ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Июль—декабрь 1997. Серия 2. Том 4, № 2, 3–9

УДК 519.17

БИЦИКЛИЧЕСКИЕ ГРАФЫ И ИХ РЕБЕРНЫЕ ГРАФЫ С СОВПАДАЮЩИМ ИНДЕКСОМ ВИНЕРА*)

А. А. Добрынин, И. Гутман, В. Йовашевич

Рассматривается инвариант $W(G)$ связных неориентированных графов G, равный сумме расстояний между всеми парами вершин графа G. Этот инвариант интенсивно изучается в теории графов и имеет многочисленные приложения. Приводятся результаты поиска графов, обладающих свойством $W(G) = W(L(G))$, где $L(G)$ есть реберный граф для G. Установлено, что имеется в точности 26, 166, 503 и 1082 бициклических графа с указанным свойством среди графов с 9, 10, 11 и 12 вершинами соответственно. Для всех наименьших графов приведены их диаграммы.

Введение

В работе рассматривается инвариант $W(G)$ связных неориентированных графов G без петель и кратных ребер, определяемый как сумма расстояний между всеми парами вершин в графе G, т. е.

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

где под расстоянием $d(u, v)$ между вершинами u и v понимается длина кратчайшей по числу ребер цепи, соединяющей вершины u и v в G. Этот инвариант изучается в работах по теории графов с конца 50-х гг. и известен под названиями «полный статус» [12], «тотальный статус» [2, с. 42], «дистанция графа» [4, 5], «трансмиссия» [17, 18], «сумма всех расстояний» [6, 20].

Некоторые авторы исследовали близкий инвариант, называемый «средняя дистанция» и равный $W(G)/\binom{p}{2}$ для p-вершинного графа [1, 3, 14]. Однако еще в 1947 г. американский химик Г. Винер использовал этот инвариант для установления корреляционных зависимостей

*) И. Гутман благодарит Математический институт Сербской академии наук (Белград) за финансовую поддержку.

между значениями инварианта W молекулярных графов и свойствами соответствующих химических соединений [19]. Библиография по применению инварианта W в химии насчитывает сотни наименований (см., например, обзоры [9, 10]). Так как Г. Винер, по-видимому, впервые исследовал и математические свойства этого инварианта, то в математической литературе он также называется индексом (или числом) Винера [7, 15, 16].

Реберный граф $L(G)$ для графа G определяется следующим образом. Каждому ребру графа G ставится в соответствие вершина графа $L(G)$. Две различные вершины в $L(G)$ являются смежными тогда и только тогда, когда соответствующие им ребра смежны в G. Впервые математические свойства индекса Винера для реберных графов исследовал Ф. Бакли [1]. К настоящему времени известно сравнительно мало результатов, касающихся $W(L(G))$ [1, 5, 8, 11]. В [5] сформулирован вопрос: существуют ли графы G (отличные от простого цикла) такие, что

$$W(G) = W(L(G)). \tag{1}$$

Характеризация графов, удовлетворяющих условию (1), представляет интерес, с одной стороны, для теории графов, так как точное соотношение между $W(G)$ и $W(L(G))$ известно только для деревьев. С другой стороны, нахождение таких графов может иметь применение при исследовании зависимости типа «структура — свойство» для соединений органической химии, так как индекс Винера интенсивно используется для установления структурного подобия молекулярных графов.

В работе найдено несколько семейств графов, удовлетворяющих равенству (1), в том числе все наименьшие графы с данным свойством.

1. Основные результаты

Напомним, что среди связных p-вершинных графов только простой цикл C_p изоморфен своему реберному графу $L(C_p)$. Обозначим через $\mathscr{G}_p$ множество всех связных p-вершинных графов, отличных от простого цикла C_p. Под моно- и бициклическими графами будут пониматься графы с цикломатическим числом $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$ соответственно.

Первые примеры графов со свойством (1) были построены в [11]. Необходимым условием существования таких графов является выполнение неравенства $\lambda \geqslant 2$.

Теорема 1 [11]. *Если G является ациклическим или моноциклическим графом, то $W(G) > W(L(G))$.*

Там же приводятся и бесконечные семейства графов, удовлетворяющие условию (1). При построении таких графов использовались два треугольника с одной общей вершиной, к которой присоединялись специально сконструированные деревья.

Теорема 2 [11]. *Существует бесконечно много бициклических графов, удовлетворяющих условию* (1).

