

$$D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1) \text{ и } D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_2) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_2, v_2, v_1).$$

Тогда $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_2)) - \varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_2, v_2, v_1)$. По леммам 3 и 2 (случай "б") имеем $D_H(v) - D_H(v_2) = -3r_H + 7$. Используя лемму 1 для вычислений $\varphi(u, u_1, v, v_1)$, находим значения параметров графов $g_- = 3r_G - (3k_G + 1)/2$, $g_+ = (3k_G - 1)/2$ и $h_- = 2$, $h_+ = 1$ и затем $\varphi(u, u_1, v, v_1) =$

$= 3r_G - (3k_G + 1)/2 + 6k_G - 2$. Для величины $\Phi(u, u_2, v_2, v_1)$ получаем $g_- = 2$, $g_+ = 3r_G - 3$ и $h_- = 3r_H - 5$, $h_+ = 1$, откуда $\Phi(u, u_2, v_2, v_1) = 9r_G r_H - 9r_G - 9r_H + 11$. Подставляя необходимые значения в выражение для разности дистанций, имеем $D(L) - D(L_1) = 9r_G - 9r_H + (3k_G + 1)/2 - 6k_G + 13$. ■

Вырождение дистанции графов при данном локальном преобразовании зависит от размеров графов G и H , разность которых определяется числом колец в линейной части подграфа G .

СЛЕДСТВИЕ 1. Для графов L и L_1 на рис. 9а выполняется равенство $D(L) = D(L_1)$ тогда и только тогда, когда $r_G - r_H = (k_G - 3)/2$.

Представим в другом виде значения параметров графов с совпадающими значениями инварианта.

СЛЕДСТВИЕ 2. Дистанция графов L и L_1 на рис. 9а совпадает тогда и только тогда, когда для параметров графов выполняются следующие условия:

1) $r_L = 2n - 1$, $r_G = n + (s - 4)/2$, $r_H = n - (s - 2)/2$, $k_G = 2s - 3$ и $3s \leq 2n + 2$;

2) $r_L = 2n$, $r_G = n + (s - 2)/2$, $r_H = n - (s - 2)/2$, $k_G = 2s - 1$ и $3s \leq 2n$,

где n и s принимают значения $n = 5, 6, 7, 8, \dots$ и $s = 4, 6, 8, 10, \dots$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Достаточность очевидна из следствия 1.

Пусть выполняется $D(L) = D(L_1)$. Так как $r_G + r_H = r_L$ и $r_G - r_H = (k_G - 3)/2$, то $r_L = 2r_G - (k_G - 3)/2$. Для фиксированного r_L указанные в следствии 2 равенства, как нетрудно заметить, порождают все допустимые разложения числа r_L на числа r_G и r_H с выполнением необходимых соотношений ($5 \leq k_G \leq r_G$ и т.п.). ■

В табл. 1 приводятся численные значения допустимых параметров графов.

На рис. 9б показаны графы с совпадающими значениями дистанции для $r_L = 9, 11, 12$. Заметим, что таких графов с числом колец $r_L = 10$ не существует.

Т а б л и ц а 1

r_L	r_G	r_H	k_G
9	5	4	5
11	6	5	5
12	7	5	7
13	7	6	5
14	8	6	7
15	8	7	5
15	9	6	9
16	9	7	7
17	9	8	5
17	10	7	9
18	10	8	7
18	11	7	11
19	10	9	5
19	11	8	9
20	11	9	7
20	12	8	11
21	11	10	5
21	12	9	9
21	13	8	13

Для некоторых значений параметров можно оценить количество пар графов, на которых инвариант вырождается. Пусть

$r_G = k_G$, т.е. $r_L = 3m$, $r_G = 2m-1$, $r_H = m+1$ и $k_G = 2m-1$, где $m = 3, 4, 5, \dots$. Тогда

существует в точности $2^{r_H-4} = 2^{m-3}$ пар неизоморфных графов L и L_1 с совпадающими значениями дистанции. Это непосредственно следует из структуры таких графов (см. рис. 9б для $r_L = 9, 12$). Аналогичное свойство выполняется для пар графов, у которых $r_G = k_G + 1$, т.е. $r_L = 3m+2$, $r_G = 2m$, $r_H = m+2$ и $k_G = 2m-1$, где $m = 3, 4, 5, \dots$ (см. рис. 9б для $r_L = 11$). Концевое кольцо в подграфе G может занимать только указанное положение.

УТВЕРЖДЕНИЕ 6. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис. 10а (число k_G является четным и

$k_G \geq 4$). Тогда для разности дистанций выполняется $D(L) - D(L_1) = 9(r_G - r_H - k_G/2)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции для графов G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_2) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_2, v_2, v)$.

Тогда $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_2)) - \varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_2, v_2, v)$. По леммам 3 и 1 (случай "г") имеем $D_H(v) - D_H(v_2) = 3r_H - 4$. Применяя лемму 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$,

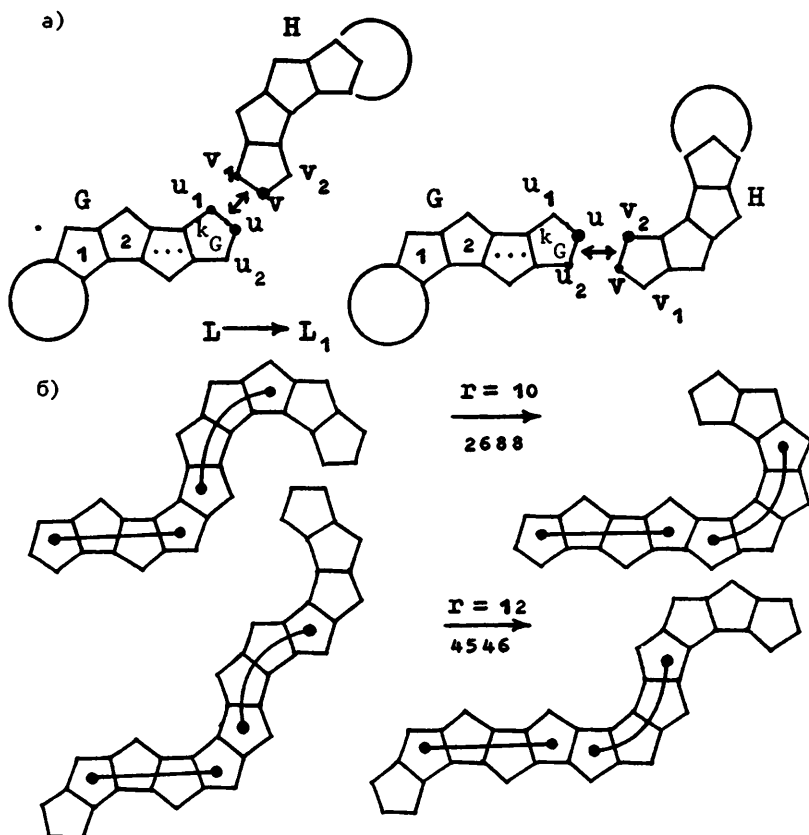


Рис. 10

находим значения параметров $g_+ = 2$, $g_- = 3r_G - 3$ и $h_+ = 3r_H - 5$, $h_- = 4$ и затем $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 9r_G r_H + 9r_G - 9r_H - 1$. Для величины $\varphi(u, u_2, v_2, v)$ имеем $g_+ = 3k_G/2 - 1$, $g_- = 3r_G - 3k_G/2$ и $h_+ = 2$, $h_- = 1$, откуда $\varphi(u, u_2, v_2, v) = 12r_G - 9k_G/2 - 1$. Подставляя необходимые значения в выражение для разности дистанции графов L и L_1 , получим $D(L) - D(L_1) = 9r_H - 9r_G - 9k_G/2$. ■

Совпадение дистанций зависит от размеров графов G и H , разность которых определяется числом колец в линейной части графа G .

СЛЕДСТВИЕ 1. Для графов L и L_1 на рис.10а выпол-
няется равенство $D(L) = D(L_1)$ тогда и только тог-
да, когда $r_H - r_G = k_G/2$.

