

ИНДЕКС ВИНЕРА ДЛЯ ДЕРЕВЬЕВ И ГРАФОВ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ*)

А. А. Добрынин, И. Гутман

Рассматривается инвариант связных неориентированных графов, равный сумме расстояний между всеми парами вершин графа. Этот инвариант, называемый индексом или числом Винера, интенсивно изучается в теории графов и имеет многочисленные приложения. В работе дается обзор методов вычисления индекса Винера для деревьев и графов гексагональных систем. Обсуждается влияние структурных характеристик графов на значение инварианта.

Введение

Инварианты графов, определяемые как функции от расстояний между вершинами графа, находят многочисленные приложения в областях, для которых изучаемые объекты или отношения между ними моделируются графами. В качестве моделей структурных формул химических соединений традиционно используются молекулярные графы [7, 52, 91]. Любой (численный) инвариант молекулярного графа, оказывающийся полезным в тех или иных задачах химии, в литературе по математической химии называется *топологическим индексом* [8]. Термин «топологический» подчеркивает здесь то, что при построении таких инвариантов игнорируются реальные физические параметры молекул — длины связей, углы между ними и т. п., а учитываются лишь связи между атомами. Топологические индексы, как правило, отражают структуру описываемой молекулы (разветвленность, компактность) и часто рассматриваются как структурные дескрипторы [11, 52]. Большинство топологических индексов используются для моделирования различных физико-химических свойств органических соединений, в том числе имеющих значение для фармакологии [6, 8, 9, 83]. Успех применения индексов для прогнозирования свойств соединений основан на том, что

*) Расширенная версия доклада, представленного на Международную Сибирскую конференцию по исследованию операций (Новосибирск, 22–27 июня 1998 г.). И. Гутман благодарит Математический институт Сербской академии наук (Белград) за финансовую поддержку.

молекулярные графы с «похожей» структурой (и с близкими значениями индекса как мерой подобия структур) соответствуют соединениям со сходными свойствами.

Пусть G — связный неориентированный граф без петель и кратных ребер. Обозначим через $V(G)$ и $E(G)$ множество вершин и множество ребер в G , а через $d_G(u, v)$ расстояние между вершинами u и v в G , т. е. число ребер в кратчайшей цепи, соединяющей вершины u и v .

В работе рассматривается инвариант $W(G)$ (индекс Винера) графа G , определяемый следующим образом:

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d_G(u, v), \quad (1)$$

т. е. суммирование осуществляется по всем двухэлементным подмножествам $\{u, v\}$ из $V(G)$.

В 1947 г. американский химик Г. Винер использовал этот инвариант для установления корреляционных зависимостей между значениями индекса Винера и точкой кипения алканов, молекулярные графы которых являются деревьями [92]. Наиболее хорошо индекс Винера зарекомендовал себя при характеристизации и прогнозировании свойств двух классов молекулярных графов — ациклических соединений и ароматических углеводородов. Библиографию по применению индекса Винера в химии можно найти в обзорах [55, 60, 79].

Интенсивные теоретико-графовые исследования индекса Винера были инициированы в 1976 г. работой [29]. Индекс Винера известен также под названиями «тотальный статус» [13, с. 42], «дистанция графа» [1, 29, 87], «трансмиссия» [80, 88], «сумма всех расстояний» [58, 89]. Ряд работ посвящен близкому инварианту («средняя дистанция»), равному $W(G)/\binom{p}{2}$ для p -вершинного графа [18, 28].

При исследовании индекса Винера (и других инвариантов) основное внимание уделяется следующим взаимосвязанным проблемам: (а) как инвариант зависит от структуры графа; (б) как эффективно вычислять инвариант, в том числе без применения компьютера. Как правило, исследования индекса Винера и средней дистанции посвящены нахождению нижних и верхних оценок инвариантов в терминах структурных параметров графов или других известных инвариантов. Такие оценки были получены для произвольных графов, вершинно и реберно 2-связных графов, k -хроматических графов и блоков [80, 89, 90]. Известны оценки средней дистанции графа через степени вершин, диаметр и собственные числа, числа независимости и доминирования графа [18, 19, 68, 75, 93]. В ряде работ исследовалось изменение инварианта при операциях над графами (удаление вершин и т. п.) [80, 88]. При рассмотрении специфических классов графов, имеющих прикладное значение, удается

более детально изучить величину индекса Винера. Особый интерес представляет нахождение легко проверяемых условий, обеспечивающих равенство индексов Винера. Это можно сделать на основе формул для W , включающих простые структурные параметры графа.

Наибольшее продвижение в решении указанных выше задач было достигнуто для деревьев и графов гексагональных систем. В работе дается обзор основных методов вычисления индекса Винера для графов из этих классов.

1. Индекс Винера для деревьев

Для многих конкретных деревьев и классов деревьев найдены точные значения индекса Винера. Наиболее простыми являются его значения для цепи P_p и звезды S_p на p вершинах:

$$W(P_p) = \binom{p+1}{3} \quad \text{и} \quad W(S_p) = (p-1)^2. \quad (2)$$

Точные формулы для индекса Винера деревьев различных типов приводятся, например, в [11, 62, 81, 82]. Методы получения таких формул были развиты в [33, 70]. В [29] и многих последующих работах показано, что для произвольного p -вершинного дерева T , отличного от цепи и звезды, справедливы неравенства

$$W(S_p) < W(T) < W(P_p). \quad (3)$$

Интерес к конкретным деревьям обусловлен получением новых молекул с древовидной структурой и малоизученными свойствами. Примером могут служить сильно ветвящиеся деревья, являющиеся молекулярными графами дендримеров [59, 60]. На рис. 1 приводятся примеры таких деревьев $T_{k,d}$, где d есть степень невисячих вершин, а k — расстояние от центральной вершины до висячих. Рядом изображен молекулярный граф арборола T_a с 253 вершинами из другого семейства дендримеров. Об экспериментальном синтезе таких разветвленных молекул сообщается в [60]. В [59] показано, что при любом $d \geq 3$ индекс Винера дерева $T_{k,d}$ с числом вершин $p(T_{k,d}) = 1 + d[(d-1)^k - 1]/(d-2)$ равен

$$W(T_{k,d}) = \frac{1}{(d-2)^3} \left((d-1)^{2k} [kd^3 - 2(k+1)d^2 + d] + 2d^2(d-1)^k - d \right).$$

При любом $d \geq 3$ и $k \rightarrow \infty$ справедлива асимптотическая формула $W \sim kp^2$. В [60] указывается, что это имеет значение для понимания фрактальной природы сильно ветвящихся молекул. Для приложений в химии наиболее интересны случаи $d = 3, 4$ (см. рис. 1), в которых $W(T_{k,3}) = (9k - 15)2^{2k} + 18 \cdot 2^k - 3$ и $W(T_{k,4}) = (4k - 7/2)3^{2k} + 4 \cdot 3^k - 1/2$.

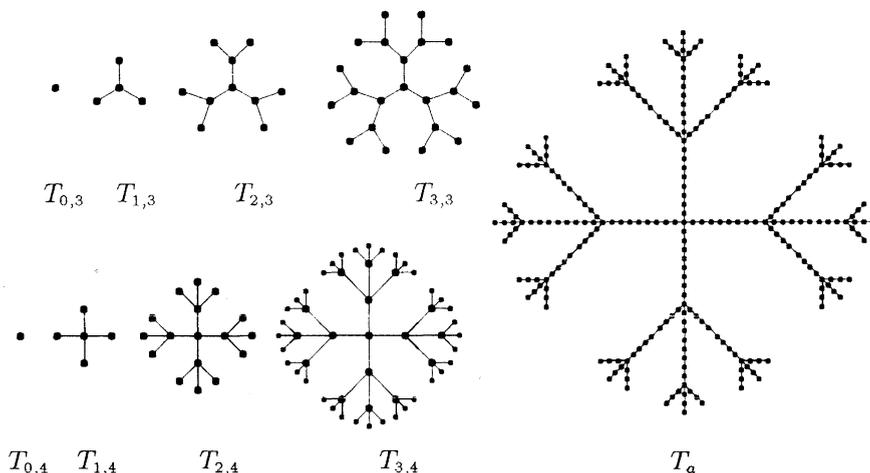


Рис. 1. Молекулярные графы дендримеров

Один из первых методов, предложенных для вычисления индекса Винера, основан на использовании рекуррентных соотношений. Дистанция вершины $d_G(v)$ в графе G определяется как сумма расстояний между вершиной v и остальными вершинами графа G , т. е. $d_G(v) = \sum_{u \in V(G)} d_G(v, u)$.

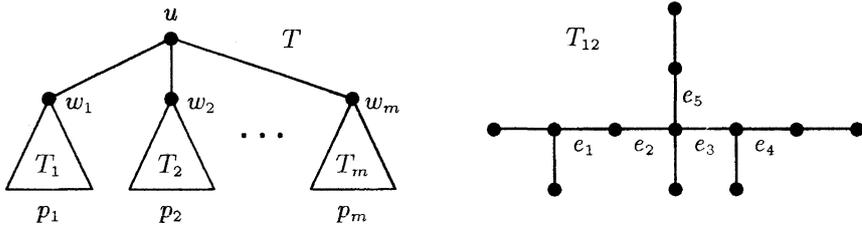
Обозначим через $G - v$ граф, полученный удалением из графа G вершины v и всех инцидентных ей ребер.

