

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ДИСТАНЦИИ ГРАФОВ
НЕРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПЕНТАГОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ

А.А.Добрынин

В в е д е н и е

Метрические инварианты графов используются для приближенной характеристики структуры объектов или отношений между ними, представимых в виде графов различных видов. Для количественной оценки сложности структуры применяется дистанция графа - метрический инвариант, равный сумме расстояний между всеми парами вершин графа [1,2]. Например, в органической химии топологические индексы (инварианты) молекулярных графов используются для прогнозирования свойств химических соединений [3-7]. Аналогом дистанции графа здесь является индекс Винера (число Винера). Значительное число работ посвящено изучению свойств этого индекса для графов гексагональных систем, включающих молекулярные графы бензоидных углеводородов [8-13]. Для ароматических углеводородов установлены зависимости между их физико-химическими свойствами и значениями индекса их молекулярных графов. Рассматривались свойства дистанции также для графов полициклических систем с циклами произвольной четной длины [14,15].

В настоящей работе будут продолжены исследования свойств дистанции для графов с циклами нечетной длины - графов неразветвленных пентагональных систем, начатые в [16,17]. Для гра-

фов этого класса будут установлены границы возможных значений дистанции, построены примеры графов с совпадающими значениями дистанции, исследована реализуемость произвольных чисел как значений дистанции графов.

1. Основные определения и вспомогательные результаты

Рассмотрим класс плоских 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. При этом никакие три грани графа не имеют общих вершин. Другое определение графов этого класса основано на понятии характеристического графа. Поставив в соответствие каждой пятиугольной грани новую вершину и соединив такие вершины, если соответствующие грани являются смежными, получим *характеристический* граф исходного графа. Пятиугольную грань вместе с ее границей будем называть *кольцом* графа. Обозначим P_h класс графов, состоящих из h колец, для которых их характеристический граф изоморфен простой цепи. *Концевое* кольцо графа имеет общее ребро только с одним кольцом, тогда как любое другое смежно с двумя кольцами. Если кольца графа изображать на плоскости правильными пятиугольниками, то ребра могут пересекаться. На рис.1 классу P_h принадлежат графы G_1 и G_2 . Очевидно, что число вершин произвольного графа из h колец равно $3h+2$, и все вершины графа имеют степень 2 или 3.

Обозначим $d_G(u,v)$ расстояние между вершинами u и v в графе G равное длине 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 $D_G(v) = \sum_{u \in V(G)} d_G(u,v)$, а *дистанция графа* определяется как сумма

расстояний между всеми его вершинами:

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

Рассмотрим вершины v, u и u_1 степени 2, принадлежащие концевому кольцу (рис.2а). Вершину u , ближайшую к вершинам $(h-2)$ -го кольца графа, назовем *ближней* вершиной; вершины u_1 и v назовем *дальней* и *средней* вершиной концевом кольца соответственно. Ребра (u,v) и (u_1,v) будем называть *ближним* и *дальним* ребром концевом кольца.

Пусть к графу G_{h-1} , имеющему $h-1$ кольцо, присоединяется новое пятиугольное кольцо как показано на рис.2б. Представим дистанцию вершин v_1, v_2 и v_3 в графе G_h через дистанции вершин u_1 и u_2 в графе G_{h-1} .

ЛЕММА 1. Дистанции вершин v_1, v_2 и v_3 в графе G_h на рис.2б равны $D_{G_h}(v_1) = D_{G_{h-1}}(u_1) + 3h + 2$, $D_{G_h}(v_3) = D_{G_{h-1}}(u_2) + 3h + 2$ и $D_{G_h}(v_2) = D_{G_{h-1}}(u_2) + 6h - 2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для вершины v_1 имеем

$$\begin{aligned} D_{G_h}(v_1) &= \sum_{x \in V(G_{h-1})} d(v_1, x) + d(v_1, v_2) + d(v_1, v_3) = \\ &= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_1} (d(v_1, u_1) + d(u_1, x)) + d(v_1, u_1) + \\ &+ d(v_1, v_2) + d(v_1, v_3) = \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_1} d(u_1, x) + \\ &+ (|V(G_{h-1})| - 1) + 4 = D_{G_{h-1}}(u_1) + 3h + 2. \end{aligned}$$

Для вершины v_3 аналогично

$$\begin{aligned} D_{G_h}(v_3) &= \sum_{x \in V(G_{h-1})} d(v_3, x) + d(v_3, v_2) + d(v_3, v_1) = \\ &= D_{G_{h-1}}(u_2) + 3h + 2. \end{aligned}$$

Заметим, что кратчайшие расстояния от v_2 до вершины u_1 и u_3 не проходят через вершину u_2 . Для вершины v_2 имеем

$$D_{G_h}(v_2) = \sum_{x \in V(G_{h-1}) - \{u_1, u_2, u_3\}} d(v_2, x) + d(v_2, u_3) + d(v_2, u_1) + d(v_2, u_2) + d(v_2, v_1) + d(v_2, v_3).$$

Так как $d(v_2, u_3) = d(v_2, u_2) + d(u_2, u_3) - 1$ и $d(v_2, u_1) = d(v_2, u_2)$, то

$$\begin{aligned} D_{G_h}(v_2) &= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_2} (d(v_2, u_2) + d(u_2, x)) + 2 = \\ &= D_{G_{h-1}}(u_2) + 2(|V(G_{h-1})| - 1) + 2 = D_{G_{h-1}}(u_2) + 2(3h - 1). \end{aligned}$$

Дистанции ближней и дальней вершин в графе G_h представлены через дистанции смежных с ними вершин в графе G_{h-1} , дистанция средней вершины в G_h выражена через дистанцию вершины в G_{h-1} , смежной с ближней вершиной в G_h .

В [16] показано, что дистанцию графа G_h можно представить через дистанцию графа G_{h-1} и дистанции вершин, к которым присоединяется кольцо.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1 [15]. Дистанции графов G_{h-1} и G_h связаны соотношением $D(G_h) = D(G_{h-1}) + D_{G_{h-1}}(u_1) + 2D_{G_{h-1}}(u_2) + 2(6h - 1)$.

Отметим, что в формуле из утверждения 1 удваивается дистанция вершины в G_{h-1} , смежной с ближней вершиной в G_h .

Пусть u и u_1 являются произвольными смежными вершинами в графе G_h . Поставим в соответствие вершине u следующие множества вершин $V_+(u) = \{v \mid d(v, u) = d(v, u_1) - 1\}$, $V_-(u) = \{v \mid d(v, u) = d(v, u_1)\}$ и $V_+(u) = \{v \mid d(v, u) = d(v, u_1) + 1\}$. Будем считать, что вершины u и u_1 в них не включаются. Тогда эти множества попарно не пересекаются и $V(G_h) = V_+(u) \cup V_-(u) \cup V_+(u) \cup \{u, u_1\}$.