Так как по следствию 1 имеем $r_H - r_G \geq 2$, то число ко-
лец $r_L \geq 10$.

Представим параметры графов с совпадающей дистанцией в
другом виде.

Т а б л и ц а 2

r_L	r_G	r_H	k_G
10	4	6	4
12	5	7	4
14	6	8	4
15	6	9	6
16	7	9	4
17	7	10	6
18	8	10	4
19	8	11	6
20	8	12	8
20	9	11	4
21	9	12	6
22	9	13	8
22	10	12	4
23	10	13	6
24	10	14	8
24	11	13	4
25	10	15	10
25	11	14	6

СЛЕДСТВИЕ 2. Дистанция графов
 L и L_1 на рис.10а совпадает тог-
да и только тогда, когда для па-
раметров графов выполняются сле-
дующие условия:

1) $r_L = 2n$, $r_G = n-s/2$, $r_H =$
 $= n+s/2$, $k_G = 2s$ и $5s \leq 2n$, где
 $s = 2, 4, 6, \dots$;

2) $r_L = 2n+1$, $r_G = n-(s-1)/2$,
 $r_H = n+(s+1)/2$, $k_G = 2s$ и $5s \leq$
 $\leq 2n+1$, где s и n принимают зна-
чения $s = 3, 5, 7, \dots$ и $n = 5, 6,$
 $7, 8, \dots$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Достаточно с т ь
очевидна из следствия 1. Пусть $D(L) =$
 $= D(L_1)$. Так как $r_G + r_H = r_L$ и $r_H - r_G =$
 $= k_G/2$, то $2r_L = 4r_G + k_G$. Для фикси-
рованного r_L указанные в следствии 2
равенства порождают все допустимые
разложения числа r_L на числа r_G и
 r_H с выполнением необходимых соот-
ношений. ■

В табл. 2 приводятся численные значения допустимых пара-
метров графов.

На рис.106 показаны графы с совпадающими значениями дистанции для $r_L = 10, 12$. Заметим, что для $r_L = 11, 13$ таких графов не существует.

Для некоторых значений параметров можно также оценить количество пар графов, для которых значения дистанции совпадают. Пусть $r_G = k_G$, т.е. $r_L = 5m$, $r_G = 2m$, $r_H = 3m$ и $k_G = 2m$, где $m = 2, 3, 4, \dots$. Тогда существует в точности $2^{r_H - 4} = 2^{3m - 4}$ пар графов L и L_1 с совпадающими значениями инварианта. Это непосредственно следует из структуры таких графов (см.рис.106 для $r_L = 10$).

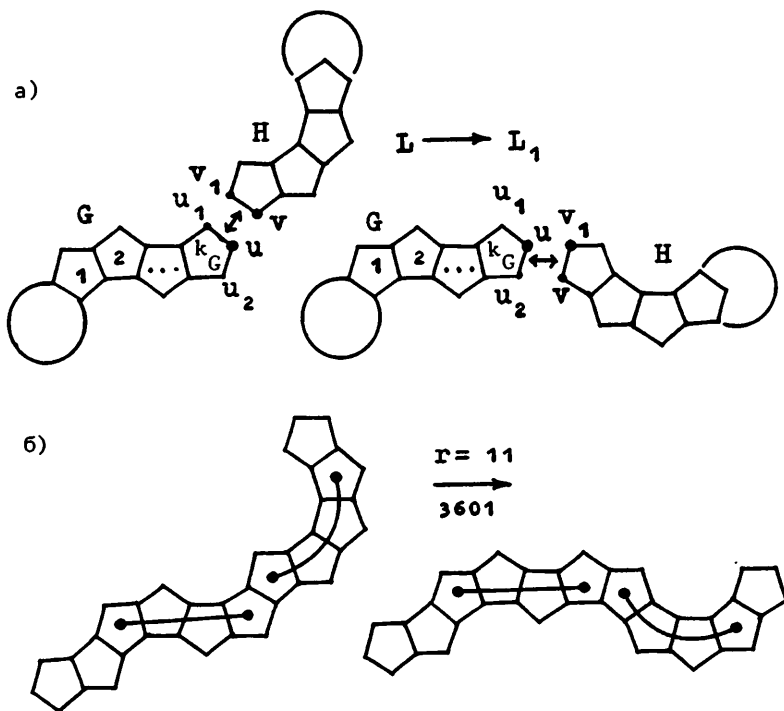


Рис. 11

УТВЕРЖДЕНИЕ 7. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис. 11а (число k_G является четным и $k_G \geq 4$). Тогда для разности дистанций выполняется $D(L) - D(L_1) = 3(-3r_{Hk_G}/2 + 3r_H + 3r_G + k_G/2 - 5)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3)\varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_1) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3)\varphi(u, u_2, v_1, v)$.

Тогда $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_1)) - \varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_2, v_1, v)$. По леммам 3 и 1 (случай "г") имеем $D_H(v) - D_H(v_1) = -3$. Применяя лемму 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$, находим значения параметров $g_+ = 2$, $g_- = 3r_G - 3$ и $h_+ = 3r_H - 5$, $h_- = 1$. Тогда $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 9r_G r_H - 9r_G - 9r_H + 11$. Для величины $\varphi(u, u_2, v_1, v)$ имеем $g_+ = 3k_G/2 - 1$, $g_- = 3r_G - 3k_G/2$ и $h_+ = 3r_H - 5$, $h_- = 4$, откуда $\varphi(u, u_2, v_1, v) = 9r_G r_H - 9r_{Hk_G}/2 + 9r_G + 3k_G/2 - 4$. Подставляя полученные значения в выражение для разности дистанций, имеем $D(L) - D(L_1) = -9r_{Hk_G}/2 + 9r_H + 9r_G + 3k_G/2 - 15$. ■

СЛЕДСТВИЕ. Для графов L и L_1 на рис. 11а выполняется $D(L) = D(L_1)$ тогда и только тогда, когда $r_G = (3n+1)r_H + 1 - n$ и $k_G = 6n + 4$, $n = 0, 1, 2, \dots$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Достаточность очевидна из утверждения 7. Пусть $D(L) = D(L_1)$. Значение k_G является четным, т.е. $(6r_G - 8)/(3r_H - 1) = 2\pi$ или $r_G = \pi r_H - (\pi - 4)/3$. Число колец r_G является целым, что выполняется только при $\pi = 1, 4, 7, 10, 13, \dots$. Если последнее равенство записать для последовательно изменяющегося π , то получим требуемое выражение для r_G . Подставляя значение для r_G в равенство для k_G , имеем $k_G = 6\pi + 4$, $\pi = 0, 1, 2, \dots$. ■

Рассмотрим параметры графов для начальных значений $\pi = 0, 1, 2$.

Т а б л и ц а 3

Начальные значения n	r_L	r_H	r_G
0 ($k_G = 4$)	9	4	5
	11	5	6
	13	6	7
	15	7	8
	17	8	9
1 ($k_G = 7$)	19	9	10
	20	4	16
	25	5	20
	30	6	24
	35	7	28
2 ($k_G = 16$)	40	8	32
	31	4	27
	39	5	34
	47	6	41
	55	7	48

Пусть $n = 0$, тогда числа колец графов связаны соотношением $r_G = r_H + 1$ и $k_G = 4$. Значения параметров графов приводятся в табл. 3.

Графов с числом колец $r_G = 9$ и совпадающими значениями дистанции не существует. Действительно, согласно схеме преобразования можно построить единственную пару графов из 9 колец, но эти графы оказываются изоморфными. Для $r_L = 11$ существует единственная пара графов с совпадающими значениями дистанции (рис. 116).

Пусть $n = 1$, тогда для количества колец графов выполняется равенство $r_G = 4r_H$ и $k_G = 7$. Для $n = 2$ имеем $r_G = 7r_H - 1$ и $k_G = 16$ (см. табл. 3). Читатель легко может построить соответствующие графы и далее вычислить для них дистанцию.