Пусть вершина v является висячей в дереве T , а вершина u смежна с v . Пусть множество всех пар вершин дерева T разбито на две группы, в первой из которых каждая пара содержит вершину v , а любая пара из другой группы не содержит v . Тогда сумма расстояний между вершинами в парах второй группы есть индекс Винера дерева $T - v$. Если $x \in V(T - v)$, то из равенства $d_T(v, x) = d_{T-v}(u, x) + 1$ следует, что сумма расстояний между вершинами в парах первого типа равна $p(T) - 1 + d_{T-v}(u)$. Поэтому

$$W(T) = W(T - v) + d_{T-v}(u) + p(T - v), \tag{4}$$

т. е. для вычисления $W(T)$ нужно знать индекс Винера и дистанцию вершины в некотором поддереве дерева T . Обобщая формулу (4), Е. Кэнфилд и др. предложили способ рекуррентного вычисления индекса Винера произвольного дерева [14].

Пусть при $m \geq 2$ деревья T_1, T_2, \dots, T_m образуют лес, в дереве T_i содержится p_i вершин и $w_i \in V(T_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$. Любое дерево может быть представлено в виде соединения вершины u с каждой из вершин w_1, w_2, \dots, w_m (рис. 2).

Рис. 2. Вершина ветвления u в дереве T

Утверждение 1 [14]. Пусть произвольное p -вершинное дерево T представлено в указанном выше виде. Тогда

$$W(T) = \sum_{i=1}^m (W(T_i) + (p - p_i)d_{T_i}(w_i) - p_i^2) + p(p - 1). \quad (5)$$

Применение формулы (5) требует вычисления расстояний между вершинами дерева и с практической точки зрения уступает по удобству другим изложенным ниже методам. Известны также нерекуррентные формулы для нахождения индекса Винера, включающие дистанции вершин.

Утверждение 2 [26]. Пусть T — произвольное p -вершинное дерево. Тогда

$$W(T) = \frac{1}{4} \left(p^2(p - 1) - \sum_{(u,v) \in E(T)} [d_T(v) - d_T(u)]^2 \right).$$

Эта формула показывает, как индекс Винера зависит от разности дистанций для двух смежных вершин. В p -вершинном дереве для двух таких вершин, одна из которых является висячей, эта разность равна $(p - 2)^2$ и является максимально возможной.

Определение индекса Винера равенством (1) можно рассматривать как полусумму величин $d_T(v)$, взятых с единичным весом. Следующая формула показывает, как можно вычислять индекс Винера, если в качестве веса вершины выбрана ее степень.

Утверждение 3 [66]. Пусть T — произвольное p -вершинное дерево. Тогда

$$W(T) = \frac{1}{4} \left(p(p - 1) + \sum_{v \in V(T)} \deg(v)d_T(v) \right). \quad (6)$$

Известны три разных доказательства этой формулы [26, 35, 66]. Сумма из (6) послужила основой нового инварианта произвольных графов, имеющего интересные приложения в химии [27, 35, 79].

Более простой и эффективный способ вычисления инварианта W предложен в [92]. Он основан на «изменении порядка суммирования» и состоит в следующем. Предположив, что все ребра в p -вершинном дереве T перенумерованы числами $1, 2, \dots, p-1$, рассмотрим предикат $P_T(u, v, i)$, задаваемый следующим образом:

$$P_T(u, v, i) = \begin{cases} 1, & \text{если } i\text{-е ребро в } T \text{ принадлежит кратчайшей} \\ & \text{цепи, соединяющей вершины } u \text{ и } v; \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Тогда, пользуясь тем, что любые две вершины в T соединены единственной цепью минимальной длины, имеем

$$d_G(u, v) = \sum_{i=1}^{p-1} P_T(u, v, i).$$

Отсюда и из (1) следует, что

$$W(T) = \sum_{\{u,v\} \subset V(T)} \sum_{i=1}^{p-1} P_T(u, v, i) = \sum_{i=1}^{p-1} \sum_{\{u,v\} \subset V(T)} P_T(u, v, i).$$

Ясно, что при каждом фиксированном i внутренняя сумма равна числу таких пар $\{u, v\}$, что в кратчайшей цепи, соединяющей вершины u и v , содержится i -е ребро.

Обозначим через $n_T(e)$ и $n'_T(e)$ количества вершин дерева T в двух компонентах связности, образующихся после удаления из T ребра e .

Утверждение 4 [92]. Если T — произвольное дерево, то

$$W(T) = \sum_{e \in E(T)} n_T(e) n'_T(e). \quad (7)$$

Это утверждение, полученное Г. Винером в 1947 г., содержало первый вычислительный метод для нахождения W . Несмотря на то, что его работа часто цитировалась в литературе, формула (7) была забыта до середины 80-х гг. (вновь приведена в [52]). Определение индекса Винера равенством (1) для произвольных графов сделано в [61] и с тех пор стало общепринятым, в том числе и для деревьев.

Применим формулу (7) для вычисления индекса Винера дерева T_{12} с 12 вершинами, изображенного на рис. 2. Так как $n_T(e) + n'_T(e) = p(T)$ для любого ребра e , то достаточно подсчитать вершины дерева, лежащие с одной стороны от e . Для любого концевое ребра e дерева имеем $n(e)n'(e) = 1 \cdot (p-1) = 11$. Ребро e_1 внесет в сумму (7) вклад, равный $3 \cdot 9 = 27$, для каждого ребра e_2 и e_3 имеем $4 \cdot 8 = 32$, и, наконец,

ребрам e_4 и e_5 соответствует произведение $2 \cdot 10 = 20$. Следовательно, $W(T_{12}) = 6 \cdot 11 + 27 + 2 \cdot 32 + 2 \cdot 20 = 197$.

Величины, аналогичные $n_T(e)$ и $n'_T(e)$, могут быть определены для ребра $e = (x, y)$ произвольного графа G как

$$\begin{aligned} n_G(e) &= |\{v \mid v \in V(G), d_G(v, x) < d_G(v, y)\}|, \\ n'_G(e) &= |\{v \mid v \in V(G), d_G(v, y) < d_G(v, x)\}|. \end{aligned}$$

Применение формулы (7) к произвольным графам привело к появлению нового инварианта, для которого получены содержательные математические результаты (см. обзор [43]). Другое обобщение формулы (7) предложено в [48, 64] применительно к двоичным графам Хемминга.

Естественными характеристиками структуры дерева являются ветвления и линейные сегменты. Ветвления дерева порождаются вершинами со степенью более 2, которые называются *вершинами ветвления*. Очевидно, число вершин ветвления в p -вершинном дереве не превышает $(p - 2)/2$. *Сегментом дерева T* называется его простая цепь, концевые вершины которой являются либо вершинами ветвления, либо висячими вершинами в T , а все внутренние вершины цепи имеют в T степень 2. Например, все гомеоморфно сводимые деревья имеют одинаковое число сегментов. Длину сегмента S (число его ребер) обозначим через l_S . Введенные структурные характеристики по-разному влияют на индекс Винера деревьев заданного порядка. Увеличение количества и длин сегментов в дереве с фиксированным числом вершин приводит, вообще говоря, к увеличению W , в то время как возрастание числа вершин ветвления и их степеней влечет уменьшение W .

Формула (7) допускает простое обобщение, если вместо ребер рассматривать сегменты графа. Пусть величины $n_T(S)$ и $n'_T(S)$ равны количеству вершин дерева T в двух компонентах связности, образующихся после удаления из дерева сегмента S , т. е. всех ребер и внутренних вершин из S . При удалении любого сегмента S из дерева T имеем $n_T(S) + n'_T(S) = p(T) - l_S + 1$.

Утверждение 5. Для произвольного p -вершинного дерева T

$$W(T) = \sum n_T(S) n'_T(S) l_S + \frac{1}{6} \sum l_S(l_S - 1)(3p - 2l_S + 1), \quad (8)$$

где суммирование ведется по всем сегментам S дерева.

Если каждое ребро графа является сегментом, т. е. $l_S = 1$ для всех S , то формулы (7) и (8) совпадают. Если все ребра дерева принадлежат одному сегменту, т. е. T есть цепь, то первая сумма в (8) равна $p - 1$. На примере молекулярного графа арборола T_a (см. рис. 1) видно существенное сокращение вычислений при применении формулы (8) по сравнению

с формулой (7). Вместо подсчета числа вершин в соответствующих множествах для 21 неэквивалентного ребра дерева достаточно подсчитать их для 3 сегментов с длинами 3 и 9 (из трех групп с 36, 12 и 4 сегментами). Тогда $W(T_a) = 36[1 \cdot (253 - 3) \cdot 3] + 12[10 \cdot (253 - 18) \cdot 9] + 4[55 \cdot (253 - 63) \cdot 9] + (36 \cdot 6 \cdot (3 \cdot 253 - 6 + 1) + 16 \cdot 72 \cdot (3 \cdot 253 - 18 + 1))/6 = 826\,608$.