В следующих утверждениях сформулированы результаты компьютерного поиска всех графов с малым числом вершин, удовлетворяющих условию (1).

Утверждение 1. *При любом $p \leqslant 8$ любой граф из $\mathcal{G}_p$ не удовлетворяет условию* (1).

Оказалось, что все графы с указанным свойством и числом вершин $p = 9, 10$ исчерпываются бициклическими графами.

Утверждение 2. *В $\mathcal{G}_9$ имеется точно 26 графов, удовлетворяющих условию* (1). *Все такие графы являются бициклическими.*

Утверждение 3. *В $\mathcal{G}_{10}$ имеется точно 166 графов, удовлетворяющих условию* (1). *Все такие графы являются бициклическими.*

Утверждение 4. *В $\mathcal{G}_{11}$ имеется точно 503 бициклических графа, удовлетворяющих условию* (1).

Утверждение 5. *В $\mathcal{G}_{12}$ имеется точно 1082 бициклических графа, удовлетворяющих условию* (1).

Утверждения 1–3 были установлены анализом всех графов из классов $\mathcal{G}_p$ для $p \leqslant 10$. Проверка равенства (1) для всех бициклических графов с числом вершин $p = 11,\ 12$ показала справедливость утверждений 4 и 5.

Известно, что $|\mathcal{G}_9| = 162\,079$ и $|\mathcal{G}_{10}| = 11\,716\,570$ [13]. Следовательно, среди графов из $\mathcal{G}_9$ и $\mathcal{G}_{10}$ доля бициклических графов G со свойством $W(G) = W(L(G))$ очень мала. Диаграммы графов, наименьших как по числу вершин ($p = 9$), так и по числу ребер ($q = 10$), приведены на рис. 1. Рядом с каждым графом указаны два числа. Первое из них есть порядковый номер графа; второе число является значением индекса Винера.

2. Структура бициклических графов

Для выяснения того, как устроены бициклические графы с числом вершин $p > 9$, был проведен анализ соединения циклов в графах друг с другом.