УТВЕРЖДЕНИЕ 8. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис. 12а (числа k_G, k_H являются четными и $k_G \geq 4, k_H \geq 4$). Тогда для разности дистанций выполняется $D(L) - D(L_1) = 9(r_G k_H - r_H k_G)/2 - 9(r_G - k_H) + 3(k_G - k_H)/2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) -$

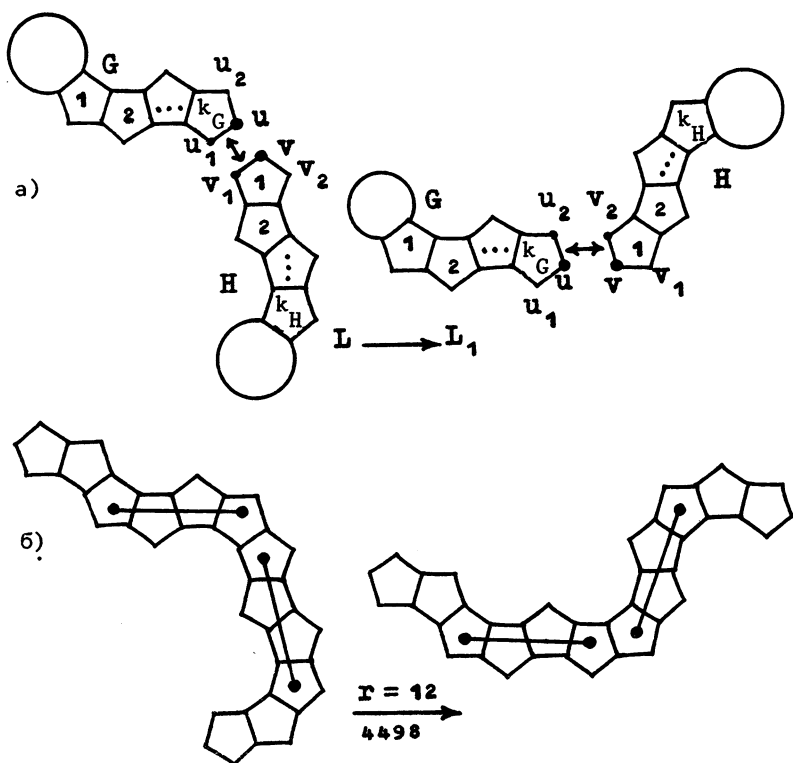


Рис. 12

- $\varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_2, v, v_2)$.

Тогда $D(L) - D(L_1) = -\varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_2, v, v_2)$. Применяя лемму 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$, находим значения параметров $g_+ = 2$, $g_- = 3r_G - 3$ и $h_+ = 3k_H/2 - 1$, $h_- = 3r_H - 3k_H/2$ и затем $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 18r_G r_H - 9r_G k_H/2 - 12r_H - 3r_G + 3k_H/2 + 3$. Для величины $\varphi(u, u_2, v, v_2)$ имеем $g_+ = 3k_G/2 - 1$, $g_- = 3r_G - 3k_G/2$ и $h_+ = 2$, $h_- = 3r_H - 3$, откуда $\varphi(u, u_2, v, v_2) = 18r_H r_G - 9r_H k_G/2 - 12r_G - 3r_H + 3k_G/2 + 3$. Подставляя необходимые значения в выра -

жение для разности дистанции графов L и L_1 , получим равенство $D(L) - D(L_1) = 9(r_G k_H - r_H k_G)/2 - 9r_G - 9k_H + 3(k_G - k_H)/2$. ■

Достаточное условие для вырождения дистанции при этом преобразовании очевидно.

СЛЕДСТВИЕ 1. Если для графов L и L_1 на рис. 12а выполняется равенство $r_G = r_H$ и $k_G = k_H$, то $D(L) = D(L_1)$.

СЛЕДСТВИЕ 2. Если $D(L) = D(L_1)$, то графы L и L_1 имеют четное количество колец.

Графов с числом колец 10 и совпадающими значениями дистанции не существует. Действительно, согласно схеме преобразования можно построить единственную пару таких графов, но они оказываются изоморфными. Для числа колец $r_L = 12$ существует единственная пара графов с совпадающей дистанцией (рис. 12б).

УТВЕРЖДЕНИЕ 9. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис. 13а. Тогда для разности дистанций выполняется $D(L) - D(L_1) = 18(r_H - r_G)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_2, v, v_2)$.

Тогда $D(L) - D(L_1) = -\varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_2, v, v_2)$. Используя лемму 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$, находим значения параметров $g_+ = 2$, $g_- = 3r_G - 3$ и $h_+ = 3r_H - 5$, $h_- = 4$ и затем $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 9r_G r_H + 9r_G - 9r_H - 1$. Для величины $\varphi(u, u_2, v, v_2)$ имеем $g_+ = 3r_G - 5$, $g_- = 4$ и $h_+ = 2$, $h_- = 3r_H - 3$, откуда $\varphi(u, u_2, v, v_2) = 9r_G r_H - 9r_G + 9r_H - 1$. Подставляя необходимые значения в выражение для разности дистанции графов L и L_1 , получим $D(L) - D(L_1) = -18r_G + 18r_H$. ■

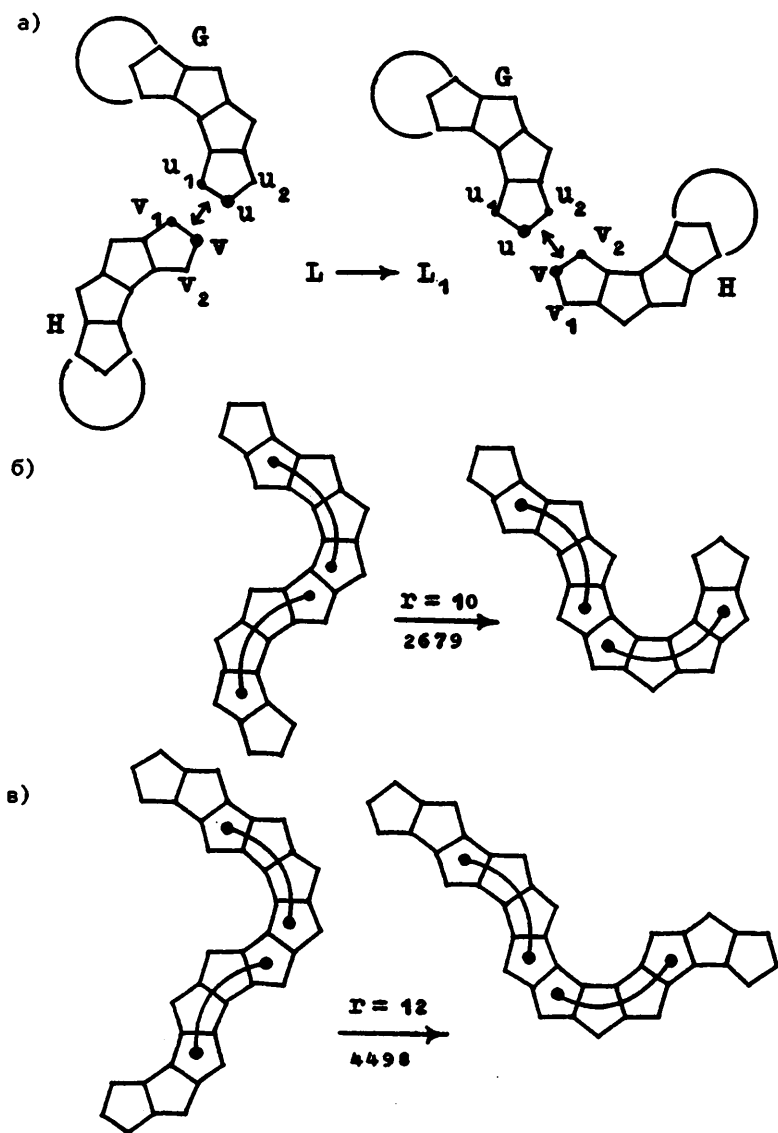


Рис.13. Локальное преобразование графов для утверждения 9

Вырождение дистанции для данного преобразования обеспечивает совпадение числа колец в графах G и H .