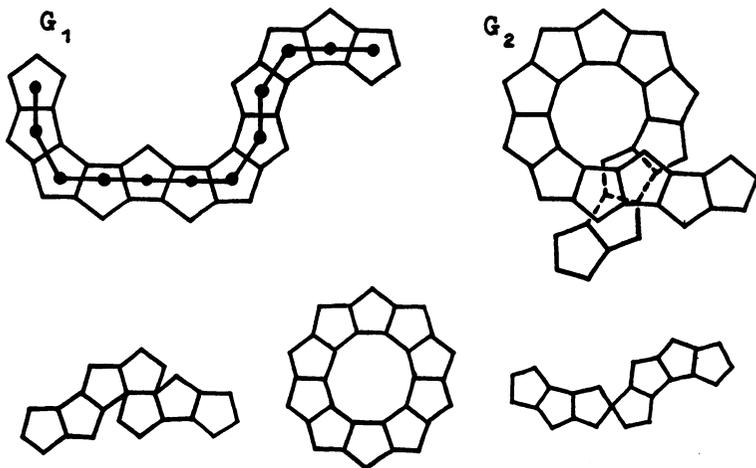


Рис. 1

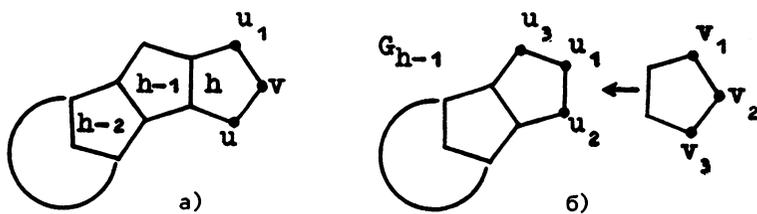


Рис. 2

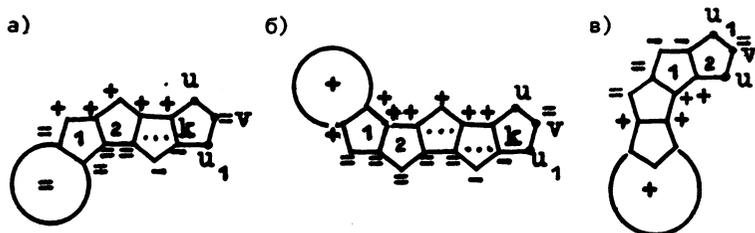


Рис. 3

Аналогичные множества можно определить для вершины u_1 . Очевидно, что $V_-(u) = V_-(u_1)$, $V_-(u) = V_+(u_1)$ и $V_+(u) = V_-(u_1)$.

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

ЛЕММА 2. *Распределение вершин графа G_h по множествам $V_+(u)$, $V_-(u)$ и $V_-(u)$ определяется тремя конфигурациями, изображенными на рис.3 (каждая вершина отмечена знаком соответствующего множества):*

а) число линейно соединенных колец k в графе на рис.3а является четным, $k \geq 4$. В этом случае имеем

$$|V_+(u)| = \frac{3}{2}k - 1, \quad |V_-(u)| = 2, \quad |V_-(u)| = 3h - \frac{3}{2}k - 1;$$

б) число линейно соединенных колец k в графе на рис.3б является нечетным, $k \geq 5$. Тогда выполняется

$$|V_+(u)| = 3h - \frac{3}{2}k - \frac{1}{2}, \quad |V_-(u)| = 2 \text{ и } |V_-(u)| = \frac{3}{2}(k-1);$$

в) для случая $k=2$ (рис.3в) справедливо $|V_-(u)| = 2$, $|V_+(u)| = 3h-5$ и $|V_-(u)| = 3$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО леммы следует из структуры графов на рис.3.

ЛЕММА 3. *Для дистанций вершин u и u_1 в графах на рис.3 всегда выполняется неравенство $D_G(u) < D_G(u_1)$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Разность дистанций вершин может быть представлена как $D_G(u) - D_G(u_1) = |V_-(u)| - |V_+(u)| = |V_+(u_1)| - |V_-(u_1)|$. Далее нужно применить лемму 2.

2. Интервалы реализуемости дистанции

Обозначим $D_{\min}(h)$ наименьшее значение дистанции для графов пентагональных систем, т.е. $D_{\min}(h) = \min\{D(G) \mid G \in P_h\}$. Покажем, что величина $D_{\min}(h)$ есть кубический полином от h и найдем его явный вид.

Пусть некоторый граф G_h получен присоединением нового пятиугольного кольца к ближнему ребру графа G_{h-1} , а граф G'_h - присоединением кольца к дальнему ребру G_{h-1} . По утверждению 1 и лемме 3 выполняется неравенство $D(G_h) < D(G'_h)$. Следовательно, можно сразу определить способ построения графа с наименьшим значением дистанции. Новое кольцо всегда присоединяется к ближнему ребру очередного графа, начиная с единственного графа G_3 . На рис. 4 показаны примеры графов с наименьшим значением дистанции.

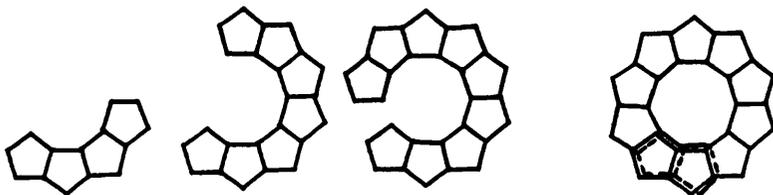


Рис. 4

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Наименьшее значение индекса Винера для графов класса P_h определяется выражением $D_{\min}(h) = \frac{1}{2} (3h^3 + 21h^2 - 6h + 14)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно утверждению 1, для наименьшего значения дистанции графов можно записать

$$D_{\min}(h) = D_{\min}(h-1) + D_{G_{h-1}}(v_{h-1}) + 2D_{G_{h-1}}(u_{h-1}) + 2(6h-1), \quad (1)$$

где (v_{h-1}, u_{h-1}) является ближним ребром в графе G_{h-1} , на котором достигается $D_{\min}(h-1)$. По лемме 1 дистанции вершин v_{h-1} и u_{h-1} можно выразить через дистанцию ближней вершины предыдущего графа. Тогда дистанция ближней вершины v_h в G_h находится как решение рекуррентного уравнения $D_{G_h}(v_h) = D_{G_{h-1}}(v_{h-1}) +$

+ $3h+2$, где $D_{G_1} = 6$. В результате получим $D_{G_h}(v_h) = \frac{1}{2}(3h^2 + 7h + 2)$.

