ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Июль—декабрь 2004. Серия 2. Том 11, № 2, 25–44

УДК 519.17

ИНДЕКС ВИНЕРА ДЛЯ ГРАФОВ И ИХ РЕБЕРНЫХ ГРАФОВ*)

А. А. Добрынин, Л. С. Мельников

Рассматривается индекс Винера — инвариант связного неориентированного графа, равный сумме расстояний между всеми парами его вершин. Показано, что разность индексов Винера графа и его реберного графа может принимать любое целое значение t. В частности, дан положительный ответ на открытый вопрос о существовании графов с произвольным цикломатическим числом $\lambda > 3$, для которых $t = 0$. Доказательство проводится построением соответствующих графов с дополнительными требованиями на двудольность и внешнепланарность.

Введение

Рассматриваются связные неориентированные графы $G(V, E)$ без петель и кратных ребер с множеством вершин V и множеством ребер E, где $|V| = n$ и $|E| = m$. *Цикломатическим числом* связного графа называется величина $\lambda = n - m + 1$. Под *расстоянием* $d(u, v)$ между вершинами u и v в графе G понимается длина кратчайшей по числу ребер цепи, соединяющей вершины u и v в G. Все не определяемые ниже термины можно найти в [3].

Индексом Винера $W(G)$ графа G называется инвариант, определяемый как сумма расстояний между всеми парами вершин графа G, т. е.

$$W(G) \;=\; \sum_{\{u,v\}\subseteq V} d(u,v) = \frac{1}{2}\sum_{v\in V} d(v),$$

где $d(v)$ есть сумма расстояний от вершины v до всех оставшихся вершин графа, т. е. $d(v) = \sum\limits_{u\in V} d(u,v)$.

По-видимому, впервые этот инвариант был введен в 1947 г. американским химиком Г. Винером в несколько ином (но эквивалентном) виде, для установления корреляционных зависимостей между значениями

*)Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 02–01–00039).

W и свойствами ациклических химических соединений, молекулярные графы которых являются деревьями [24]. Систематическое исследование математических свойств индекса Винера началось в 1976 г. с работы [12]. Библиография по индексу Винера, его обобщениям и применениям в химии насчитывает сотни наименований, основные можно найти в книгах [18, 22, 23] и обзорах [1, 4–6, 9, 10, 16, 20, 21].

В реберном графе $L(G)$ графа G множество вершин совпадает с множеством ребер графа G. Две различные вершины в $L(G)$ являются смежными тогда и только тогда, когда соответствующие им ребра инцидентны в G. Так как реберный граф отражает структуру исходного графа, то инварианты реберных графов используются в приложениях, в частности, для анализа структурной сложности молекулярных графов [7, 14, 19]. При исследовании индекса Винера реберных графов особый интерес представляет нахождение графов с заданными свойствами, для которых выполняется равенство

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

Нас интересует выполнение равенства (1) для графов с заданным цикломатическим числом. В [8] показано, что графы с цикломатическим числом $\lambda = 0$ не могут удовлетворять свойству (1), так как для n-вершинного дерева справедлива формула Бакли:

$$W(L(G)) = W(G) - \binom{n}{2}.$$

Известно, что среди связных n-вершинных графов только простой цикл C_n изоморфен своему реберному графу $L(C_n)$, что влечет тривиальное выполнение свойства (1). За исключением этого примера, для любого моноциклического графа G ($\lambda = 1$) всегда выполняется неравенство $W(L(G)) < W(G)$. В [2] установлено, что существует в точности 26, 166, 503 и 1082 бициклических графов ($\lambda = 2$) с числом вершин 9, 10, 11 и 12 соответственно, удовлетворяющих свойству (1). Бесконечные семейства таких бициклических графов построены в [15]. Наименьшие по числу вершин трициклические графы ($\lambda = 3$), для которых верно (1), имеют 12 вершин (71 граф) [2]. Некоторые оценки индекса Винера реберного графа в терминах числа вершин и числа ребер исходного графа приводятся в [13].