СЛЕДСТВИЕ 1. Для графов L и L_1 на рис.13а выполняется $D(L) = D(L_1)$ тогда и только тогда, когда $r_G = r_H$.

СЛЕДСТВИЕ 2. Если $D(L) = D(L_1)$, то графы L и L_1 имеют четное количество колец.

Для графов с числом колец 10 существует единственная пара неизоморфных графов с совпадающей дистанцией (рис.13б). Для графов с числом колец 12 существует 12 пар графов с совпадающим инвариантом, одна из которых приводится на рис. 13в.

Существуют локальные преобразования графов, при которых дистанция никогда не вырождается.

УТВЕРЖДЕНИЕ 10. Пусть граф L_1 получается из графа L локальным преобразованием, показанным на рис.14. Тогда для разности дистанций выполняется $D(L) - D(L_1) = 9$.

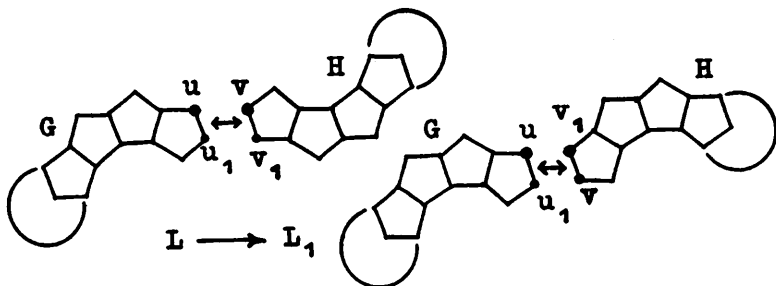


Рис. 14

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_G - 2)D_H(v_1) + (p_H - 2)D_G(u) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v_1, v)$.

Тогда $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_1)) - \varphi(u, u_1, v, v_1) + \varphi(u, u_1, v_1, v)$. Используем для нахождения разности дистанций вершин v и v_1 леммы 3 и 1 (случай "Г"). Тогда $D_H(v) - D_H(v_1) = h_-(v_1, v) - h_+(v_1, v) = 4 - 1 = 3$. По лемме 1 для вычисления $\varphi(u, u_1, v, v_1)$ находим значения параметров $g_- = 1$, $g_+ = 3r_G - 5$ и $h_- = 3r_H - 5$, $h_+ = 4$ и затем $\varphi(u, u_1, v, v_1) = 12r_G + 3r_H - 17$. Для величины $\varphi(u, u_1, v_1, v)$ имеем $g_- = 3r_G - 5$, $g_+ = 1$ и $h_- = 1$, $h_+ = 3r_H - 5$, откуда $\varphi(u, u_1, v_1, v) = 3r_G + 3r_H - 8$. Подставляя необходимые значения в выражение для разности дистанций, получим $D(L) - D(L_1) = 9$. ■

При данном преобразовании в графах G и H отождествляются одни и те же ребра, но с переменной отождествляемых вершин.

ЗАМЕЧАНИЕ. Существуют пары графов с совпадающими значениями дистанции, которые не переводятся друг в друга одним

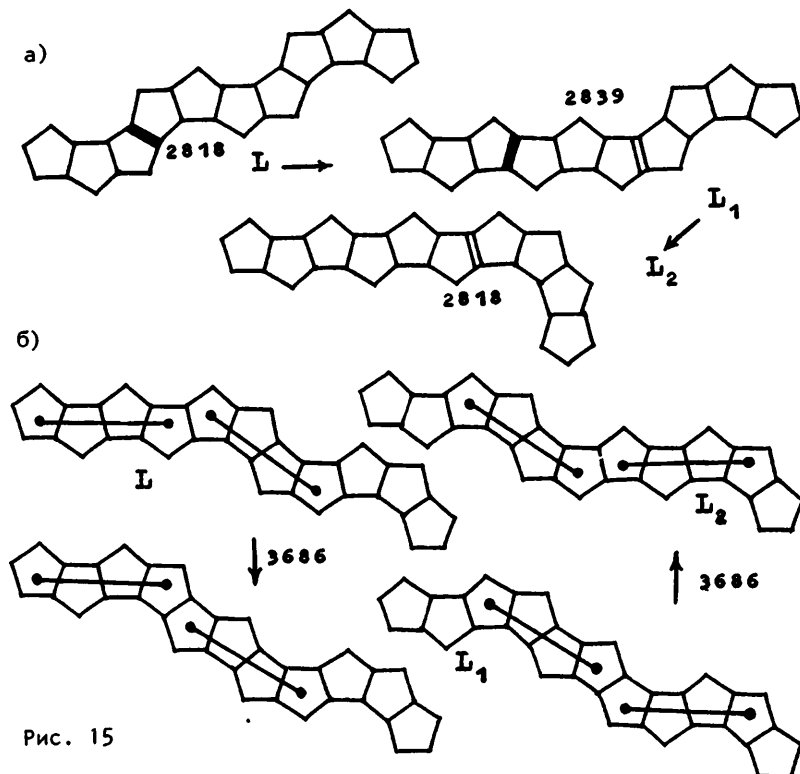


Рис. 15

локальным преобразованием, так как они не могут быть разбиты на одинаковые пары графов G и H . Однако, с помощью последовательного применения локальных преобразований такие графы могут быть преобразованы друг в друга. Например, графы L и L_2 на рис. 15а переводятся друг в друга двумя различными локальными преобразованиями.

Графы L и L_2 на рис. 15б также не разбиваются на одну и ту же пару подграфов G и H , но переводятся друг в друга двумя локальными преобразованиями, соответствующими утверждению 4. При этом для каждого локального преобразования выполняются условия для совпадения дистанции, т.е. $D(L)=D(L_1)=D(L_2)=3686$.

4. Другие виды преобразований

Рассмотрим некоторые преобразования, не являющиеся локальными, которые также приводят к графам с совпадающими значениями дистанции.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11 [19]. Если граф L_1 получается из графа L перемещением концевой кольца на соседнее ребро, то $D(L) \neq D(L_1)$.

Однако, если концевое кольцо графа перемещается и присоединяется к другому концевому кольцу графа, то дистанция на таких графах может вырождаться. На рис. 16а показан пример такого преобразования.

Пусть к графу присоединяется новое кольцо, тогда изменение дистанции описывается следующим выражением.

УТВЕРЖДЕНИЕ 12 [19]. Если граф L_1 получен из графа $L \in P_{r-1}$ присоединением нового кольца к ребру (u, v) (рис. 16б), то выполняется $D(L_1) = D(L) + 2D_L(u) + D_L(v) + 2(6r-1)$.

Таким образом, при присоединении кольца совпадение сумм дистанций вершин в концевых кольцах графа L (рис. 16б) будет обеспечивать вырождение инварианта.