Для дистанции средней вершины u_h имеем $D_{G_h}(u_h) = D_{G_{h-1}}(v_{h-1}) + 2(3h-1) = \frac{1}{2}(3h^2 + 13h - 6)$. Подставив полученные выражения для дистанций вершин в графе G_{h-1} в уравнение (1), получим $D_{\min}(h) = D_{\min}(h-1) + \frac{9}{2}h^2 + \frac{33}{2}h - 12$, $D_{\min}(2) = 55$. Решение этого рекуррентного уравнения определяет $D_{\min}(h)$. ■

В табл.1 приведены наименьшие значения дистанции для графов класса P_h , $4 \leq h \leq 14$.

Т а б л и ц а 1

h	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$W_{\min}(h)$	259	442	691	1015	1423	1924	2527	3241	4075	5038	6139
$W_{\max}(h)$	263	458	732	1098	1570	2161	2885	3755	4785	5988	7378
$ P_h $	2	3	6	10	20	36	72	136	272	528	1056

Обозначим $D_{\max}(h)$ наибольшее значение дистанции для графов пентагональных систем, т.е. $D_{\max}(h) = \max\{D(G) | G \in P_h\}$. Покажем, что величина $D_{\max}(h)$ есть также кубический полином от h .

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. *Наибольшее значение индекса Винера для графов класса P_h определяется выражением $D_{\max}(h) = \frac{9}{4}h^3 + \frac{45}{8}h^2 + \frac{29}{4}h + c$, где $c = 0$ при h четном и $c = -1/8$ при h нечетном.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Способ построения графов с максимальным значением дистанции также следует из утверждения 1. Новое кольцо всегда присоединяется к дальнему ребру очередного графа, начиная с графа G_3 . Пусть к графу из класса P_h присоединяется

новое кольцо, изображенное на рис.5 пунктирной линией. Согласно утверждению 1, для вычисления дистанции при известном

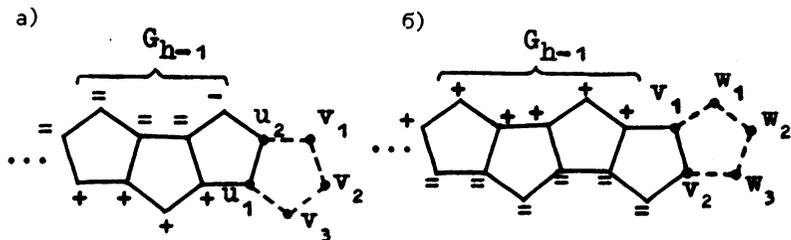


Рис. 5

$D_{\max}(h-1)$ необходимо знать дистанции средней и дальней вершин в графе G_{h-1} . Вершины u_1 и u_2 являются дальней и средней для четного h (рис.5а), и вершины v_1 и v_2 такие же для нечетного h (рис.5б). В графе G_{h-1} на рис.5 вершины из $V_+(u_1)$, $V_-(u_1)$, $V_+(v_1)$, $V_-(v_1)$ отмечены знаками соответствующих множеств.

Вычислим дистанцию дальней вершины.

Пусть h четно. По лемме 1 для вершины v_1 в графе на рис.5а выполняется $D_{G_h}(v_1) = D_{G_{h-1}}(u_2) + 3h + 2$. Выразим дистанцию дальней вершины v_1 в графе G_h через дистанцию дальней вершины u_1 в графе G_{h-1} . Имеем $D_{G_{h-1}}(u_1) = D_{G_{h-1}}(u_2) - |V_+(u_1)|_{G_{h-1}} + 1 = D_{G_{h-1}}(u_2) - \frac{3}{2}h + 3$, тогда $D_{G_h}(v_1) = D_{G_{h-1}}(u_1) + \frac{9}{2}h - 1$.

Пусть h нечетно. Согласно лемме 1 для дальней вершины w_3 выполняется $D_{G_h}(w_3) = D_{G_{h-1}}(v_2) + 3h + 2$. Далее ($h-1$ четно) имеем $D_{G_{h-1}}(v_1) = D_{G_{h-1}}(v_2) - |V_+(v_1)|_{G_{h-1}} + 1 = D_{G_{h-1}}(v_2) - \frac{3}{2}h + \frac{5}{2}$, тогда $D_{G_h}(w_3) = D_{G_{h-1}}(v_1) + \frac{9}{2}h - \frac{1}{2}$.

В результате дистанцию дальней вершины v можно найти из рекуррентного уравнения $D_{G_h}(v) = D_{G_{h-1}}(v) + \frac{9}{2}h - c$, где $D_{G_1}(v) = 6$, $c = -1$ при h четном $c = -1/2$ при h нечетном. Решение этого уравнения есть $D_{G_h}(v) = \frac{9}{4}h^2 + \frac{3}{2}h + c_1$, где $c_1 = 2$ при h четном и $c_1 = 5/4$ при h нечетном.

Вычислим дистанцию средней вершины.

Пусть h четно. По лемме 1 имеем $D_{G_h}(v_2) = D_{G_{h-1}}(u_1) + 6h - 2$.

Представим дистанцию вершины u_1 через дистанцию вершины u_2 . По предыдущему ($h-1$ нечетно) имеем $D_{G_{h-1}}(u_1) = D_{G_{h-1}}(u_2) - \frac{3}{2}h + 3$, тогда $D_{G_h}(v_2) = D_{G_{h-1}}(u_2) + \frac{9}{2}h + 1$.

Пусть h нечетно. В соответствии с леммой 1 имеем $D_{G_h}(w_2) = D_{G_{h-1}}(v_1) + 6h - 2$. Представим дистанцию вершины v_2 через дистанцию вершины v_1 . По предыдущему ($h-1$ четно) выполняется $D_{G_{h-1}}(v_1) = D_{G_{h-1}}(v_2) - \frac{3}{2}h + \frac{5}{2}$, тогда $D_{G_h}(w_2) = D_{G_{h-1}}(v_1) + \frac{9}{2}h + \frac{1}{2}$.

Рекуррентное уравнение для дистанции средней вершины v имеет вид $D_{G_h}(v) = D_{G_{h-1}}(v) + \frac{9}{2}h + c_2$, где $D_{G_1}(v) = 6$, $c_2 = 1$ при h четном, $h \geq 4$, и $c_2 = 1/2$ при h нечетном, $h \geq 3$. В результате получим $D_{G_h}(v) = \frac{9}{4}h^2 + 3h + c_3$, где $c_3 = 1$ при h четном и $c_3 = 3/4$, при h нечетном.

Подставим выражения для дистанций средней и дальней вершин в уравнение из утверждения 1. В итоге для наибольшего значения дистанции получим рекуррентное уравнение $D_{\max}(h) = D_{\max}(h-1) + \frac{27}{4}h^2 + \frac{9}{2}h + c_4$, где $D_{\max}(2) = 55$, $c_4 = 15/4$ при

h четном и $c_4 = 4$ при h нечетном. Решение последнего уравнения определяет $D_{\max}(h)$. ■

В табл.1 приведены наибольшие значения дистанции для графов класса P_h , $4 \leq h \leq 14$.