В [2] поставлен следующий вопрос: для каждого ли значения $\lambda \geqslant 4$ существуют графы G с цикломатическим числом λ, для которых выполняется (1)? Частичный ответ на этот вопрос дан в работе [11], в которой построены два бесконечных семейства недвудольных графов с возрастающим цикломатическим числом, удовлетворяющих свойству (1). При этом разница между соседними значениями λ растет очень быстро и для многих λ вопрос остается открытым. Отметим, что доказательство бесконечности этих семейств основано на свойствах решений уравнения Пелля $x^2 - 5y^2 = \pm 4$, хорошо известного в теории чисел. При этом предел отношения числа вершин графа к его цикломатическому числу равен $2 + \sqrt{5} \approx 4,236$.

Целью настоящей статьи является выяснение того, какие значения может принимать разность индексов Винера графа и его реберного графа. В частности, дается положительный ответ на сформулированный выше вопрос о равенстве значений индекса. Для построенных графов наименьшее отношение числа вершин к их цикломатическому числу равно 5.

1. Основные результаты

Пусть $L(G)$ есть реберный граф для графа G. Оказывается, что разность $W(L(G)) - W(G)$ их индексов Винера может принимать любые заданные значения.

Теорема 1. *Для произвольного целого числа $t \geqslant 0$ существуют такие графы G и H, что выполняются равенства*: $W(L(G)) - W(G) = t$ *и* $W(L(H)) - W(H) = -t$.

Для большинства графов, построенных при доказательстве теоремы 1, разность индексов t равна λ, где $\lambda \geqslant 2$ — цикломатическое число графа. Поэтому эту теорему можно переформулировать в следующем виде.

Следствие 1. *Для произвольного натурального числа $\lambda \geqslant 2$ существуют такие графы G и H с цикломатическим числом λ, что выполняются равенства*: $W(L(G)) - W(G) = \lambda$ *и* $W(L(H)) - W(H) = -\lambda$.

Совпадение индексов Винера графа и его реберного графа невозможно для графов с цикломатическим числом, меньшим 2 (за исключением простых циклов). Следующий результат дает положительный ответ на сформулированный выше вопрос из [2] (для полноты включены известные ранее случаи $\lambda = 2, 3$).

Теорема 2. *Для произвольного целого числа $\lambda \geqslant 2$ существуют такие графы G с цикломатическим числом λ, что выполняется равенство* (1). *Эти графы принадлежат следующим классам графов*: *двудольным внешнепланарным, недвудольным внешнепланарным, двудольным невнешнепланарным, недвудольным невнешнепланарным.*

Доказательства теорем 1 и 2 проводятся конструктивно. Все найденные графы с цикломатическим числом $\lambda = 2$ входят в семейства из [2], а графы с $\lambda = 3$ являются новыми.

2. Структура графов

Графы из всех построенных семейств являются плоскими и состоят из двух частей. Одна часть, называемая *циклической*, содержит λ граней (циклов), другая — *древесная* часть — является деревом. Структура циклических частей приводится на рис. 1. Буквами B и O в названии части указывается ее двудольность (bipartite) и внешнепланарность (outerplanar), черта над буквой используется для отрицания соответствующего свойства. Рядом с каждым графом приводятся его характеристики, используемые далее.