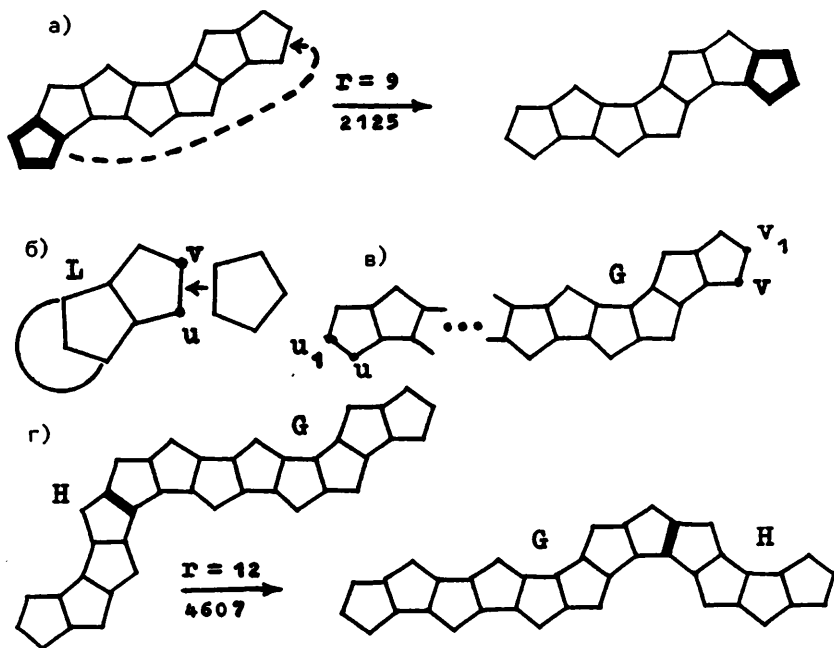


Рис. 16

Нетрудно показать, что в графе G на рис. 16в совпадают дистанции следующих вершин $D(u) = D(v) = (9r^2 + 20)/4$ и $D(u_1) = D(v_1) = (9r^2 + 12r + 4)/4$. Следовательно, мы можем указать нелокальное преобразование, позволяющее конструировать пары графов с совпадающими значениями дистанции. Действительно, достаточно присоединить к ребрам (u, u_1) и (v, v_1) графа G произвольный граф H одним и тем же ребром. Все необходимые значения в формуле для дистанции графа G из теоремы будут совпадать. Для вершины u из (u, u_1) и вершины v из (v, v_1) имеем $g_{\pm} = 2$ и

$g_- = 1$. На рис. 16г приводится пример графов с совпадающими значениями дистанции.

Если каждое из концевых колец графа перемещается на соседнее ребро, то дистанция полученных графов может вырождаться.

УТВЕРЖДЕНИЕ 13. Если граф L_1 получен из графа L с помощью преобразования, показанного на рис. 17а, то $D(L) = D(L_1)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим схему преобразований на рис. 17а и вычислим дистанции графов L и L_1 , последовательно присоединяя новые кольца к графу G . По утверждению 12 выполняются $D(H) = D(G) + 2D_G(v_1) + D_H(v) + 2(6r_G - 1)$ и $D(L) = D(H) + 2D_H(u_2) + D_H(u) + 2(6r_L - 1)$. Тогда для дистанции графа L имеем $D(L) = D(G) + 2D_G(v_1) + D_G(v) + 2D_H(u_2) + D_H(u) + 2(6r_H - 1) + 2(6r_L - 1)$.

Для графов F и L_1 мы можем записать $D(F) = D(G) + 2D_G(v_1) + D_G(v) + 2(6r_F - 1)$ и $D(L_1) = D(F) + 2D_F(u_1) + D_F(u) + 2(6r_L - 1)$. Тогда $D(L_1) = D(G) + 2D_G(v_2) + D_G(v) + 2D_F(u_1) + D_F(u) + 2(6r_F - 1) + 2(6r_L - 1)$.

Для разности дистанций графов L и L_1 имеем

$$D(L) - D(L_1) = 2(D_G(v_1) - D_G(v_2)) + 2(D_H(u_2) - D_F(u_1)) + (D_H(u) - D_F(u)). \quad (11)$$

Вычислим разности дистанций вершин из (11). Рассмотрим графы H и F на рис. 17а. Для произвольной вершины $w \in V(G)$ выполняется равенство $D_F(w) - D_H(w) = 2$. Действительно, если $d_H(w, u_1) = n$ и $d_H(w, u) = d_H(w, u_2) = m$, то $d_F(w, u_1) = n + 1$, $d_F(w, u) = m + 1$ и $d_F(w, u_2) = m$. Кратчайшие пути от вершин графа G до вершин концевых колец показаны на рис. 17б жирной линией. Следовательно, $D_H(u) - D_F(u) = -2$ и $D_H(u_2) - D_F(u_1) = D_H(u_2) - (D_H(u_1) + 2) = (3r_H - 5) - 4 = 3r_H - 9$. По леммам 3 и 2 имеем $D_G(v_1) - D_G(v_2) = g_-(v_2, v_1) - g_+(v_2, v_1) = 2 - (3r_G - 5) = 7 - 3r_G$. Подставляя в (11)