Значение дистанции произвольного графа $G \in P_h$ заключено в пределах $D_{\min}(h) \leq D(G) \leq D_{\max}(h)$, где границы достигаются на построенных выше графах.

Количество графов неразветвленных пентагональных систем из h колец дается выражением [16]:

$$|P_h| = \begin{cases} 2^{h-4} + 2^{(h-4)/2}, & \text{при } h \text{ четном,} \\ 2^{h-4} + 2^{(h-5)/2}, & \text{при } h \text{ нечетном.} \end{cases}$$

Определим множество возможных значений дистанции для графов класса P_h как $E_h = [D_{\min}(h), D_{\max}(h)]$. Множество E_h является целочисленным интервалом мощности $|E_h| = (D_{\max}(h) - D_{\min}(h)) + 1 = \frac{3}{4}h^3 - \frac{39}{8}h^2 + \frac{41}{4}h - 6 - C$, где $C = 1/8$ при h нечетном и $C = 0$ при h четном, $h \geq 4$. Количество графов класса P_h при увеличении числа колец возрастает пропорционально 2^h , в то время как количество возможных значений дистанции графов растет лишь как h^3 . Классом вырождения для элемента из E_h назовем подмножество графов из P_h , дистанция которых совпадает с данным значением. Следовательно, в среднем для каждого возможного значения дистанции в E_h мощность его класса вырождения имеет экспоненциальный рост. В [16] содержатся данные о всех классах вырождения дистанции графов из P_h с числом колец $4 \leq h \leq 15$. В табл.2 приводятся количество графов в классах P_h , мощности интервалов $|E_h|$ и данные о количестве графов N_{\max} в максимальных по величине классах вырождения для $9 \leq h \leq 27$. Впервые нетривиальные классы вырождения дистанции появляются среди графов с числом колец $h = 9$. В приложении приводятся изображения всех графов из максимальных классов для $9 \leq h \leq 15$.

Т а б л и ц а 2

h	$ P_h $	$ D(P_h) $	$ E_h $	N_{\max}	D(G)	N_{avr}
9	36	32	238	2	2046	2
10	72	60	359	2	2679	2
11	136	103	515	4	3601	2
12	272	177	711	5	4498	2
13	528	277	951	8	5747	2
14	1056	430	1240	10	6977	3
15	2080	609	1582	18	8360	4
16	4160	896	1982	19	9920	5
17	8256	1217	2444	32	12057	7
18	16512	1638	2973	44	13974	11
19	32896	2129	3573	77	16681	16
20	65792	2746	4249	119	19096	24
21	131328	3405	5005	196	21721	39
22	262656	4181	5846	356	25205	63
23	524800	5003	6776	568	28337	105
24	1049600	5915	7800	931	31742	178
25	2098176	6937	8922	1670	36102	303
26	4196352	8019	10147	2834	40335	524
27	8390656	9251	11479	4860	44502	907

3. Дыры в интервале реализуемости

Значение $t \in E_h$ будем называть реализуемым, если существует граф $G \in P_h$ такой, что $D(G) = t$. Обозначим множество реализуемых значений дистанции графов из P_h как $D(P_h)$, т.е. $D(P_h) = \{D(G) \mid G \in P_h\}$. Мощность множества $D(P_h)$ для $9 \leq h \leq 27$ указана в табл.2, в последней колонке для сравнения с N_{\max} указан размер класса вырождения при равном распределении графов по значениям дистанции, $N_{avr} = \lceil |P_h| / |D(P_h)| \rceil$. Запишем элементы $D(P_h)$ в упорядоченном виде $D(P_h) = \{D_1, D_2, D_3, \dots, D_n\}$, где D_i и D_{i+1} есть ближайшие реализуемые значения дистанции, $D_1 = D_{\min}(h)$, $D_n = D_{\max}(h)$, $n = |P_h|$ и $D_i < D_{i+1}$ для всех $i = 1, 2, \dots, n-1$. Тогда множество не реализуемых значений $Z_h = E(P_h) \setminus D(P_h)$ можно представить в виде объединения непересе-

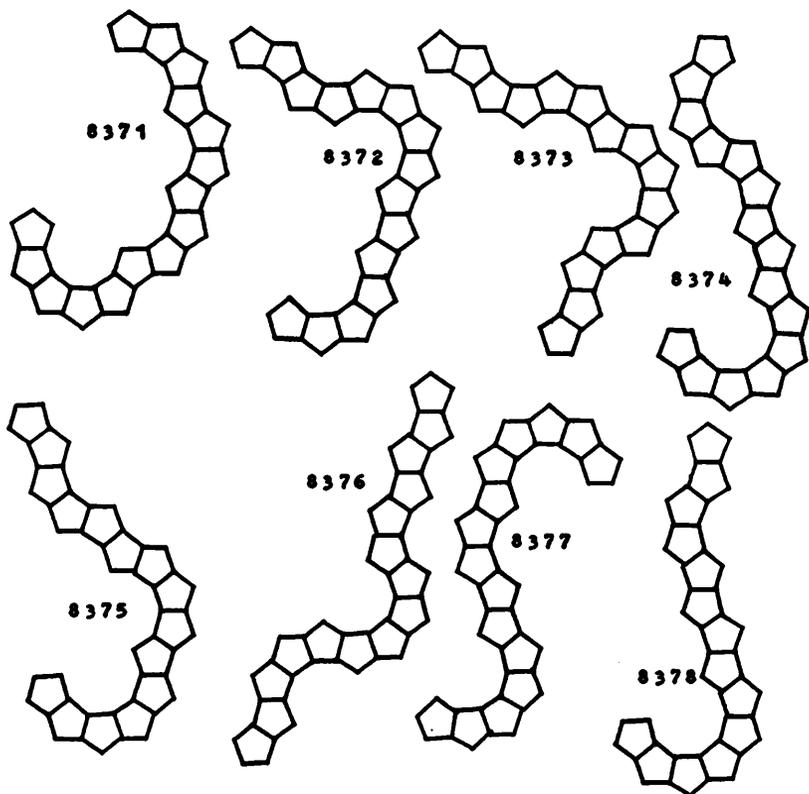


Рис. 6

кающихся интервалов $Z_h = \bigcup_i [D_i + 1, D_{i+1} - 1]$. Какой величины могут быть интервалы не реализуемых значений дистанций? Анализ данных для графов с числом колец $h = 15$ показал, что в этом классе $D_{i+1} - D_i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 11, 12, 15, 16, 20, 24, 36, 39, 64, 70\}$. Отметим, что в классе P_{15} существует 8 графов с последовательными значениями дистанции: 8371, 8372, ..., 8378 (рис.6).