Дж. Дойл и Дж. Грэвер предложили метод вычисления индекса Винера, основанный на использовании характеристик ветвления дерева [28]. Пусть u есть вершина ветвления в дереве T . Тогда структура дерева T может быть задана в виде, изображенном на рис. 2, с висячими ветвями-поддеревьями T_1, T_2, \dots, T_m порядков p_1, p_2, \dots, p_m , где $m > 2$.

Утверждение 6 [28]. Для произвольного p -вершинного дерева T

$$W(T) = \binom{p+1}{3} - \sum_{1 \leq i < j < k \leq m} p_i p_j p_k, \quad (9)$$

где первое суммирование ведется по всем вершинам степени не менее 3.

В этой формуле каждой вершине ветвления соответствует по крайней мере одно слагаемое вида $p_i p_j p_k$. Напомним, что первый член в правой части (9) есть максимальное значение индекса Винера в классе p -вершинных деревьев (см. (3)). В звезде S_p каждый сегмент имеет минимально возможную длину, невисячая вершина имеет максимальное ветвление и $W(S_p) = \binom{p+1}{3} - \binom{p-1}{3}$. Применим формулу (9) для дерева T_{12} , изображенного на рис. 2. Две вершины степени 3 внесут в сумму значения $1 \cdot 1 \cdot 9$ и $1 \cdot 2 \cdot 8$. Для вершины степени 4 сумма произведений порядков поддеревьев равна $1 \cdot 2 \cdot 4 + 1 \cdot 2 \cdot 4 + 1 \cdot 4 \cdot 4 + 2 \cdot 4 \cdot 4 = 64$. В итоге получим $W(T_{12}) = \binom{13}{3} - (9 + 16 + 64) = 197$.

Формула Дойла–Грэвера выполняется также для геодезических графов, в которых между любыми двумя вершинами имеется единственная кратчайшая цепь [13]. Применения и многочисленные специальные случаи формулы (9) обсуждаются в [33]. Подробное сравнение выражений (7) и (9) дано в [32]. Использование метода Дойла–Грэвера для сильно разветвленных симметричных деревьев (дендримеров) приводится в [59]. Если вершины дерева имеют степень не более 3, то равенство (9) принимает более простой вид

$$W(T) = \binom{p+1}{3} - \sum p_1 p_2 p_3. \quad (10)$$

Отметим, что на основе приведенных выше выражений не было найдено условий, обеспечивающих совпадение индекса Винера для деревьев из сколько-нибудь больших классов. Следующий пример иллюстрирует использование (9) для нахождения деревьев конкретного вида с равными

индексами Винера. Пусть p -вершинные деревья T и T' имеют единственную вершину ветвления степени 3, т. е. состоят из трех ветвей с числом вершин p_1, p_2, p_3 и p'_1, p'_2, p'_3 соответственно. Тогда формула (9) принимает вид $W(T) = \binom{p+1}{3} - p_1 p_2 p_3$, и для таких деревьев значение W одно и то же тогда и только тогда, когда $p_1 p_2 p_3 = p'_1 p'_2 p'_3$ и $p_1 + p_2 + p_3 = p'_1 + p'_2 + p'_3 = p - 1$. Анализ этих соотношений показывает, что среди деревьев с числом вершин $p \leq 30$ существует 29 пар неизоморфных деревьев с совпадающим индексом Винера. Наименьшие деревья имеют 14 вершин и ветви из 1, 6, 6 и 2, 2, 9 вершин. Три дерева с попарно равными значениями W появляются впервые при $p = 40$ и имеют ветви из 4, 15, 20; 5, 10, 24 и 6, 8, 25 вершин.

Обозначим через $\Delta(G)$ матрицу порядка p , диагональные элементы которой суть степени вершин графа G , а все остальные элементы равны нулю. Матрица Лапласа (или матрица Кирхгофа) $L(G)$ определяется как

$$L(G) = \Delta(G) - A(G),$$

где $A(G)$ обозначает матрицу смежности графа. Обозначим через $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ собственные числа матрицы Лапласа, полагая $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$. Тогда для произвольных графов $\lambda_p = 0$, а для связных графов дополнительно выполняется $\lambda_{p-1} > 0$. Основные свойства спектров графов приводятся в обзорах [74, 76].

Следующий результат, устанавливающий связь между индексом Винера для дерева T и спектром матрицы Лапласа для T , получен несколькими авторами.

Утверждение 7 [72, 73, 75]. Пусть T — произвольное p -вершинное дерево и $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$. Тогда

$$W(T) = p \sum_{i=1}^{p-1} \frac{1}{\lambda_i}. \quad (11)$$

Эта формула интересна тем, что связывает различные по своей природе характеристики графа. Возможные химические следствия равенства (11) обсуждаются в [49, 77]. Можно было бы ожидать, что привлечение аппарата линейной алгебры поможет открыть новые свойства индекса Винера. Однако к настоящему моменту известны лишь результаты из [16], которые использовались для установления связи индекса Винера с некоторыми инвариантами графов, представляющими интерес для химии [15].

В ряде работ исследовался вопрос о том, какие числа могут быть индексом Винера для деревьев (и других графов). Вопрос о четности расстояний между вершинами деревьев изучался в [71]. Пусть связный

двудольный граф G имеет p_1 вершин в одной доле и p_2 вершин в другой. Тогда значение $W(G)$ нечетно тогда и только тогда, когда числа p_1 и p_2 нечетны [10, 34]. В частности, все деревья с нечетным числом вершин имеют четный индекс Винера. Для деревьев, в которых имеются совершенные паросочетания, справедливо следующее

Утверждение 8 [56]. Пусть в p -вершинных деревьях T и T' имеются совершенные паросочетания. Тогда

$$W(T) \equiv W(T') \pmod{4}.$$

Отсюда следует, что индекс Винера дерева с совершенным паросочетанием будет четным тогда и только тогда, когда число вершин дерева делится на 4.

Вопрос о том, какие числа могут быть индексом Винера в случае произвольных или двудольных графов, решен в [58]. Но для класса деревьев вопрос остается открытым. В [58] сформулирована следующая

Гипотеза 1. Количество чисел, которые не могут быть индексом Винера для деревьев, конечно.

Компьютерный поиск, проведенный в [69], показал, что следующие числа не могут быть индексом Винера для деревьев: 2, 3–8, 11–15, 17, 19, 21–24, 26, 27, 30, 33, 34, 37–39, 41, 43, 45, 47, 51, 53, 55, 60, 61, 69, 73, 77, 78, 83, 85, 87, 89, 91, 99, 101, 106, 113, 147, 159. Если существует другое запрещенное число, то оно должно быть больше 1206. Эти результаты приводят к более сильной гипотезе [69].

Гипотеза 2. Существует в точности 49 чисел, которые не могут быть индексом Винера для деревьев. Все такие числа содержатся в приведенном выше списке.

В заключение рассмотрим изменение индекса Винера при некоторых операциях над деревьями. В 1981 г. Ф. Бакли исследовал связь между значениями индекса Винера для дерева и его реберного графа. Полученное соотношение оказалось достаточно простым.

Утверждение 9 [12]. Пусть T — произвольное p -вершинное дерево и $L(T)$ — его реберный граф. Тогда

$$W(L(T)) = W(T) - \binom{p}{2}. \quad (12)$$

Это утверждение заново открыто в [44] и обобщено как для произвольных графов, так и для других инвариантов, основанных на расстояниях в деревьях [36, 39]. Из (12) следует, что не существует таких

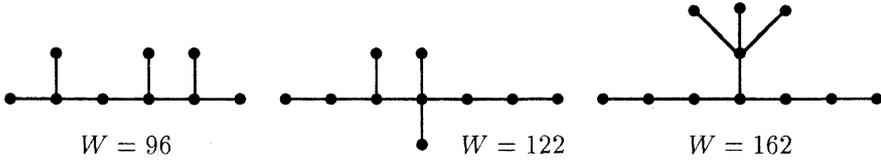


Рис. 3. Наименьшие деревья со свойством $W(T) = W(L(L(T)))$

деревьев, что $W(T) = W(L(T))$. Известно, что наименьшие графы с таким свойством имеют не менее двух циклов [3, 36, 46]. Однако существуют деревья T такие, что $W(T) = W(L(L(T)))$. Среди деревьев с числом вершин $p \leq 12$ имеется три таких дерева (рис. 3). Итерированный реберный граф $L^n(T)$ дерева T определяется как $L^n(T) = L(L^{n-1}(T))$, $n \geq 2$. Так как с возрастанием n число вершин в графе $L^n(T)$ быстро растет, то при достаточно больших n всегда выполняется неравенство $W(T) < W(L^n(T))$. В настоящее время не известно таких деревьев T , что $W(T) = W(L^n(T))$ при некотором $n \geq 3$.