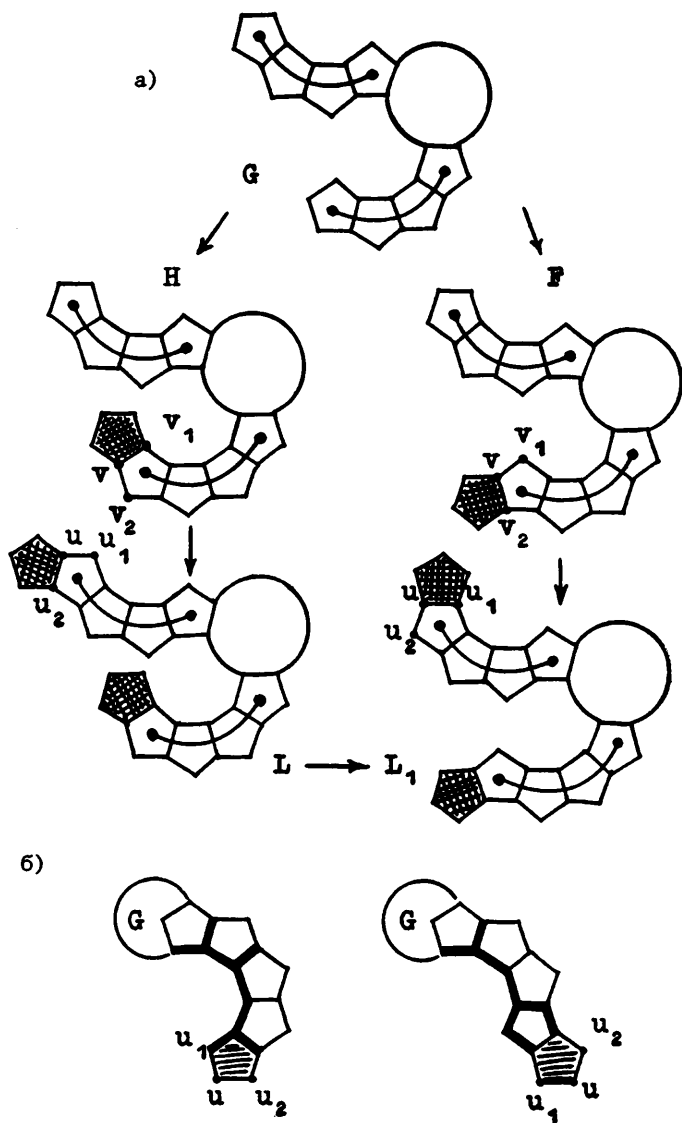


Рис.17. Перемещение двух концевых колец графа

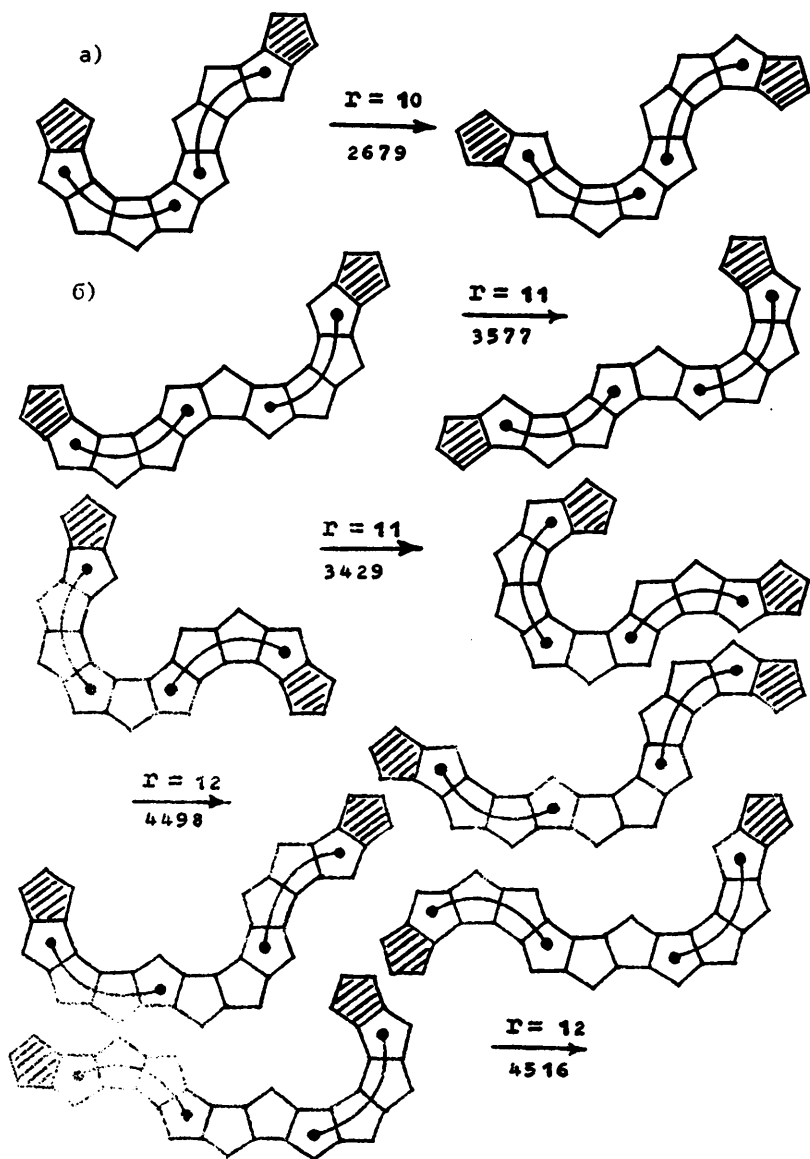


Рис. 18. Примеры совпадения дистанции графов
при перемещении концевых колец

все необходимые значения, получим равенство $D(L) - D(L_1) = 2(7-3r_G) + 2(3(r_G+1)-9) - 2 = 0$. ■

Единственная пара графов такого вида существует для $r_L = 10$ (рис. 18а). На рис. 18б приводятся другие примеры пар графов с совпадающей дистанцией.

5. Преобразование графов других классов

Как было показано ранее, схема локальных преобразований определяется структурой фрагментов графов G и H , расположенных

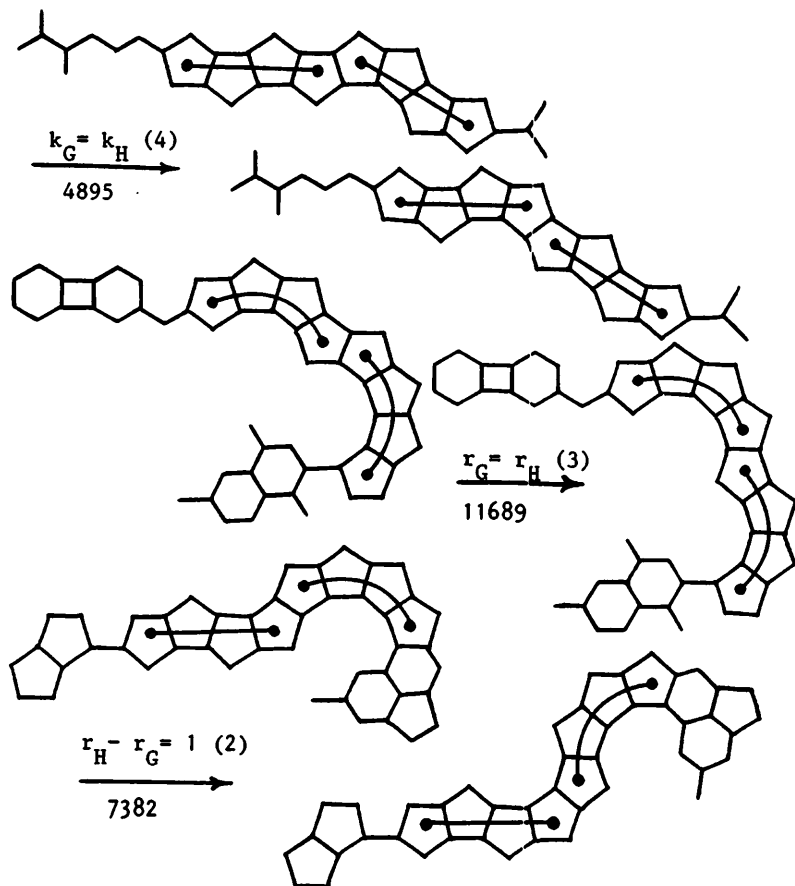


Рис. 19

около концевых колец и содержащих не более 5 колец. В другой части графа кольца могли следовать друг за другом произвольным образом. Однако, нет никаких ограничений на использование графов с такими подграфами произвольной структуры. Рассмотрим несколько примеров. На рис. 19 показаны графы с совпадающими значениями дистанции, полученные с помощью соответствующих локальных преобразований. Для каждой пары графов указаны условия для вырождения дистанции, число в скобках есть номер соответствующего утверждения. Равенство числа колец в графах интерпретируется как равенство числа вершин в графах и т.п.

Рассмотрим далее новый класс графов. Пусть множество R состоит из графов произвольной структуры, имеющих *концевое* пентагональное кольцо с тремя вершинами степени 2 (рис.20). Будем считать, что множество вершин, равно-

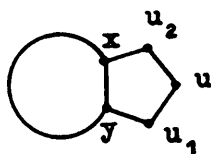


Рис. 20

удаленных от вершин u_1 и u_2 , содержит единственную вершину u . Другими словами, вершины x и y не принадлежат никакому другому циклу нечетной длины. Заметим, что для графов рассмотренного выше класса P_T это условие не выполняется. Обозначим S класс графов, образованных из графов $G, H \in R$,

отождествлением ребер концевых колец таким же способом, как в случае графов пентагональных систем. Условие, определяющее класс графов R , можно записать в виде $V_-(u_1, u_2) = \{u\}$.

ЛЕММА 4. Для графа G из класса R выполняются свойства:

- а) $g_+(u, u_1) = g_+(u, u_2) = g_-(u_1, u) = g_-(u_2, u) = 1$;
- б) $g_-(u, u_1) = g_-(u, u_2)$ и $g_-(u, u_1) = g_-(u, u_2)$;
- в) $g_-(u, u_1) + g_-(u, u_2) = g_-(u, u_1) + g_-(u, u_2) =$
 $= p_G - 3$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Утверждение п."а" непосредственно следует из структуры графов рассматриваемого класса (рис.20). Покажем далее, что для любой вершины $v \in V_-(u, u_1)$ выполняется $v \in V_-(u, u_2)$. Так как $V_-(u_1, u_2) = \{u\}$, то справедливо равенство $d(v, u_2) = d(v, u_1) + 1$. Следовательно, $d(v, u) = d(v, u_1) + 1 = (d(v, u_2) - 1) + 1 = d(v, u_2)$, т.е. $v \in V_-(u, u_2)$. Для вершины $v \in V_-(u, u_2)$ имеем $d(v, u) = d(v, u_2) = d(v, u_1) + 1$, откуда $v \in V_-(u, u_1)$. Утверждение п."в" следует из равенства $g_-(u, u_1) + g_+(u, u_1) = p_G - 2$ и пп."а" и "б". ■

Рассмотрим изменение дистанции графов на примерах трех локальных преобразований их структуры. Пусть локальное преобразование графов задается схемой на рис. 21а. При построении графа L_1 граф H присоединяется тем же ребром к другому ребру графа G .