Несмотря на то, что на каждое возможное значение дистанции графа в E_h приходится в среднем экспоненциальное количество графов, множество значений Z_h не является пустым для любого $h \geq 4$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 4. Множество нереализуемых значений Z_h содержит интервалы значений, имеющие линейную по числу колец h мощность.

Ниже будут найдены интервалы не реализуемых значений, расположенные на левом и правом краях интервала E_h . Граф, имеющий значение дистанции D_k в упорядоченном множестве $D(P_h)$, здесь и далее до конца этого пункта будет обозначаться G_k .

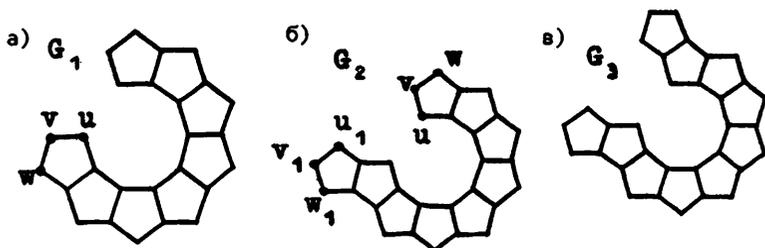


Рис. 7

Рассмотрим граф G_1 из h колец с наименьшей дистанцией (рис.7а). Нетрудно вычислить дистанции вершин степени 2 в концевом кольце графа: $D(u) = (3h^2 + 7h + 2)/2$, $D(v) = (3h^2 + 13h - 6)/2$ и $D(w) = (3h^2 + 13h - 12)/2$. Так как G_1 обладает наименьшей дистанцией среди всех графов, то для получения графа с ближайшей дистанцией $D_2 \in D(P_h)$ новое кольцо нужно присоединить к вершинам v и w . Тогда для дистанции графа G_2 из h колец на рис.7б выполняется $D(G_2) = D_{\min}(h-1) + 2D_{G_1}(w) + D_{G_1}(v) + 2(6h-1) = (3h^3 + 21h^2 + 6h - 26)/2$. Следовательно, первый интервал не реализуемых значений $I_1 = [D_{\min}(h)+1, D(G_2)-1] \subset Z_h$ имеет длину $|I_1| = 3(2h-7)$, $h \geq 5$. Для построения графа с дистанцией D_3 необходимо знать дистанции вершин из обоих концевых колец графа G_2 . Для вершин одного кольца имеем $D(u) = (3h^2 + 7h + 6)/2$, $D(v) = (3h^2 + 13h - 2)/2$ и $D(w) = (3h^2 + 13h - 8)/2$, для вершин другого - $D(u_1) = (3h^2 + 13h - 12)/2$, $D(v_1) = (3h^2 + 19h - 26)/2$ и $D(w_1) = (3h^2 + 13h - 18)/2$. Отсюда следует, что новое кольцо нужно при-

соединять к вершинам v и w , в результате чего получится граф, изображенный на рис.7в с дистанцией $D(G_3) = (3h^2 + 21h^2 + 18h - 66)/2$. Длина второго интервала не реализуемых значений $I_2 = [D(G_2) + 1, D(G_3) - 1]$ равна $|I_2| = 3(2h - 7)$, $h \geq 9$, и совпадает с длиной первого интервала.

Найдем интервалы не реализуемых значений дистанции, расположенные на другом конце интервала E_h . Обозначим G_n граф из h колец, имеющий наибольшую дистанцию среди графов класса P_h (рис.8а).

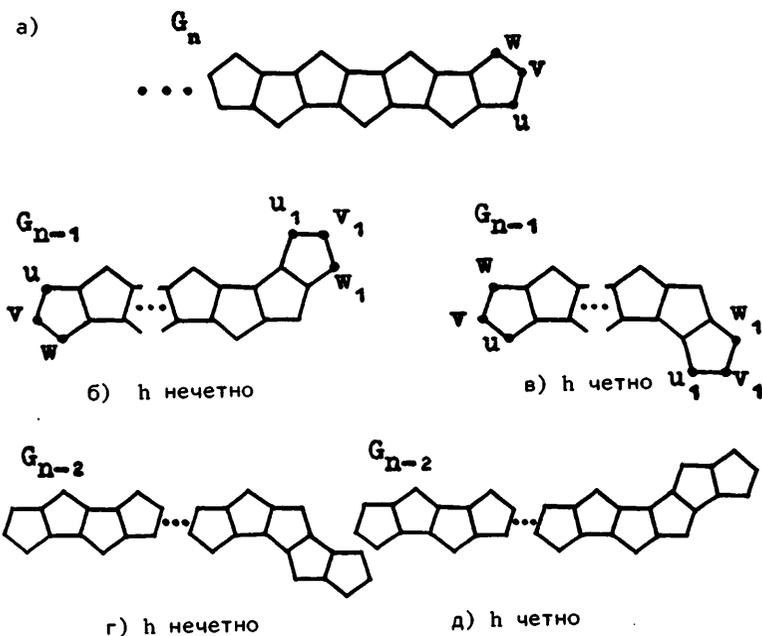


Рис. 8

Пусть h нечетно. В графе G_n на рис.8а дистанция вершин в концевом кольце равна $D(u) = (9h^2 + 6h + 9)/4$, $D(v) = (9h^2 + 12h + 3)/2$ и $D(w) = (9h^2 + 19)/4$. Структура графа G_{n-1} со следующей за D_n наибольшей дистанцией $D_{n-1} \in D(P_h)$ очевидна и показана на

рис.86. Дистанция графа равна $D(G_{n-1}) = (18h^3 + 45h^2 + 34h + 71) / 8$. Отсюда длина первого интервала не реализуемых значений $I_3 = [D(G_{n-1}) + 1, D_{\max}(h)] \subset Z_h$ со стороны наибольшей дистанции есть $|I_3| = 3h - 10, h \geq 4$.

Для четного h вершины u, v и w в графе G_n имеют дистанции $D(u) = (9h^2 + 6h + 8) / 4, D(v) = (9h^2 + 12h + 4) / 2$ и $D(w) = (9h^2 + 20) / 4$. Для этого случая граф G_{n-1} показан на рис.8в и $D(G_{n-1}) = (18h^3 + 45h^2 + 34h + 64) / 8$. Первый интервал не реализуемых значений $I_3 = [D(G_{n-1}) + 1, D_{\max}(h)] \subset Z_h$ имеет длину $|I_3| = 3h - 9, h \geq 4$.

Найдем вторые интервалы не реализуемых значений.