Следующие преобразования дерева приводят к изменению его основных характеристик — увеличению длин сегментов и количества вершин ветвления. Пусть дерево T' получено k -подразбиением дерева T , т. е. на каждое ребро T добавлено k новых вершин (длина каждого сегмента в T увеличивается в $k + 1$ раз). Применяя формулу Дойла–Грэвера, нетрудно установить связь между индексами Винера этих деревьев. Если поддерево T_i для некоторой вершины ветвления в T состоит из p_i вершин (см. рис. 2), то в T' соответствующее поддерево имеет $p_i + (p_i - 1)k + k = (k + 1)p_i$ вершин. Число вершин в дереве T' равно $p' = k(p - 1) + p$.

Утверждение 10. Пусть T — произвольное дерево и T' — его k -подразбиение. Тогда

$$W(T') = (k + 1)^3 W(T) + \binom{p' + 1}{3} - (k + 1)^3 \binom{p + 1}{3}. \quad (13)$$

При наименьшем подразбиении ($k = 1$) индексы Винера деревьев T и T' связаны соотношением $W(T') = 8W(T) - 2p(p - 1)$. Если же на каждое ребро T добавить p новых вершин, то формула (13) примет вид $W(T') = (p + 1)^3 W(T) - (3p^2 + 2p + 1) \binom{p+1}{3}$.

Пусть дерево T^* построено из дерева T добавлением вершин так, что каждая вершина T становится смежной с k новыми висячими вершинами. Дерево T^* имеет $p^* = p(k + 1)$ вершин и называется *колючим деревом* для T [40]. Степень каждой вершины дерева T увеличивается на k , а при $k \geq 2$ любая невисячая вершина $v \in V(T^*)$ является вершиной ветвления и все сегменты состоят из одного ребра.

Утверждение 11 [40]. Пусть T — произвольное p -вершинное дерево и T^* — его колючее дерево с $p^* = p(k + 1)$ вершинами. Тогда

$$W(T^*) = (k + 1)^2 W(T) + 2 \binom{p^*}{2} - 2 \binom{p}{2} - kp^2.$$

Если каждая вершина дерева T становится смежной с одной новой вершиной ($k = 1$), то $W(T^*) = 4W(T) + p(2p - 1)$, а если $k = p$, то $W(T^*) = (p + 1)^2 W(T) + p^2(p^2 + p - 1)$.

Пусть каждая вершина $v \in V(T)$ смежна с $\deg(v)$ новыми висячими вершинами в T^* . Тогда $W(T^*) = 9W(T) + (p - 1)(p^* - 3) = 9W(T) + (p - 1)(3p - 5)$. Если константа m больше максимальной степени вершин в T и $k = m - \deg(v)$ для каждой вершины $v \in V(T)$, то $W(T^*) = (m - 1)^2 W(T) + (p^* - 1)^2 = (m - 1)^2 W(T) + [(m - 1)p + 1]^2$ [40].

2. Индекс Винера графов гексагональных систем

Пусть в правильной гексагональной решетке, расположенной на плоскости, сделан обход по сторонам шестиугольников так, что полученная замкнутая ломаная не имеет самопересечений. Тогда множество всех шестиугольников в ограниченной этой ломаной области образует конечную гексагональную систему. Таким системам естественным образом ставятся в соответствие связанные графы, называемые *графами гексагональных систем*. Вершинам шестиугольников соответствуют вершины графа, а сторонам шестиугольников — ребра графа. Для различения классов графов гексагональных систем удобно использовать понятие *характеристического графа*. Центру каждой грани графа гексагональной системы ставится в соответствие вершина характеристического графа, и две вершины соединяются ребром, если соответствующие грани являются смежными (рис. 4).

Обозначим через \mathcal{C}_h класс графов *гексагональных цепей* с h гранями, характеристические графы которых изоморфны простой цепи (граф H_1 на рис. 4). Более широкий класс \mathcal{X}_h образует множество графов гексагональных систем, содержащих h граней, характеристические графы которых изоморфны деревьям (граф H_2 на рис. 4), $\mathcal{C}_h \subset \mathcal{X}_h$. Множество всех графов с h гранями, в характеристических графах которых имеется хотя бы по одному циклу, обозначим через \mathcal{P}_h (граф H_3 на рис. 4). Введенные множества включают в себя семейства молекулярных графов ароматических углеводородов (класс \mathcal{X}_h содержит ката-конденсированные, а класс \mathcal{P}_h — пери-конденсированные структуры) [5, 41].

Множество всех графов гексагональных систем обозначим через $\mathcal{H}_h = \mathcal{X}_h \cup \mathcal{P}_h$. Вершина графа называется *внутренней*, если она принадлежит трем его граням. Если $H \in \mathcal{H}_h$, то граф имеет $p(H) = 4h + 2 - n_i$

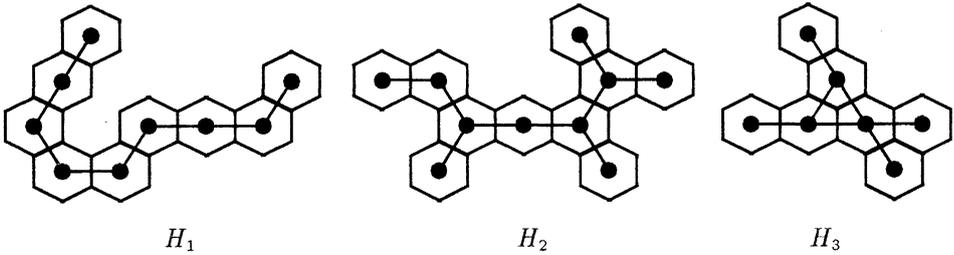


Рис. 4. Графы гексагональных систем из классов \mathcal{C}_9 , \mathcal{H}_{10} и \mathcal{P}_7

вершин и $q(H) = 5h + 1 - n_i$ ребер, где n_i — число внутренних вершин в H .

Как и в случае деревьев, рассматриваемые далее формулы для вычисления индекса Винера основаны на понятиях сегмента и ветвления в графах гексагональных систем.

Связный подграф S называется *сегментом* графа $H \in \mathcal{H}_h$, если S состоит из граней графа H , вершины характеристического графа S расположены на одной прямой и S не содержится ни в каком другом таком подграфе. Другими словами, каждая наибольшая по включению гексагональная цепь, не имеющая поворотов в H , является сегментом графа. Например, граф H_2 , изображенный на рис. 4, имеет 8 сегментов. Два сегмента могут иметь не более одной общей грани. Число граней в сегменте S называется его *длиной* и обозначается $l(S)$. Известно, что среди графов из \mathcal{C}_h наибольший индекс Винера имеет граф L_h , состоящий из единственного сегмента, и $W(L_h) = (16h^3 + 36h^2 + 26h + 3)/3$ [30, 53]. По построению любой сегмент в $H \in \mathcal{H}_h$ изоморфен графу L_k для некоторого k , $2 \leq k \leq h$.

Вначале рассмотрим класс гексагональных цепей \mathcal{C}_h . Любая цепь $H \in \mathcal{C}_h$ может быть представлена как последовательность сегментов S_1, S_2, \dots, S_n с длинами l_1, l_2, \dots, l_n , где $l_i = l(S_i)$ и $n \geq 1$. Так как соседние сегменты имеют единственную общую грань, то $h = l_1 + l_2 + \dots + l_n - n + 1$. Пусть через центры граней сегмента проведена прямая линия. Сегмент называется *разделяющим*, если его соседние сегменты лежат по разные стороны от этой прямой, и *неразделяющим* в противном случае. Концевые сегменты цепи будем считать разделяющими. Множество разделяющих и неразделяющих сегментов графа обозначим через Z и Ω соответственно. Для указания расположения сегментов используем двоичный набор (z_1, z_2, \dots, z_n) , где $z_i = 1$, если сегмент S_i является разделяющим, и $z_i = 0$ в противном случае, $1 \leq i \leq n$. Очевидно, что упорядоченные наборы (l_1, l_2, \dots, l_n) и (z_1, z_2, \dots, z_n) однозначно

определяют гексагональную цепь из n сегментов. Через эти параметры индекс Винера гексагональных цепей вычисляется следующим образом.

Утверждение 12 [20]. Пусть цепь $H \in \mathcal{C}_h$ состоит из сегментов с длинами l_1, l_2, \dots, l_n и параметрами их расположения z_1, z_2, \dots, z_n . Тогда

$$W(H) = \sum_{i=1}^n W(L_{l_i}) - 27(n-1) + 16 \sum_{i=1}^n \left((l_i - 1) \times \sum_{k=i+1}^n \left[(l_i + l_k + 1)(l_k - 1) + (2l_k - 3 + z_k) \sum_{j=k+1}^n (l_j - 1) \right] \right). \quad (14)$$

Набор (l_1, l_2, \dots, l_n) порождает множество цепей из n сегментов. Из полученной формулы следует, что при возрастании числа разделяющих сегментов в графах из \mathcal{C}_h значение индекса Винера увеличивается.