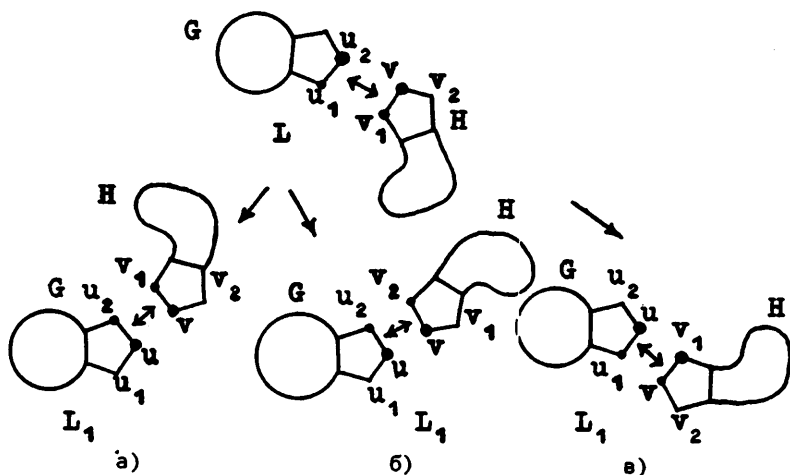


Рис. 21

УТВЕРЖДЕНИЕ 14. Если граф L_1 получается из графа $L \in S$ локальным преобразованием, показанным на рис. 21а, то для разности дистанций графов выполняется $D(L) - D(L_1) = (g_-(u, u_2) - g_-(u, u_1))(h_-(v, v_1) + h_+(v, v_1))$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно теореме, дистанции графов L и L_1 можно представить через дистанции графов G и H в виде $D(L) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) - (p_G + p_H - 3) - \varphi(u, u_2, v, v_1)$.

Вычитая дистанции графов, получим равенство

$$\begin{aligned} D(L) - D(L_1) &= \varphi(u, u_2, v, v_1) - \varphi(u, u_1, v, v_1) = g_=(u, u_2)h_=(v, v_1) + \\ &+ 2g_=(u, u_2)h_=(v, v_1) + g_=(u, u_2)h_=(v, v_1) - \\ &- g_=(u, u_1)h_=(v, v_1) - 2g_=(u, u_1)h_=(v, v_1) - \\ &- g_=(u, u_1)h_=(v, v_1) = h_=(v, v_1)(g_=(u, u_2) - g_=(u, u_1)) + \\ &+ h_=(v, v_1)(g_=(u, u_2) - g_=(u, u_1)) + \\ &+ h_=(v, v_1)(g_=(u, u_2) - g_=(u, u_1)) + \\ &+ h_=(v, v_1)(g_=(u, u_2) - g_=(u, u_1)). \end{aligned}$$

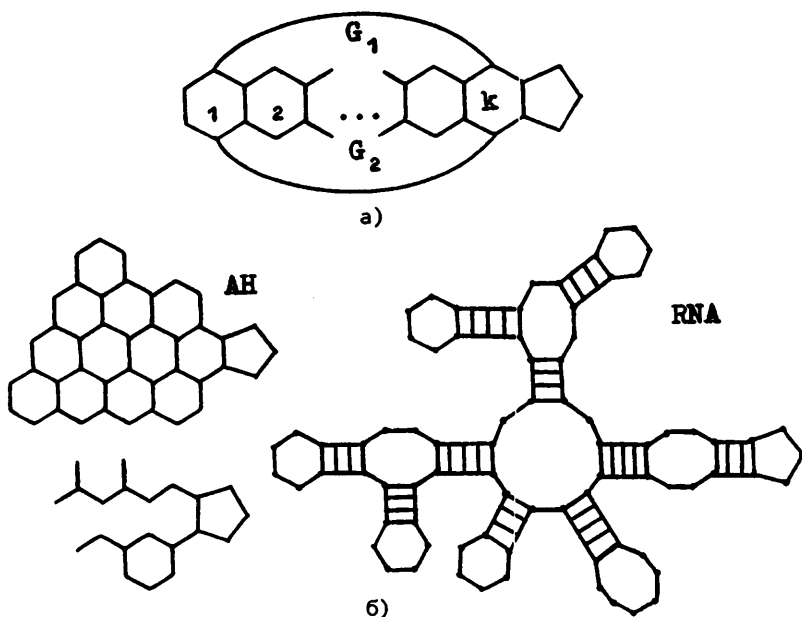
Так как по лемме 4 выполняются равенства $g_=(u, u_2) = g_=(u, u_1)$ и $g_=(u, u_2) = g_=(u, u_1)$, то в результате получим выражение $D(L) - D(L_1) = (h_=(v, v_1) + h_=(v, v_1))(g_=(u, u_2) - g_=(u, u_1))$. ■

Для данного локального преобразования необходимые и достаточные условия для структуры графов, обеспечивающие вырождения дистанции графов, очевидны.

СЛЕДСТВИЕ 1. Дистанции графов L и L_1 совпадают, $D(L) = D(L_1)$, тогда и только тогда, когда $g_=(u, u_1) = g_=(u, u_2)$.

Полученные условия определяют достаточно широкий класс графов. Рассмотрим некоторые примеры графов с совпадающими дистанциями.

СЛЕДСТВИЕ 2. Пусть графы L и L_1 построены из графа $G \in R$ на рис. 22а и произвольного графа $H \in R$. Равенство $D(L) = D(L_1)$ выполняется тогда и только тогда, когда $p_{G_1} = p_{G_2}$.



б)

Рис. 22

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Совпадение порядков графов G_1 и G_2 следует из равенств $g_-(u, u_1) = p_{G_2} + 2k + 1$ и $g_-(u, u_2) = p_{G_1} + 2k + 1$. ■

Отметим, что структура подграфов G_1 и G_2 может быть произвольной. На рис.22б приводятся некоторые примеры графа G . Граф AH соответствует структуре ароматического углеводорода, а граф RNA - фрагменту вторичной структуры рибонуклеиновой кислоты.

Для локального преобразования на рис.21б также можно определить условия для совпадения дистанции графов. При построении графа L_1 в графах G и H отождествляются новые ребра концевых колец.

УТВЕРЖДЕНИЕ 15. Если граф L_1 получается из графа $L \in S$ локальным преобразованием на рис. 21б, то для разности дистанций графов выполняется $D(L) - D(L_1) = (p_H - 3)(g_-(u, u_2) - g_-(u, u_1)) + (p_G - 3)(h_-(v, v_2) - h_-(v, v_1))$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Используя теорему, выразим дистанции графов L и L_1 через дистанции графов G и H в виде: $D(L) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) - (p_G + p_H - 3) - \Phi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) - (p_G + p_H - 3) - \Phi(u, u_2, v, v_2)$.

Вычитая дистанции графов, имеем:

$$D(L) - D(L_1) = \Phi(u, u_2, v, v_2) - \Phi(u, u_1, v, v_1) = g_-(u, u_2)h_-(v, v_2) + 2g_-(u, u_2)h_-(v, v_2) + g_-(u, u_2)h_-(v, v_2) - g_-(u, u_1)h_-(v, v_1) - 2g_-(u, u_1)h_-(v, v_1) - g_-(u, u_1)h_-(v, v_1).$$

Так как по лемме 4 выполняются равенства $g_-(u, u_2) = g_-(u, u_1)$, $h_-(u, u_2) = h_-(u, u_1)$ и $h_-(v, v_1) + h_-(v, v_2) = p_H - 3$, то получаем

$$\begin{aligned} D(L) - D(L_1) &= g_-(u, u_2)(h_-(v, v_2) - h_-(v, v_1)) + \\ &+ g_-(u, u_1)(h_-(v, v_2) - h_-(v, v_1)) + \\ &+ h_-(v, v_1)(g_-(u, u_2) - g_-(u, u_1)) + \\ &+ h_-(v, v_2)(g_-(u, u_2) - g_-(u, u_1)) = \\ &= (g_-(u, u_2) + g_-(u, u_1))(h_-(v, v_2) - h_-(v, v_1)) + \\ &+ (h_-(v, v_1) + h_-(v, v_2))(g_-(u, u_2) - g_-(u, u_1)) = \\ &= (p_H - 3)(g_-(u, u_2) - g_-(u, u_1)) + \\ &+ (p_G - 3)(h_-(v, v_2) - h_-(v, v_1)), \end{aligned}$$

что и требовалось. ■

СЛЕДСТВИЕ. Если в графах $G, H \in R$ выполняется одно из условий:

а) $g_-(u, u_1) = g_-(u, u_2)$ и $h_-(v, v_1) = h_-(v, v_2)$;

б) $g_-(u, u_1) = h_-(v, v_2)$ и $g_-(u, u_2) = h_-(v, v_1)$,

то дистанции графов L и L_1 совпадают.