Пусть h нечетно. Для нахождения графа G_{n-2} с дистанцией D_{n-2} вычислим дистанции вершин концевых колец графа G_{n-1} на рис.8в ($h-1$ четно). Для вершин одного кольца имеем $D(w_1) = (9h^2 + 6h + 8) / 4, D(v_1) = (9h^2 + 6h + 20) / 4$ и $D(u_1) = (9h^2 - 6h + 36) / 4$, для вершин другого выполняется $D(w) = (9h^2 + 6h + 8) / 4, D(v) = (9h^2 + 12h - 4) / 4$ и $D(u) = (9h^2 + 12) / 4$. Отсюда следует, что граф G_{n-2} имеет структуру, показанную на рис.8г и дистанцию $D(G_{n-2}) = (18h^3 + 45h^2 + 22h + 131) / 8$. Таким образом, длина второго интервала не реализуемых значений $I_4 = [D(G_{n-2}) + 1, D(G_{n-1}) - 1]$ равна $|I_4| = (3h - 17) / 2, h \geq 8$.

Пусть h четно. Для нахождения графа G_{n-2} с дистанцией D_2 найдем дистанции вершин в концевых кольцах графа на рис.8б. В одном кольце графа $D(u) = (9h^2 + 6h + 1) / 4, D(v) = (9h^2 + 12h + 3) / 4$ и $D(w) = (9h^2 + 19) / 4$, а в другом $D(u_1) = (9h^2 - 6h + 37) / 4, D(v_1) = (9h^2 + 6h + 21) / 4$ и $D(w_1) = (9h^2 + 6h + 9) / 4$. Для построения графа G_{n-2} новое кольцо нужно присоединить к вершинам v_1 и w_1 (рис.8б). Дистанция графа равна $D(G_{n-2}) = (18h^3 + 45h^2 + 22h + 144) / 8$,

а длина второго интервала не реализуемых значений $I_4 = [D(G_2) + 1, D(G_3) - 1]$ есть $|I_4| = (3h - 22)/2$, $h \geq 8$. ■

Вычисления подтвердили правильность всех найденных интервалов для графов с числом колец $5 \leq h \leq 15$.

4. Совпадение дистанции для графов с разным числом колец

В предыдущих пунктах рассматривались графы с совпадающими значениями дистанции внутри множества P_h при заданном значении h . Существуют ли графы с разным числом пятиугольных колец и совпадающими значениями дистанции, т.е. такие графы $G \in P_{h-k}$ и $H \in P_h$, $k > 0$, что $D(G) = D(H)$. Рассмотрим ближайшие классы P_{h-1} и P_h . Очевидным условием существования таких графов является непустота пересечения множества E_{h-1} и E_h .

УТВЕРЖДЕНИЕ 5. Если $h < 16$, то в классах P_{h-1} и P_h не существует графов с совпадающими значениями дистанции и разным числом колец.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Условие $E_{h-1} \cap E_h \neq \emptyset$ равносильно выполнению неравенства $D_{\max}(h-1) - D_{\min}(h) > 0$. Имеем $D_{\max}(h-1) - D_{\min}(h) = \frac{3}{4}h^3 - \frac{93}{8}h^2 + \frac{23}{4}h - \frac{87}{8} + C$, где $C = 0$ при h нечетном и $C = -1/8$ при h четном. Соответствующее уравнение имеет один вещественный корень и принимает при $h \geq 16$ положительные значения, а при $h < 16$ - отрицательные. ■

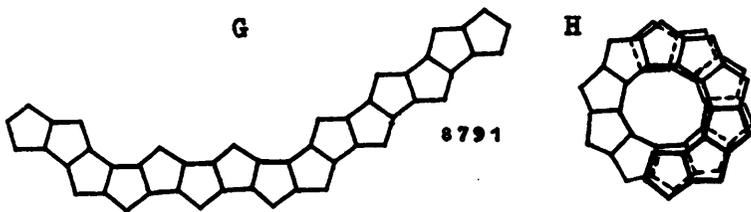


Рис. 9

Графы $G \in P_{15}$ и $H \in P_{16}$ на рис.9 имеют совпадающие дистанции, $D(G) = D(H) = 8791$, причем граф H обладает наименьшей дистанцией в классе P_{16} .

Пусть $k > 1$, тогда число колец, при которых могут существовать графы с совпадающими значениями дистанции в классах P_{h-k} и P_h , можно найти из неравенств

$$D_{\max}(h-k) - D_{\min}(h) = \frac{3}{4}h^3 - \frac{1}{8}h^2(54k+39) + \frac{1}{4}h(27k^2-45k+41) + \frac{1}{8}(-18k^3+45k^2-58k-56+8C(h-k)) > 0,$$

где $C(h)$ определялось выше. Отсюда следует, что графы с совпадающей дистанцией, число колец в которых различается на 2, могут существовать только при $h \geq 24$. Для $k = 3$ графы с этим свойством могут встретиться в классе графов с числом колец $h \geq 32$, а для $k = 4$ их следует искать среди графов с числом колец $h \geq 41$.

Л и т е р а т у р а

1. PLESNIK J. On the sum of all distances in a graph or digraph //J.Graph Theory. - 1984. - Vol. 8, N1. - P.1-21.

2. SKOROBOGATOV V.A., DOBRYNIN A.A. Metric analysis of graphs //MATCH. - 1988. - N23. -P.105-151.

3. SABLJIĆ A., TRINAJSTIĆ N. Quantitative structure-activity relationship: the role of topological indices //Acta Pharm. Jugosl. - 1982. - Vol.34. N 4. -P. 189-214.

4. 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.

5. TRINAJSTIĆ N. Chemical Graph Theory. - Boca Raton: CRC Press. - 1983. - Vol. 2.

6. GUTMAN I., POLANSKY O.E. Mathematical Concepts in Organic Chemistry. - Berlin a.o.: Springer. - 1986.

7. СТАНКЕВИЧ М.И., СТАНКЕВИЧ И.В., ЗЕФИРОВ Н.С. Топологические индексы в органической химии //Успехи химии. - 1988. - Т. 57. - С. 337-366.

8. ДОБРЫНИН А.А. Распределения значений дистанции графов неразветвленных гексагональных систем //Математические исследования в химической информатике. - Новосибирск, 1990.-Вып.136. - Вычислительные системы. -С. 61-141.

9. GUTMAN I. Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons: two theorems //Chem. Phys. Letters. - 1987. - Vol.136, N.2. - P. 134-136.

10. On Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons //Zbornik Radova Prirodno-matematičkog fakulteta u Kragujevcu /Gutman I., Marković S., Luković U., Radivojević V., Rančić S. - 1987. - Vol. 8. -P.15-34.

11. GUTMAN I., ŠOLTÉS L. The range of the Wiener index and its mean isomer degeneracy//Z.Naturforsch. - 1991. - Vol. 46a. -P. 865-868.

12. 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.

13. 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.

14. ДОБРЫНИН А.А. Дистанция молекулярных графов полициклических соединений //Анализ данных в экспертных системах. - Новосибирск, 1986. - Вып. 117: Вычислительные системы. -С.114 - 122.