Известно, что для произвольных графов $H, H' \in \mathcal{X}_h$ справедливо соотношение $W(H) \equiv W(H') \pmod{8}$ [31]. Формула (14) была использована для установления новых условий сравнимости значений индекса Винера графов гексагональных цепей с одинаковым числом сегментов [21]. Сегмент четной длины называется *четным*, а в противном случае — *нечетным*. Обозначим через $n_e(H)$ и $n_o(H)$ число четных и нечетных сегментов в графе H соответственно.

Следствие 1 [21]. Если цепи $H, H' \in \mathcal{C}_h$ состоят из одинакового числа сегментов, то $W(H) \equiv W(H') \pmod{16}$ тогда и только тогда, когда $n_o(H) \equiv n_o(H') \pmod{4}$.

Четность сегментов в цепи легко проверить непосредственно по диаграмме графа. Из этого результата следует необходимое условие совпадения индексов Винера графов гексагональных цепей.

Следствие 2. Пусть цепи $H, H' \in \mathcal{C}_h$ таковы, что $W(H) = W(H')$. Тогда разность $n_o(H) - n_o(H')$ делится на 4.

Разделяющие и неразделяющие сегменты играют существенно разную роль при вычислении индекса Винера. Под удалением сегмента S из графа $H \in \mathcal{C}_h$ будем понимать удаление из H всех граней сегмента S . После такой операции две новые компоненты связности будут также графами гексагональных цепей. Число граней в этих цепях обозначим через $h_1 = h_1(S)$ и $h_2 = h_2(S)$. Тогда $h_1(S) + h_2(S) = h - l(S)$ для любого сегмента S .

Утверждение 13 [24]. Пусть цепь $H \in \mathcal{C}_h$ состоит из n сегментов с длинами l_1, l_2, \dots, l_n . Тогда

$$W(H) = W(L_h) - 16 \sum_{S \in \Omega} h_1 h_2 - 4 \left(h^2 + n - 1 - \sum_{i=1}^n l_i^2 \right).$$

Таким образом, если гексагональные цепи имеют только разделяющие сегменты, то для совпадения индексов Винера удается сформулировать необходимые и достаточные условия в терминах длин сегментов. Эти условия наиболее просты для цепей с одинаковым числом сегментов.

Следствие 3 [24]. *Если $H, H' \in \mathcal{C}_h$ состоят из одинакового числа сегментов и все сегменты принадлежат Z , то $W(H) = W(H')$ тогда и только тогда, когда*

$$\sum_{i=1}^n l_i^2 = \sum_{i=1}^n l'_i{}^2. \quad (15)$$

Используя это равенство, можно построить бесконечные семейства пар гексагональных цепей с произвольным числом граней и равными индексами Винера. Например, если числа a, b и c таковы, что $a^2 + b^2 = c^2$, то они определяют пары таких цепей с длинами сегментов $k - a, k - b, k + a, k + b$ и $k - c, k, k + c$, где $k \geq c + 2$. Более простой способ построения таких графов состоит в перестановке сегментов друг с другом. Цепи с длинами сегментов 2, 2, 3 и 2, 3, 2 являются, очевидно, наименьшими графами, удовлетворяющими равенству (15).

Для цепей с разным числом сегментов справедливо

Следствие 4 [24]. *Если цепи $H, H' \in \mathcal{C}_h$ состоят из n и n' сегментов соответственно и все сегменты принадлежат Z , то $W(H) = W(H')$ тогда и только тогда, когда*

$$\sum_{i=1}^n l_i^2 - \sum_{i=1}^{n'} l'_i{}^2 = n - n'.$$

Таким образом, при установлении совпадения значений индексов Винера для цепей с разделяющими сегментами сами значения можно не вычислять. Из приведенных выше критериев следует простой способ построения графов с одним и тем же значением W .

Следствие 5. *Пусть цепь H' получена из $H \in \mathcal{C}_h$ путем перестановки двух сегментов из Z , расположенных между двумя ближайшими сегментами из Ω . Тогда $W(H) = W(H')$.*

Это следствие позволяет строить экспоненциальное число гексагональных цепей с равными значениями индексов Винера. Пусть n разделяющих сегментов имеют попарно различные длины и расположены между ближайшими сегментами из множества Ω . Тогда всевозможные перестановки этих сегментов дадут $n!/2$ неизоморфных графов с одинаковым W .

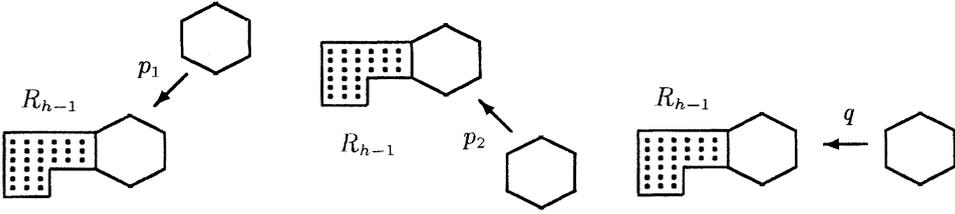


Рис. 5. Рост случайной гексагональной цепи R_h

В работе [47] рассматривался индекс Винера для случайных цепей. Случайная гексагональная цепь R_h , состоящая из $h \geq 3$ граней, получается последовательным присоединением новой грани к цепи R_{h-1} , построенной на предыдущем шаге. Новая грань присоединяется случайным образом к одному из трех ребер концевой грани в R_{h-1} . Пусть с вероятностями p_1 и p_2 такими являются ребра, ближайšie к вершинам степени 3, а с вероятностью $q = 1 - p_1 - p_2$ новая грань присоединяется к ребру, равноудаленному от вершин степени 3 (рис. 5). Величины p_1 и p_2 являются константами, не зависящими от предыдущих шагов. Такие случайные цепи используются для моделирования сопряженных полимеров (длинных ароматических углеводородов), для которых установлены хорошие корреляции между индексом Винера и физико-химическими свойствами [47].

Утверждение 14 [47]. Пусть W_h — математическое ожидание индекса Винера случайной цепи R_h . Тогда $W_1 = 27$, $W_2 = 109$, $W_3 = 271 + 8q$ и при $h \geq 4$

$$W_h = 4h^3 + 16h^2 + 6h + 1 + \frac{4}{3}q(h^3 - 3h^2 + 2h) - \frac{4}{3}(p_1 - p_2)^2 F(h, q),$$

где $F(h, q) = \sum_{k=1}^{h-3} k(k+1)(k+2)q^{h-3-k}$.

Функция $F(h, q)$ монотонно возрастает по q на интервале $(0, 1)$ и $F(h, 0) \leq F(h, q) \leq F(h, 1)$, где $F(h, 0) = (h-1)(h-2)(h-3)$ и $F(h, 1) = h(h-1)(h-2)(h-3)/4$. Если $h \rightarrow \infty$ и $q \neq 1$, то $\lim_{h \rightarrow \infty} F(h, q)/h^3 = 1/(1-q)$ и $W_h \sim [4 + 4q/3 - 4(p_1 - p_2)^2/3(1-q)]h^3$, т. е. W_h асимптотически ведет себя как полином третьей степени по h .

Перейдем теперь к более широкому классу графов гексагональных систем \mathcal{X}_h . Следующий результат о сравнимости значений индекса Винера показывает определяющую роль сегментов четной длины (следствие 1 эквивалентно формулируется в терминах четных сегментов).

Утверждение 15 [22]. Если $H, H' \in \mathcal{X}_h$, то $W(H) \equiv W(H') \pmod{16}$ тогда и только тогда, когда $n_e(H) \equiv n_e(H') \pmod{4}$.

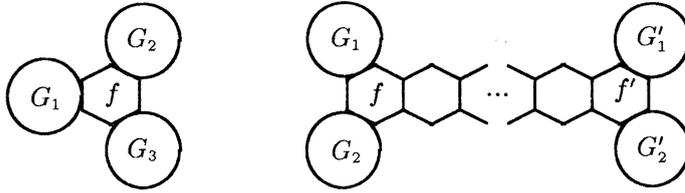


Рис. 6. Конфигурации ветвления в графах гексагональных систем

Этот результат был получен при изучении изменения значений W при преобразованиях, с помощью которых можно от произвольного графа из \mathcal{X}_h перейти к любому другому графу из этого класса. Из этого утверждения следует необходимое условие для совпадения индекса Винера.

Следствие 6. Пусть $H, H' \in \mathcal{X}_h$ таковы, что $W(H) = W(H')$. Тогда $n_e(H) - n_e(H')$ делится на 4.

При нахождении вычислительных формул для W наряду с сегментами используются ветвления в графах из класса \mathcal{X}_h . Если грань графа $H \in \mathcal{X}_h$ имеет не менее двух соседей и центры этих трех граней не лежат на одной прямой, то такая грань называется *гранью ветвления* в H . Пусть B есть множество всех граней ветвления в графе. Грань $f \in B$ порождает *конфигурацию ветвления* графа, состоящую в общем случае из трех присоединенных к f подграфов G_i (рис. 6) с числом граней h_i , $i = 1, 2, 3$ (один из подграфов G_i может быть пустым, $h_i = 0$). Другая конфигурация ветвления графа определяется парой соседних граней $f, f' \in B$ и включает подграфы G_i, G'_i с числом граней h_i и h'_i , $i = 1, 2$, соответственно. Один из подграфов пары (G_1, G_2) или пары (G'_1, G'_2) может быть пустым.