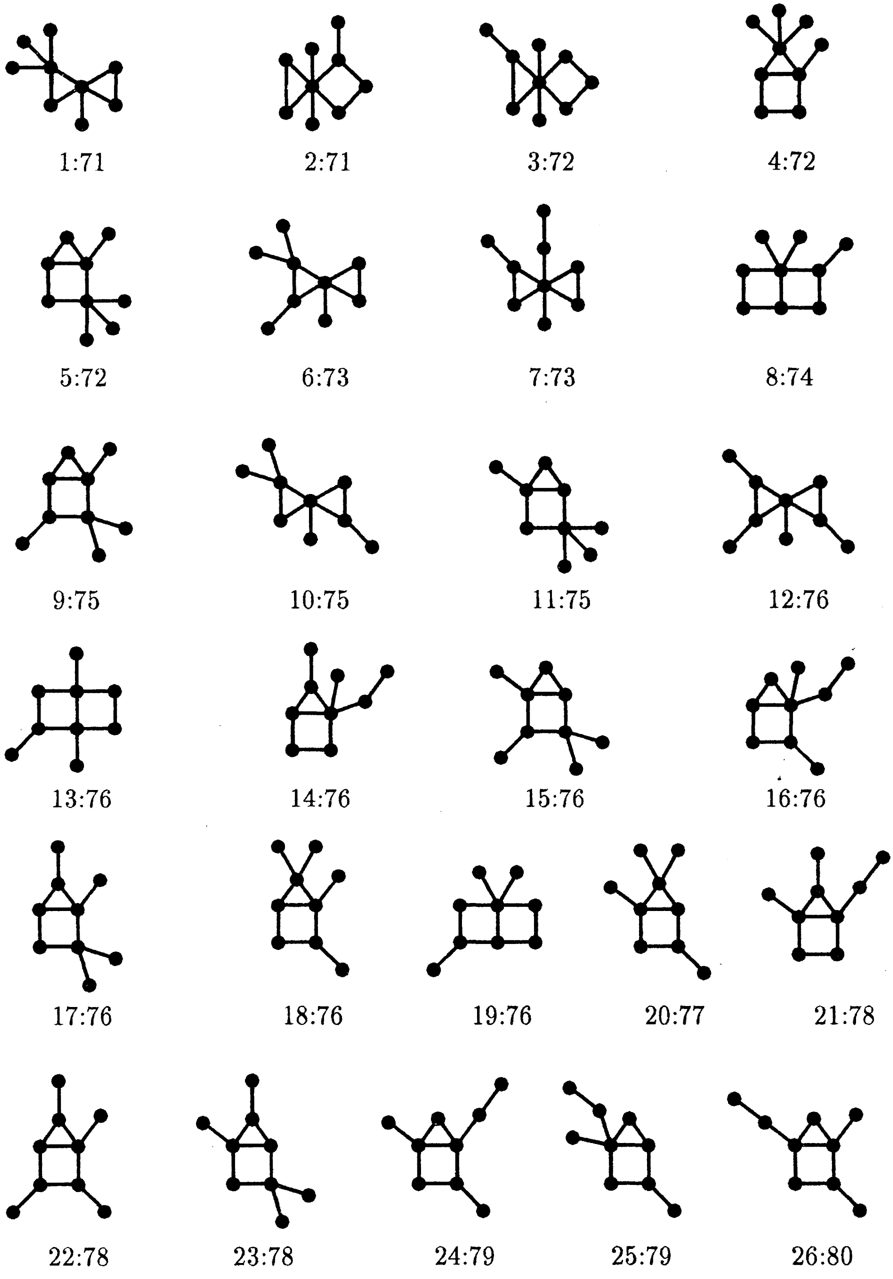

Рис. 1. Наименьшие графы со свойством $W(G) = W(L(G))$

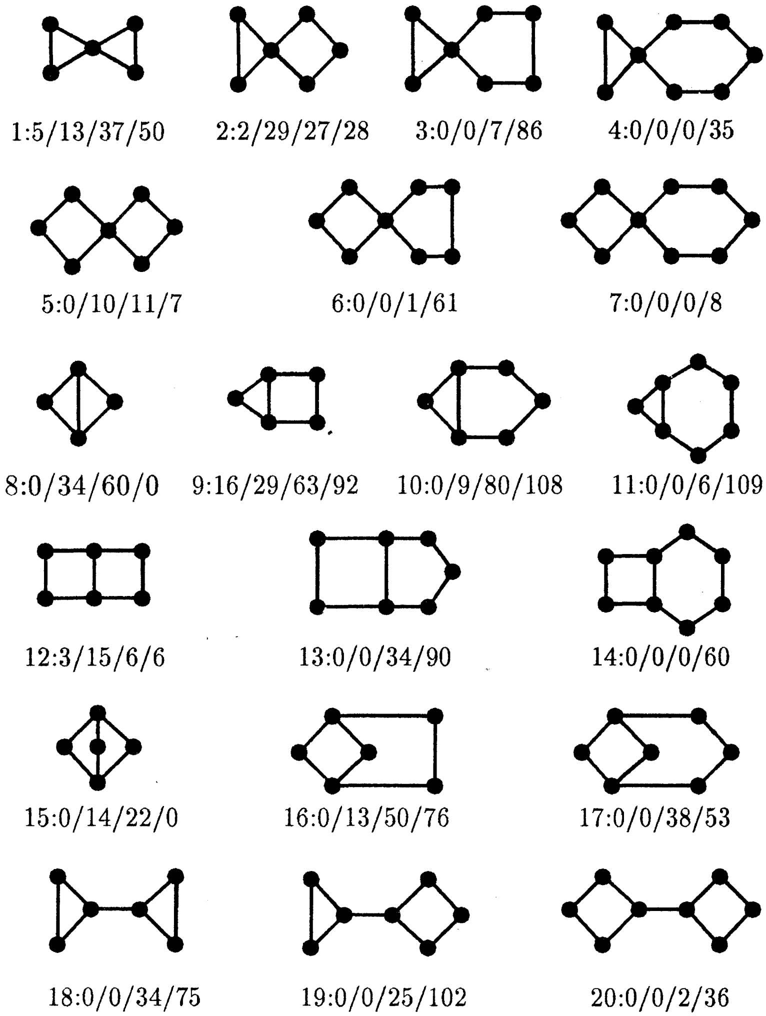

Рис. 2. Циклические части бициклических графов

Если из всех бициклических графов с p вершинами, $9 \leqslant p \leqslant 12$, удалить их древовидные ветви, то в результате останутся циклические части графов, изображенные на рис. 2. Рядом с каждой циклической частью указаны четыре числа. Первое число есть порядковый номер части; остальные числа показывают, сколько графов из $\mathcal{G}_p$ содержат данную циклическую часть при $p = 9,\ 10,\ 11,\ 12$ соответственно. Полезно заметить, что во всех рассмотренных графах присутствует хотя бы один треугольник или четырехугольник.