15. GUTMAN I. On distances in some bipartite graphs //Publ. Inst. Math. - 1988. - Vol. 43(57). - P. 3-8.

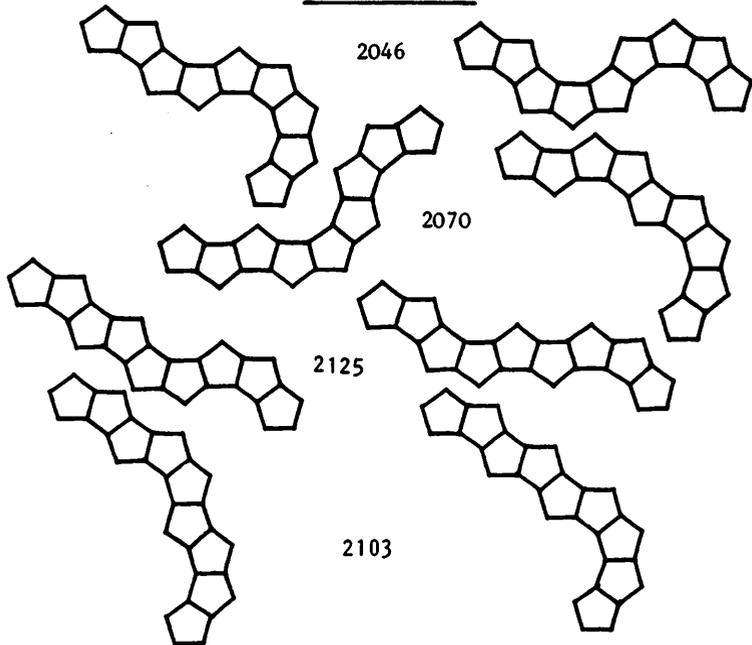
16. ДОБРЫНИН А.А. Генерация графов неразветвленных пентагональных и пентагексагональных систем //Математические методы в химической информатике. - Новосибирск, 1991. - Вып. 140: Вычислительные системы. - С. 143-206.

17. ДОБРЫНИН А.А. Изменение дистанции при локальных преобразованиях графов с циклами нечетной длины //Настоящий сборник. - С. 3-50.

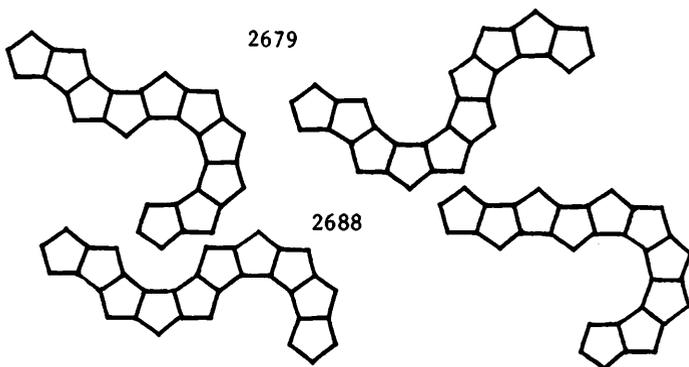
Поступила в ред.-изд.отд.
22 июня 1993 года

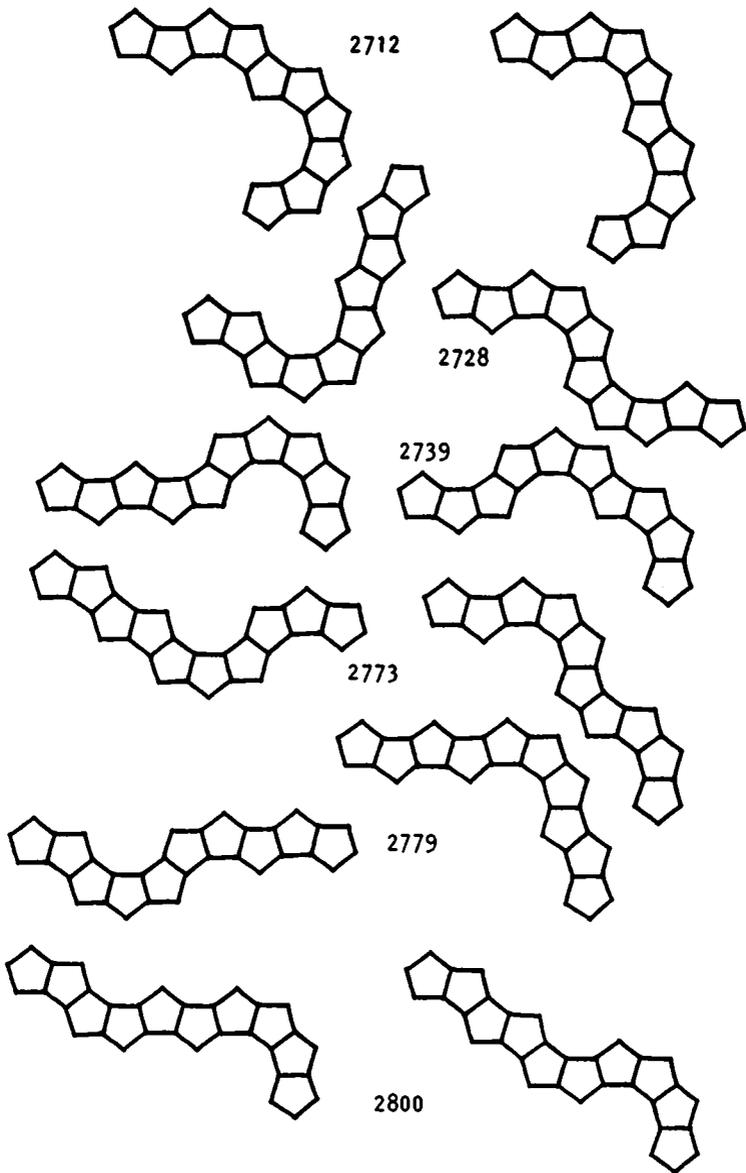
Приложение
Графы из максимальных классов вырождения

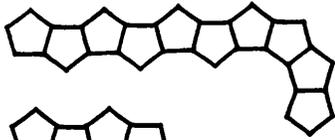
$h = 9, N = 2$



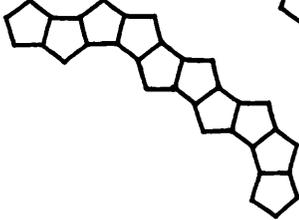
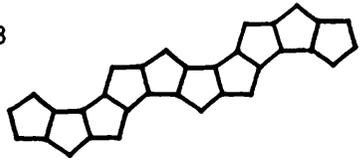
$h = 10, N = 2$