В следующей формуле вычисления индекса Винера используются только характеристики конфигураций ветвления графа.

Утверждение 16 [23]. Если $H \in \mathcal{X}_h$, то

$$W(H) = W(L_h) - 8 \left(5 \sum_{f \in B} h_1 h_2 h_3 - \sum_{f \in B} (h_1 - 1)(h_2 - 1)(h_3 - 1) + \sum (h_1 - h_2)(h'_1 - h'_2) + |B|(h - 2) \right), \quad (16)$$

где последнее суммирование ведется по всем конфигурациям, порождаемым парами соседних граней ветвления f и f' в H .

Вернемся к графу H_2 (см. рис. 4), имеющему 42 вершины ($h = 10$). По формуле (16) его индекс Винера может быть вычислен за несколько шагов: $W(H_2) = W(L_{10}) - 8[5(1 \cdot 2 \cdot 6 + 1 \cdot 3 \cdot 5 + 1 \cdot 1 \cdot 7) + (1 - 0)(1 - 6) + (2 - 1)$

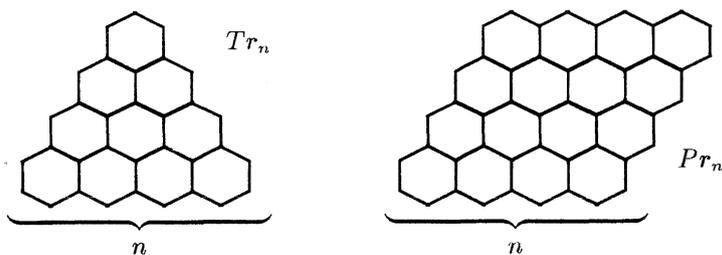


Рис. 7. Графы гексагональных систем из \mathcal{P}_h

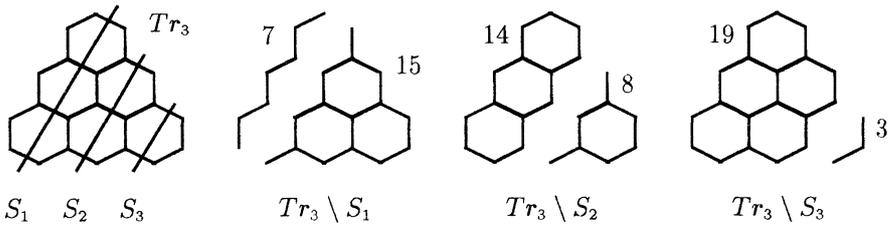
$(3 - 1) + 4 \cdot 8] = 6621 - 8(5 \cdot 34 + 29) = 5029$. Эту формулу можно использовать для нахождения графов с равными индексами Винера. Пусть граф $H \in \mathcal{X}_h$ имеет единственную грань ветвления с тремя непустыми ветвями, состоящими из h_1, h_2 и h_3 граней. Из (16) следует, что для проверки совпадения индексов Винера графов H_1 и H_2 достаточно убедиться в том, что $W(H_1) = W(H_2) = 4h_1h_2h_3 + h_1h_2 + h_1h_3 + h_2h_3$. Нетрудно установить, что при $h \leq 40$ существуют 12 пар графов с совпадающим W (в каждой паре графы имеют одинаковое число граней). Наименьшие графы принадлежат \mathcal{X}_{26} и имеют ветви из 1, 4, 20 и 2, 2, 21 граней. Другие применения формулы (16) обсуждаются в [23]. Так как значение $W(L_h)$ можно представить в виде $W(L_h) = \frac{1}{2} \binom{4h+4}{3} - 1 = \frac{1}{2} \binom{p+2}{3} - 1$, то отметим аналогию между (16) и формулой (10) для деревьев со степенями вершин, не превышающими 3 (степени вершин характеристического графа в $H \in \mathcal{X}_h$ также не превосходят 3).

Следствие 7. Если $H \in \mathcal{C}_h$, то

$$W(H) = W(L_h) - 8 \left(\sum_{f \in B} h_1 h_2 + \sum (h_1 - h_2)(h'_1 - h'_2) \right).$$

Пусть каждая цепь $H, H' \in \mathcal{C}_h$ состоит из двух сегментов. Так как $W(H) = W(L_h) - 8h_1h_2$, то $W(H) = W(H')$ тогда и только тогда, когда $h_1 h_2 = h'_1 h'_2$ (что эквивалентно (15)). Ясно, что равенство индексов Винера влечет изоморфизм графов H и H' .

До недавнего времени для графов гексагональных систем из класса \mathcal{P}_h не было известно способов вычисления индекса Винера, отличных от непосредственного нахождения расстояний между всеми парами вершин графа. Как и в случае деревьев, вначале аналитические выражения индекса Винера были получены для графов из \mathcal{P}_h , имеющих конкретную геометрическую форму — треугольную, трапециевидную, параллелограммную и др. (рис. 7) [85, 86]. Этот подход основан на «спрямлении» диаграммы графа, вложении его в прямоугольную координатную сетку и вычислении расстояния между соответствующими узлами сетки.

Рис. 8. Реберные разрезы графа Tr_3

Например, для графа правильной треугольной формы Tr_n со сторонами из $n \geq 1$ шестиугольных граней

$$W(Tr_n) = n(n+1)(4n^3 + 36n^2 + 79n + 16)/10,$$

а для графа Pr_n в виде равностороннего параллелограмма со стороной из $n \geq 1$ граней

$$W(Pr_n) = n(34n^4 + 170n^3 + 200n^2 + 10n - 9)/15.$$

Недостатками этого метода являются трудоемкие вычисления и практическая невозможность его применения к графам произвольной формы.

Более простой и эффективный метод расчета индекса Винера произвольных графов из \mathcal{H}_h предложен в [48] и далее развит в [37, 38, 42, 45, 54, 63, 65]. Он основан на удалении ребер из графа и называется методом элементарных реберных разрезов. Реберный разрез в графе определяет прямая линия, проходящая через центры противоположных ребер шестиугольной грани. При таком разрезе из графа удаляются все ребра, пересекаемые этой линией (при этом пересекаемые грани должны образовывать связный подграф). Например, в графе Tr_3 (рис. 8) можно сделать 9 реберных разрезов, три из которых отмечены линиями. Каждый реберный разрез S графа H приводит к появлению двух новых графов с $p_1(S)$ и $p_2(S)$ вершинами, где $p_1(S) + p_2(S) = p(H)$. На рис. 8 изображены пары таких графов после реберных разрезов S_1, S_2 и S_3 в Tr_3 (рядом с каждым графом указано число его вершин).

Утверждение 17 [48]. Если $H \in \mathcal{H}_h$, то

$$W(H) = \sum p_1(S) p_2(S), \quad (17)$$

где суммирование ведется по всем реберным разрезам S графа H .

Отметим совпадение (17) с формулой (7) вычисления индекса Винера деревьев. Применяя к графу Tr_3 формулу (17), находим $W(Tr_3) = 3(7 \cdot 15 + 8 \cdot 14 + 3 \cdot 19) = 822$.

В методе реберных разрезов существенно используется то, что графы из \mathcal{H}_h являются бинарными графами Хемминга, т. е. существует отображение $l : V(H) \rightarrow \{0, 1\}^k$ такое, что $\rho(l(u), l(v)) = d_H(u, v)$ для любых вершин $u, v \in V(H)$, где ρ — расстояние Хемминга. Пусть граф H имеет реберные разрезы S_1, S_2, \dots, S_k и граф $H \setminus S_i$ распадается на компоненты связности G_i^0 и G_i^1 , $i = 1, 2, \dots, k$. Тогда отображение l задается следующим образом: $l_i(v) = 0$, если $v \in V(G_i^0)$, и $l_i(v) = 1$, если $v \in V(G_i^1)$.

Отметим, что сегменты и реберные разрезы являются естественными характеристиками структуры рассматриваемых графов и активно используются в теории гексагональных систем. Так, например, в [4, 84] получены условия существования совершенных паросочетаний в терминах сегментов в графах из \mathcal{P}_h .

3. Обобщения индекса Винера

Некоторые из рассмотренных выше формул вычисления индекса Винера были обобщены или использованы без изменений для произвольных графов (см. обзор [79]). Кратко рассмотрим известные инварианты, для которых найдена их связь с индексом Винера деревьев и графов гексагональных систем.

Применение формулы (7) к произвольным графам привело к появлению *сегедского индекса* $Sz(G)$ графа G . Установлено, что $Sz(G) \geq W(G)$ для любого графа G и равенство выполняется тогда и только тогда, когда каждый блок графа G является полным подграфом. Как и для индекса Винера, для $Sz(G)$ справедливо соотношение $Sz(H) \equiv Sz(H') \pmod{8}$ для любых графов $H, H' \in \mathcal{X}_h$. Однако условия сравнимости значений по модулю 16, сформулированные в терминах длин сегментов, имеют другой вид. Обзор свойств и полная библиография по Sz приводятся в [43].