При выполнении в следствии условий п."а" порядки графов G и H могут различаться, в то время как выполнение равенств п."б" влечет совпадение их порядков. Примеры соответствующих графов G и H приводятся на рис. 23.

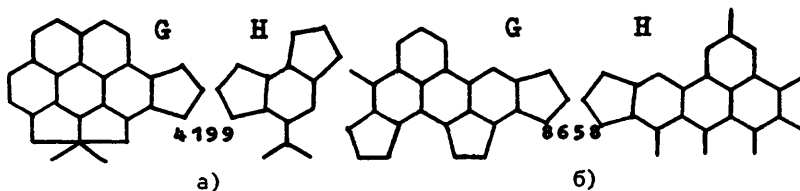


Рис. 23

Рассмотрим локальное преобразование графов на рис. 21в. Граф L_1 образуется отождествлением тех же ребер графов G и H , но с переменной отождествляемых вершин. При таком преобразовании дистанция графов никогда не вырождается.

УТВЕРЖДЕНИЕ 16. Если граф L_1 получается из графа $L \in S$ локальным преобразованием на рис.21в, то для разности дистанций графов выполняется $D(L) - D(L_1) = 3g_-(u, u_1)(h_-(v, v_1) - 1)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Применяя теорему, представим дистанции графов L и L_1 через дистанции графов G и H в следующем виде: $D(L) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v) - (p_G + p_H - 3) - \Phi(u, u_1, v, v_1)$ и $D(L_1) = D(G) + D(H) + (p_H - 2)D_G(u) + (p_G - 2)D_H(v_1) - (p_G + p_H - 3) - \Phi(u, u_1, v_1, v)$.

Следовательно, для разности дистанций можно записать: $D(L) - D(L_1) = (p_G - 2)(D_H(v) - D_H(v_1)) + \Phi(u, u_1, v_1, v) - \Phi(u, u_1, v, v_1)$.

Применяя леммы 3 и 4, имеем $D_H(v) - D_H(v_1) = h_-(v, v_1) - h_+(v, v_1) = h_-(v, v_1) - 1$. Тогда для разности дистанций выполняется

$$\begin{aligned}
D(L)-D(L_1) &= (p_G-2)(h_-(v,v_1)-1)+ g_-(u,u_1)h_-(v_1,v) + \\
&+ 2g_-(u,u_1)h_-(v_1,v)+ g_-(u,u_1)h_-(v_1,v) - \\
&- g_-(u,u_1)h_-(v,v_1)- 2g_-(u,u_1)h_-(v,v_1) - \\
&- g_-(u,u_1)h_-(v,v_1).
\end{aligned}$$

Так как по лемме 4 справедливы равенства $h_-(v,v_1) = h_-(v_1,v)$ и $h_+(v,v_1) = h_-(v_1,v) = 1$, то

$$\begin{aligned}
D(L)-D(L_1) &= h_-(v_1,v)(g_-(u,u_1)- 2g_-(u,u_1)) - \\
&- h_-(v,v_1)(g_-(u,u_1)- 2g_-(u,u_1)) + \\
&+ (p_G-2)(h_-(v,v_1)-1) = \\
&= (h_-(v,v_1)-1)(p_G-2-g_-(u,u_1)+2g_-(u,u_1)) = \\
&= (h_-(v,v_1)-1) 3g_-(u,u_1). \blacksquare
\end{aligned}$$

СЛЕДСТВИЕ. При данном локальном преобразовании дистанции графов L и L_1 никогда не совпадают, $D(L) \neq D(L_1)$.

Для доказательства заметим, что при выполнении равенства $h_-(v,v_1) = 1$ вершины v и v_1 принадлежат одной и той же орбите группы автоморфизмов графа, т.е. графы L и L_1 оказываются изоморфными.

З а к л ю ч е н и е

В работе исследованы свойства дистанции графов неразветвленных пентагональных систем и графов некоторых других классов. Изучено изменение дистанции при локальных преобразованиях, при которых структура графов изменяется "незначительно". Для таких преобразований разность значений инварианта для пары графов представляется в виде полинома второй степени от параметров и характеристик структуры графов. Как следствие получены простые условия, обеспечивающие вырождение инварианта, и построены примеры таких графов. Для проведения расчетов использовались программы быстрой генерации графов неразветвленных пентагональных систем и вычисления их дистанции [19].

Л и т е р а т у р а

1. ENTRINGER R.C., JACKSON D.E., SNYDER D.A. Distance in graphs// Czech. Math. J.- 1976.- Vol.26, N 2.- P.283-296.
2. PLESNIK J. On the sum of all distances in a graph or digraph // J.Graph Theory.- 1984.- Vol.8, N1.- P.1-21.
3. SKOROBOGATOV V.A., DOBRYNIN A.A. Metric analysis of graphs // MATCH.- 1988.- N 23.- P.105-151.
4. GUTMAN I. On distances in some bipartite graphs // Publ.Inst.Math.- 1988.- Vol. 43(57).- P.3-8.
5. ДОБРЫНИН А.А. Распределение значений дистанции графов неразветвленных гексагональных систем// Математические исследования в химической информатике. - Новосибирск, 1990.- Вып.136: Вычислительные системы.- С.61-141.
6. POLANSKY O.E., BONCHEV D. The Wiener number of graphs. 1. General theory and changes due to some graph operations// MATCH.- 1986.- N 21.- P. 133-186.
7. POLANSKY O.E., BONCHEV D. Theory of the Wiener number of graphs. 2. Transfer graphs and some of their metric properties// MATCH.-1990.- N 25.-P.3-39.
8. GUTMAN I. Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons: two theorems // Chem.Phys.Letters.- 1987.- Vol.136, N2.-P.134-136.
9. SABLJIĆ A., TRINAJSTIĆ N. Quantitative structure-activity relationship: the role of topological indices // Acta Pharm.Jugosl.- 1982.- Vol.34, N 4.- P. 189-214.
10. ROUVRAY D.H. Should you have designs on topological indices? // Chemical Applications of Topology and Graph Theory (ed. R.B. King).- Amsterdam a.o.- 1983.- P. 159-177.
11. TRINAJSTIĆ N. Chemical Graph Theory. Vol.2. - Boca Raton: CRC Press, 1983.
12. GUTMAN I., POLANSKY O.E. Mathematical Concepts in Organic Chemistry.- Berlin a.o.: Springer, 1986.
13. СТАНКЕВИЧ М.И., СТАНКЕВИЧ И.В., ЗЕФИРОВ Н.С. Топологические индексы в органической химии// Успехи химии.- 1988.- Т.57.- С.337-366.
14. GUTMAN I., ŠOLTES L. The range of the Wiener index and its mean isomer degeneracy // Z.Naturforsch.- 1991.- Bd.46a.- S.- 865-868.
15. GUTMAN I., POLANSKY O.E. Wiener numbers of polyacens and related benzenoid molecules//MATCH.-1986.-N 20.-P.115-123.

16. ДОБРЫНИН А.А. Дистанция графов ката-конденсированных систем при их преобразованиях // Алгоритмический анализ графов и его применения.- Новосибирск - 1988.- Вып.127: Вычислительные системы.- С.3-39.

17. GUTMAN I., KENNEDY J.W., QUINTAS L.V. Wiener numbers of random benzenoid chains // Chem.Phys.Letters.-1990.-Vol.173, N 4.- P.403-408.

18. DOBRYNIN A.A. Graphs of unbranched hexagonal systems with equal values of the Wiener index and different number of rings // J.Math.Chem.- 1992.- Vol.9.- P.239-252.

19. ДОБРЫНИН А.А. Генерация графов неразветвленных пентагональных и пентагексагональных систем // Математические методы в химической информатике.- Новосибирск.- 1991.-Вып.140: Вычислительные системы.- С.143-206.

Поступила в ред.-изд.отд.

22 июня 1993 года