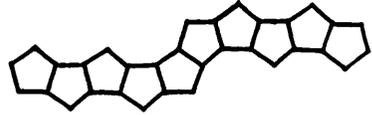




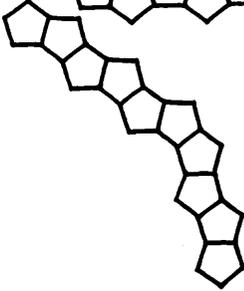
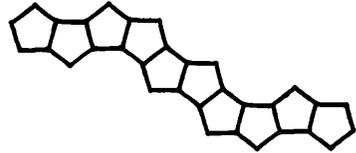
2818



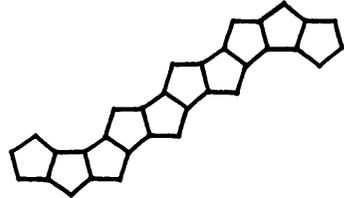
2830



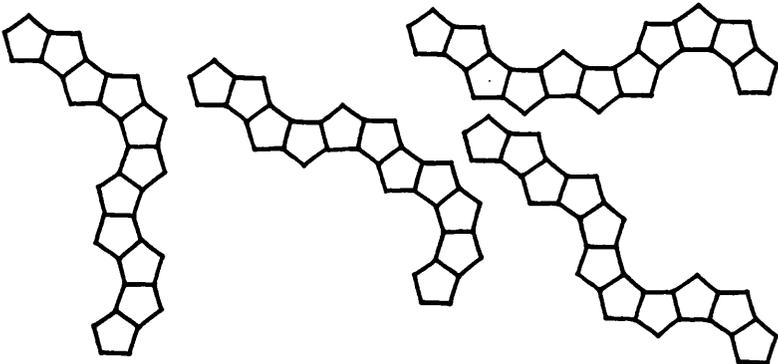
2840



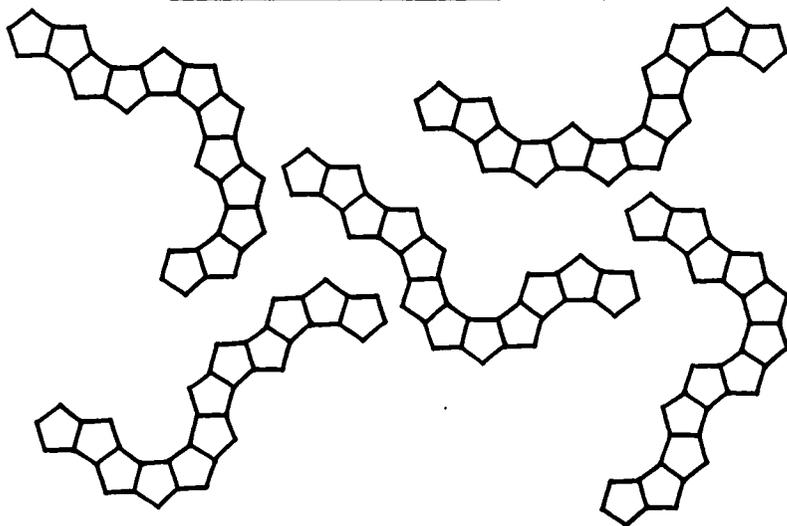
2845



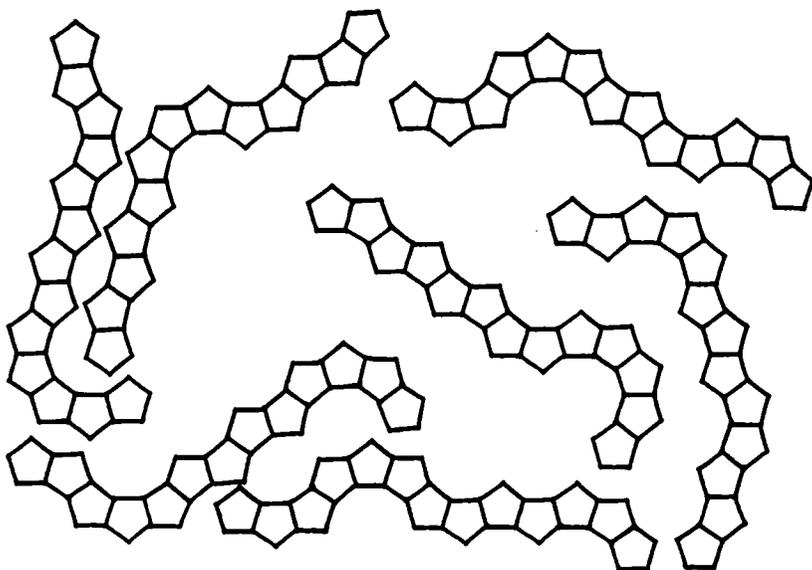
$h = 11, N = 4, D = 3601$



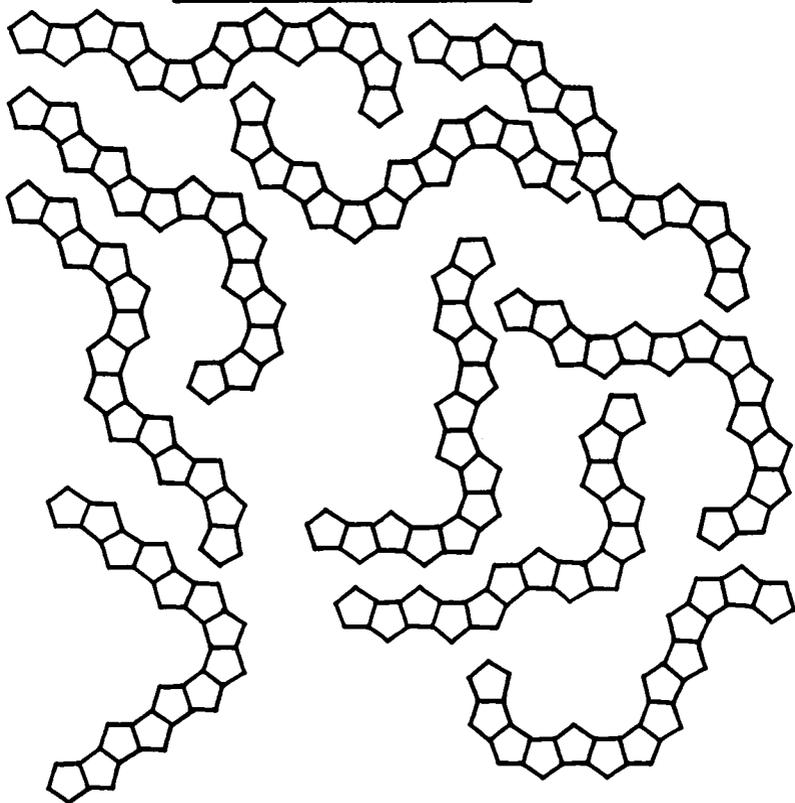
$h = 12, N = 5, D = 4498$



$h = 13, N = 7, D = 5765$



$h = 14, N = 10, D = 6977$



$h = 15, N = 18, D = 8360$