Сумма из правой части (6) рассмотрена в [27] в качестве нового инварианта и явилась главной частью *молекулярного топологического индекса* (или *индекса Шульца*) $MTI(G)$ графа G , задаваемого следующим образом: $MTI(G) = \sum_v \deg(v)d_G(v) + \sum_v \deg(v)^2$. Этот индекс имеет многочисленные химические приложения [79]. Показано, что $MTI(T) = 4W(T) - p(p-1) + \sum_v \deg(v)^2$ для любого p -вершинного дерева T [66]. Для любого графа H из класса \mathcal{X}_h справедливо равенство $MTI(H) = 5W(H) - (12h^2 - 14h + 5)$ [25].

Доказательства формул (7) и (8) основаны на удалении из дерева ребер или сегментов и подсчете вершин в компонентах связности. Если применить эту процедуру к любой цепи дерева (при этом удаляются

также все ветви, присоединенные к внутренним вершинам цепи), то в результате придем к понятию *гипер-индекса Винера* $WW(T)$ дерева T [50]. Для любого дерева T эти инварианты связаны соотношением $WW(T) = \left[2W(T) + \sum_{u,v} d_T(u,v)^2 \right] / 4$. Эта формула была взята за определение гипер-индекса Винера произвольного графа.

Сумма из (11), рассматриваемая для произвольных графов, называется *квази-индексом Винера*. Другой инвариант основан на представлении графа как электрической схемы с единичными сопротивлениями ребер [67]. В качестве расстояния берется электрическое сопротивление между узлами схемы (вершинами). Сумма расстояний между всеми вершинами графа (т. е. индекс Винера в новой метрике) называется *индексом Кирхгофа*. Оказалось, что значения квази-индекса Винера и индекса Кирхгофа произвольного графа совпадают [51].

Целесообразность построения разнообразных инвариантов молекулярных графов обсуждается в [6, 8, 83].

Заключение

Некоторые направления исследований индекса Винера остались за рамками настоящего обзора. Не рассмотрены методы построения эффективных компьютерных алгоритмов вычисления индекса Винера. Известно, что W вычисляется для деревьев и графов гексагональных систем с линейной трудоемкостью по числу вершин [17, 78]. Почти не затрагивался важный для приложений вопрос о дискриминирующей силе индекса Винера, т. е. о его способности различать неизоморфные графы с одинаковыми параметрами [2, 57, 60]. Изменение индекса Винера при преобразованиях графов гексагональных систем и построение графов с равными значениями W изучались в [1, 38, 81, 82].

ЛИТЕРАТУРА

1. Добрынин А. А. Дистанция графов ката-конденсированных гексагональных полициклических систем при их преобразованиях // Вопросы алгоритмического анализа структурной информации: Сб. науч. тр. Новосибирск: Ин-т математики СО АН СССР, 1988. С. 3–39. (Вычислительные системы; Вып. 127).
2. Добрынин А. А. Распределение значений дистанции графов неразветвленных гексагональных систем // Математические исследования в химической информатике: Сб. науч. тр. Новосибирск: Ин-т математики СО АН СССР, 1990. С. 61–140. (Вычислительные системы; Вып. 136).

3. **Добрынин А. А., Гутман И., Йовашевич В.** Бициклические графы и их реберные графы с совпадающим индексом Винера // Дискрет. анализ и исслед. операций. Сер. 2. 1997. Т. 4, № 2. С. 3–9.
4. **Косточка А. В.** Критерий существования совершенных паросочетаний в шестиугольных системах // Proc. 30. Intern. Wiss. Koll. TH Pfenau 1985. Ser. «Graphen und Netzwerke — Theorie und Anwendungen». 1985. P. 49–52.
5. **Мжельская Е. В., Скоробогатов В. А.** Применение теории графов в химии полициклических углеводородов. Новосибирск, 1989. (Препринт / АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т математики; № 35).
6. **Руврэ Д.** Следует ли заниматься разработкой топологических индексов? // Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С. 183–205.
7. **Станкевич И. В.** Графы в структурной химии // Применение теории графов в химии. Новосибирск: Наука, 1988. С. 7–69.
8. **Станкевич М. И., Станкевич И. В., Зефирюв Н. С.** Топологические индексы в органической химии // Успехи химии. 1988. Т. 57. С. 337–366.
9. **Balaban A. T., Motoc I., Bonchev D., Mekenyan O.** Topological indices for structure-activity correlations // Topics Curr. Chem. 1983. V. 114. P. 21–55.
10. **Bonchev D., Gutman I., Polansky O. E.** Parity of the distance and Wiener numbers of bipartite graphs // Commun. Math. Chem. 1987. V. 22. P. 209–214.
11. **Bonchev D., Trinajstić N.** Information theory, distance matrix and molecular branching // J. Chem. Phys. 1977. V. 67, N 10. P. 4517–4533.
12. **Buckley F.** Mean distance in line graphs // Congr. Numer. 1981. V. 32. P. 153–162.
13. **Buckley F., Harary F.** Distance in Graphs. Redwood City, CA: Addison-Wesley Publ. Corp., 1990.
14. **Canfield E. R., Robinson R. W., Rouvray D. H.** Determination of the Wiener molecular branching index for the general tree // J. Comput. Chem. 1985. V. 6, N 6. P. 598–609.
15. **Chan O., Gutman I., Lam T. K., Merris R.** Algebraic connections between topological indices // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1998. V. 38, N 1. P. 62–65.
16. **Chan O., Lam T. K., Merris R.** Wiener number as an immanant of the Laplacian of molecular graphs // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1997. V. 37, N 4. P. 762–765.
17. **Chepoi V., Klavžar S.** The Wiener index and the Szeged index of benzenoid systems in linear time // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1997. V. 37, N 4. P. 752–755.

18. **Chung F. R. K.** The average distance and the independence number // *J. Graph Theory*. 1988. V. 12, N 2. P. 229–235.
19. **Dankelmann P.** Average distance and domination number // *Discrete Appl. Math.* 1997. V. 80, N 1. P. 21–35.
20. **Dobrynin A. A.** A new formula for the calculation of the Wiener index of hexagonal chains // *Commun. Math. Chem.* 1997. V. 35. P. 75–90.
21. **Dobrynin A. A.** Congruence relations for the Wiener index of hexagonal chains // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1997. V. 37, N 6. P. 1109–1110.
22. **Dobrynin A. A.** New congruence relations for the Wiener index of catacondensed benzenoid graphs // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1998. V. 38, N 3. P. 405–409.
23. **Dobrynin A. A.** A formula for calculating the Wiener index of catacondensed benzenoid graphs // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1998. V. 38, N 5. P. 811–814.
24. **Dobrynin A. A.** A simple formula for the calculation of the Wiener index of hexagonal chains // *Comput. Chem.* 1998. V. 22 (in press).
25. **Dobrynin A. A.** Discriminating power of the Schultz index for catacondensed benzenoid graphs // *Commun. Math. Chem.* 1998. V. 38. P. 19–32.
26. **Dobrynin A. A., Gutman I.** On a graph invariant related to the sum of all distances in a graph // *Publ. Inst. Math. (Beograd)*. 1994. V. 56. P. 18–22.
27. **Dobrynin A. A., Kochetova A. A.** Degree distance of a graph: a degree analogue of the Wiener index // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1994. V. 34, N 5. P. 1082–1086.
28. **Doyle J. K., Graver J. E.** Mean distance in a graph // *Discrete Math.* 1977. V. 17, N 2. P. 147–154.
29. **Entringer R. C., Jackson D. E., Snyder D. A.** Distance in graphs // *Czechoslovak Math. J.* 1976. V. 26, N 2. P. 283–296.
30. **Gutman I.** Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons: two theorems // *Chem. Phys. Lett.* 1987. V. 136, N 2. P. 134–136.
31. **Gutman I.** On distances in some bipartite graphs // *Publ. Inst. Math. (Beograd)*. 1988. V. 43. P. 3–8.
32. **Gutman I.** A new method for the calculation of the Wiener number of acyclic molecules // *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*. 1993. V. 285. P. 137–142.
33. **Gutman I.** Calculating the Wiener number: the Doyle–Graver method // *J. Serb. Chem. Soc.* 1993. V. 58, N 10. P. 745–750.
34. **Gutman I.** Frequency of even and odd numbers in distance matrices of bipartite graphs // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1994. V. 34. P. 912–914.
35. **Gutman I.** Selected properties of the Schultz molecular topological index // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1994. V. 34. P. 1087–1089.