При $p \geqslant 12$ кроме бициклических графов найдены и другие графы, удовлетворяющие условию (1). Так, существует 71 граф с 12 вершинами и цикломатическим числом $\lambda = 3$ (при $p = 11$ графов с $\lambda = 3$ не существует). В связи с этим представляет интерес ответ на следующий вопрос.

Вопрос 1. Для каждого ли $\lambda \geqslant 4$ существуют такие графы G с цикломатическим числом λ, что $W(G) = W(L(G))$?

Так как 12-вершинные графы со свойством (1) были найдены для нескольких значений цикломатического числа ($\lambda = 2, 3$), то возникает и другой вопрос.

Вопрос 2. Каково наибольшее число λ такое, что среди всех p-вершинных графов имеется граф G с цикломатическим числом λ, удовлетворяющий условию (1).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Buckley F.** Mean distance in line graphs // Congr. Numer. 1981. V. 32. P. 153–162.
2. **Buckley F., Harary F.** Distance in Graphs. Redwood City, CA: Addison–Wesley Publ. Corp., 1990.
3. **Doyle J. K., Graver J. E.** Mean distance in a graph // Discrete Math. 1977. V. 17, N 2. P. 147–154.
4. **Entringer R. C., Jackson D. E., Snyder D. A.** Distance in graphs // Czechoslovak Math. J. 1976. V. 26, N 2. P. 283–296.
5. **Gutman I.** Distance of line graphs // Graph Theory Notes New York. 1996. V. 31. P. 49–52.
6. **Gutman I.** On distances in some bipartite graphs // Publ. Inst. Math. (Beograd). 1988. V. 43. P. 3–8.
7. **Gutman I.** Two distance-based graph invariants and their relation in the case of unicyclic graphs // Bull. Acad. Serbe Sci. Arts Cl. Sci. Math. Natur. 1996. V. 111. P. 19–29.
8. **Gutman I., Estrada E.** Topological indices based on the line graph of the molecular graph // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1996. V. 36. P. 541–543.
9. **Gutman I., Potgieter J. H.** Wiener index and intermolecular forces // J. Serb. Chem. Soc. 1997. V. 62. P. 185–192.
10. **Gutman I., Yeh Y. N., Lee S. L., Luo Y. L.** Some recent results in the theory of the Wiener number // Indian J. Chem. 1993. V. 32A. P. 651–661.
11. **Gutman I., Pavlović L.** More of distance of line graphs // Graph Theory Notes New York. 1997. V. 33. P. 14–18.
12. **Harary F.** Status and contrastatus // Sociometry. 1959. V. 22. P. 23–43.
13. **Harary F.** Graph Theory. Reading, MA: Addison–Wesley Publ. Corp., 1969.

14. **Hendry G. R. T.** Existence of graphs with prescribed mean distance // J. Graph Theory. 1986. V. 10, N 2. P. 173–175.
15. **Merris R.** An edge version of the matrix-tree theorem and the Wiener index // Linear and Multilinear Algebra. 1988. V. 25, N 4. P. 291–296.
16. **Merris R.** Laplacian matrices of graphs: a survey // Linear Algebra Appl. 1994. V. 197/198. P. 143–176.
17. **Plesník J.** On the sum of all distances in a graph or digraph // J. Graph Theory. 1984. V. 8, N 1. P. 1–21.
18. **Šoltés L.** Transmission in graphs: a bound and vertex removing // Math. Slovaca. 1991. V. 41, N 1. P. 11–16.
19. **Wiener H.** Structural determination of paraffin boiling points // J. Amer. Chem. Soc. 1947. V. 69. P. 17–20.
20. **Yeh Y. N., Gutman I.** On the sum of all distances in composite graphs // Discrete Math. 1994. V. 135, N 1–3. P. 359–365.

Адреса авторов:

А. А. Добрынин
Институт математики
им. С. Л. Соболева СО РАН,
пр. Академика Коптюга, 4,
630090 Новосибирск, Россия.
E-mail: dobr@math.nsc.ru
И. Гутман, В. Йовашевич
Faculty of Science,
University of Kragujevac,
P. O. Box 60, YU-34000,
Kragujevac, Yugoslavia.
E-mail:
gutman@uis0.uis.kg.ac.yu

Статья поступила
11 ноября 1997 г.