36. **Gutman I.** Distance of line graphs // *Graph Theory Notes New York*. 1996. V. 31. P. 49–52.
37. **Gutman I.** Wiener numbers of benzenoid isomers containing a linear polyacene fragment // *Indian J. Chem.* 1997. V. 36A. P. 644–648.
38. **Gutman I.** Comparing Wiener numbers of isomeric benzenoid hydrocarbons // *Acta Chim. Hung.* 1997. V. 134, N 4. P. 477–486.
39. **Gutman I.** Buckley-type relations for Wiener-type structure-descriptors // *J. Serb. Chem. Soc.* 1998. V. 63. P. 487–492.
40. **Gutman I.** Distance of thorny graphs // *Publ. Inst. Math. (Beograd)*. 1998. V. 63. P. 31–36.
41. **Gutman I., Cyvin S. J.** *Introduction to the Theory of Benzenoid Hydrocarbons*. Berlin: Springer-Verl., 1989.
42. **Gutman I., Cyvin S. J.** Elementary edge-cuts in the theory of benzenoid hydrocarbons // *Commun. Math. Chem.* 1997. V. 36. P. 177–184.
43. **Gutman I., Dobrynin A. A.** The Szeged index — a success story // *Graph Theory Notes New York*. 1998. V. 34. P. 37–44.
44. **Gutman I., Estrada E.** Topological indices based on the line graph of the molecular graph // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1996. V. 36, N 3. P. 541–543.
45. **Gutman I., Jovašević V.** Wiener indices of benzenoid hydrocarbons containing two linear polyacene fragments // *J. Serb. Chem. Soc.* 1998. V. 63, N 1. P. 31–40.
46. **Gutman I., Jovašević V., Dobrynin A. A.** Smallest graphs for which the distance of the graph is equal to the distance of its line graph // *Graph Theory Notes New York*. 1997. V. 33. P. 19.
47. **Gutman I., Kennedy J. W., Quintas L. V.** Wiener numbers of random benzenoid chains // *Chem. Phys. Lett.* 1990. V. 173, N 4. P. 403–408.
48. **Gutman I., Klavžar S.** A method for calculating Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons // *Acta Chim. Hung.* 1996. V. 133, N 4. P. 389–399.
49. **Gutman I., Lee S. L., Chu C. H., Luo Y. L.** Chemical applications of the Laplacian spectrum of molecular graphs: studies of the Wiener number // *Indian J. Chem.* 1994. V. 33A. P. 603–608.
50. **Gutman I., Linert W., Lukovits I., Dobrynin A. A.** Trees with extremal hyper-Wiener index: mathematical basis and chemical applications // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1997. V. 37, N 2. P. 349–354.
51. **Gutman I., Mohar B.** The quasi-Wiener and the Kirchhoff indices coincide // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1996. V. 36, N 5. P. 982–985.
52. **Gutman I., Polansky O. E.** *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*. Berlin: Springer-Verl., 1986.
53. **Gutman I., Polansky O. E.** Wiener numbers of polyacenes and related benzenoid molecules // *Commun. Math. Chem.* 1986. V. 20. P. 115–123.

54. **Gutman I., Popović L., Pavlović L.** Elementary edge-cuts in the theory of benzenoid hydrocarbons — an application // *Commun. Math. Chem.* 1997. V. 36. P. 217–229.
55. **Gutman I., Potgieter J. H.** Wiener index and intermolecular forces // *J. Serb. Chem. Soc.* 1997. V. 62, N 3. P. 185–192.
56. **Gutman I., Rouvray D. H.** A new theorem for the Wiener molecular branching index of trees with perfect matchings // *Comput. Chem.* 1990. V. 14, N 1. P. 29–32.
57. **Gutman I., Šoltés L.** The range of the Wiener index and mean isomer degeneracy // *Z. Naturforsch.* 1991. V. 46A. P. 865–868.
58. **Gutman I., Yeh Y. N.** The sum of all distances in bipartite graphs // *Math. Slovaca.* 1995. V. 45, N 4. P. 327–334.
59. **Gutman I., Yeh Y. N., Lee S. L., Chen J. C.** Wiener numbers of dendrimers // *Commun. Math. Chem.* 1994. V. 30. P. 103–115.
60. **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.
61. **Hosoya H.** Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons // *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1971. V. 4. P. 2332–2339.
62. **John P. E.** Die Berechnung des Wiener Index für einfache Polybäume // *Commun. Math. Chem.* 1994. V. 31. P. 123–132.
63. **Klavžar S., Gutman I.** Wiener numbers of vertex-weighted graphs and a chemical applications // *Discrete Appl. Math.* 1997. V. 80, N 1. P. 73–81.
64. **Klavžar S., Gutman I., Mohar B.** Labeling of benzenoid systems which reflects the vertex-distance relations // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1995. V. 35. P. 590–593.
65. **Klavžar S., Gutman I., Rajapakse A.** Wiener numbers of pericondensed benzenoid hydrocarbons // *Croat. Chem. Acta.* 1997. V. 70, N 4. P. 979–999.
66. **Klein D. J., Mihalić Z., Plavšić D., Trinajstić N.** Molecular topological index: a relation with the Wiener index // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1992. V. 32. P. 304–305.
67. **Klein D. J., Randić M.** Resistance distance // *J. Math. Chem.* 1993. V. 12, N 1–4. P. 81–95.
68. **Kouider M., Winkler P.** Mean distance and minimum degree // *J. Graph Theory.* 1997. V. 25, N 1. P. 95–99.
69. **Lepović M., Gutman I.** A collective property of trees and chemical trees // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1998. V. 38, N 5. P. 823–826.
70. **Lukovits I.** General formulas for the Wiener index // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1991. V. 31. P. 503–507.

71. **Lukovits I.** Frequency of even and odd numbers in distance matrices of trees // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1993. V. 33. P. 626–629.
72. **Merris R.** An edge version of the matrix-tree theorem and the Wiener index // *Linear and Multilinear Algebra.* 1989. V. 25, N 4. P. 291–296.
73. **Merris R.** The distance spectrum of a tree // *J. Graph Theory.* 1990. V. 14, N 3. P. 365–369.
74. **Merris R.** Laplacian matrices of graphs: a survey // *Linear Algebra Appl.* 1994. V. 197/198. P. 143–176.
75. **Mohar B.** Eigenvalues, diameter, and mean distance in graphs // *Graphs Combin.* 1991. V. 7, N 1. P. 53–64.
76. **Mohar B.** The Laplacian spectrum of graphs // *Graph Theory, Combinatorics, and Applications.* New York: John Wiley & Sons, Inc., 1991. P. 871–898.
77. **Mohar B., Babić D., Trinajstić N.** A novel definition of the Wiener index for trees // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1993. V. 33. P. 153–154.
78. **Mohar B., Pisanski T.** How to compute the Wiener index of a graph // *J. Math. Chem.* 1988. V. 2. P. 267–277.
79. **Nikolić S., Trinajstić N., Mihalić Z.** The Wiener index: developments and applications // *Croat. Chem. Acta.* 1995. V. 68, N 1. P. 105–129.
80. **Plesnik J.** On the sum of all distances in a graph or digraph // *J. Graph Theory.* 1984. V. 8, N 1. P. 1–21.
81. **Polansky O. E., Bonchev D.** The Wiener number of graphs. I. General theory and changes due to some graph operations // *Commun. Math. Chem.* 1986. V. 21. P. 133–186.
82. **Polansky O. E., Bonchev D.** Theory of the Wiener number of graphs. II. Transfer graphs and some of their metric properties // *Commun. Math. Chem.* 1990. V. 25. P. 3–39.
83. **Rouvray D. H.** The modelling of chemical phenomena using topological indices // *J. Comput. Chem.* 1987. V. 8, N 4. P. 470–480.
84. **Sachs H.** Perfect matchings in hexagonal systems // *Combinatorica.* 1984. V. 4, N 1. P. 89–99.
85. **Shiu W. C., Lam P. C. B., Gutman I.** Wiener number of hexagonal parallelograms // *Graph Theory Notes New York.* 1996. V. 30. P. 21–25.
86. **Shiu W. C., Tong C. S., Lam P. C. B.** Wiener number of some polycyclic graphs // *Graph Theory Notes New York.* 1997. V. 32. P. 10–15.
87. **Skorobogatov V. A., Dobrynin A. A.** Metric analysis of graphs // *Commun. Math. Chem.* 1988. V. 23. P. 105–151.
88. **Šoltés L.** Transmission in graphs: a bound and vertex removing // *Math. Slovaca.* 1991. V. 41, N 1. P. 11–16.
89. **Tomescu I.** On the sum of all distances in chromatic blocks // *J. Graph Theory.* 1994. V. 18, N 1. P. 83–102.

90. Tomescu I., Melter R. A. On distances in chromatic graphs // Quart. J. Math. Oxford (2). 1989. V. 40, N 160. P. 475–480.
91. Trinajstić N. Chemical Graph Theory. Boca Raton, FL: CRC Press, 1992.
92. Wiener H. Structural determination of paraffin boiling points // J. Amer. Chem. Soc. 1947. V. 69. P. 17–20.
93. Winkler P. Mean distance in a tree // Discrete Appl. Math. 1990. V. 27, N 1–2. P. 179–185.

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

Faculty of Science,
University of Kragujevac,
P. O. Box 60, YU-34000,
Kragujevac, Yugoslavia.

E-mail:

gutman@knez.uis.kg.ac.yu

Статья поступила

29 июля 1998 г.,

переработанный вариант —

27 октября 1998 г.