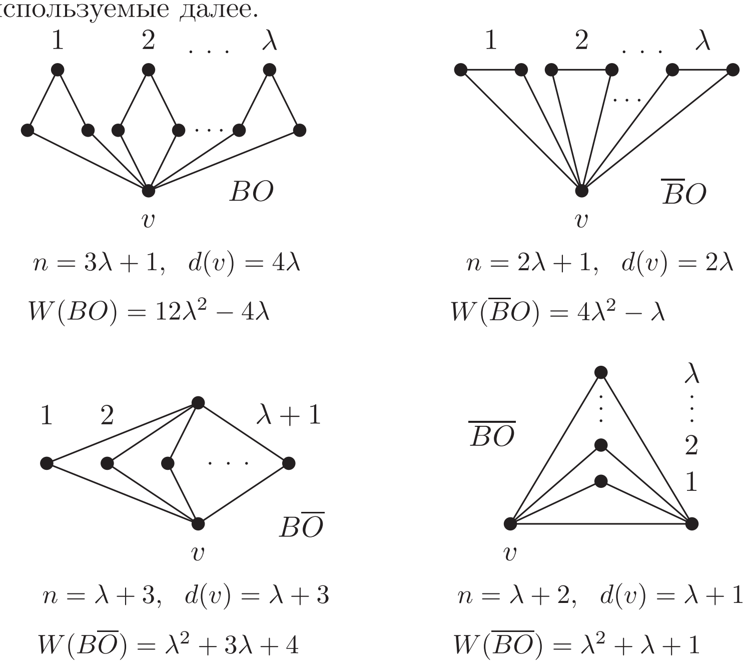
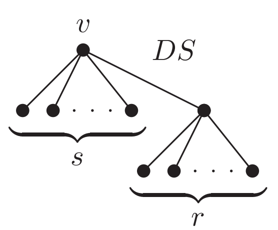


Рис. 1. Циклические части графов

Так как при построении реберных графов циклы исходного графа переходят в циклы той же длины, то в общем случае реберный граф циклической части будет иметь больший индекс Винера, чем исходная циклическая часть. Компенсировать такое увеличение индекса можно добавлением к циклической части висячих простых цепей, которые в реберном графе перейдут в цепи меньшей длины. В качестве древесной части подходящими деревьями, позволяющими строить экономные конструкции, оказались двойные и обобщенные уравновешенные звезды.

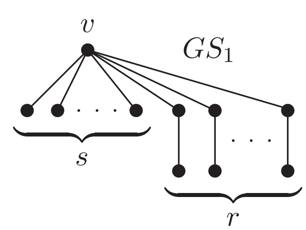
Звездой называется дерево, все ребра которого инцидентны единственной центральной вершине. Если центральные вершины двух звезд соединить ребром, то полученный граф DS называется *двойной звездой*.

Обобщенная уравновешенная звезда является деревом и состоит из центральной вершины, к которой присоединены простые цепи с длинами, различающимися не более чем на 1. Другими словами, обобщенная уравновешенная звезда является гомеоморфом звезды с указанным ограничением на длину цепей. Для наших целей будет достаточно рассмотреть обобщенные уравновешенные звезды с наиболее короткими цепями. Структура указанных звезд показана на рис. 2 (DS — двойная звезда, GS_1 и GS_2 — обобщенные уравновешенные звезды).



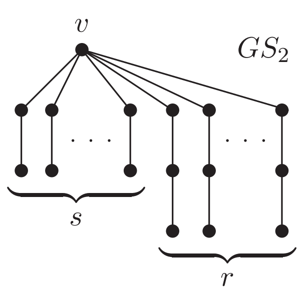
$n = s + r + 2, \quad d(v) = s + 2r + 1$

$W(DS) = s^2 + r^2 + 3sr + 2s + 2r + 1$



$n = s + 2r + 1, \; d(v) = s + 2r$

$W(GS_1) = s^2 + 6r^2 + 3sr - 2$



$n = 2s + 3r + 1, \; d(v) = 3s + 6r$

$W(GS_2) = 6s^2 + 18r^2 + 21sr - 2s - 8r$

Рис. 2. Древесные части графов

Интересующие нас графы будут строится, как правило, отождествлением вершин v из циклической и древесной частей (см. рис. $1, 2$). Структура соответствующих реберных графов изображена на рис. 3. Диаграммы полных подграфов даны схематично без изображения их ребер.

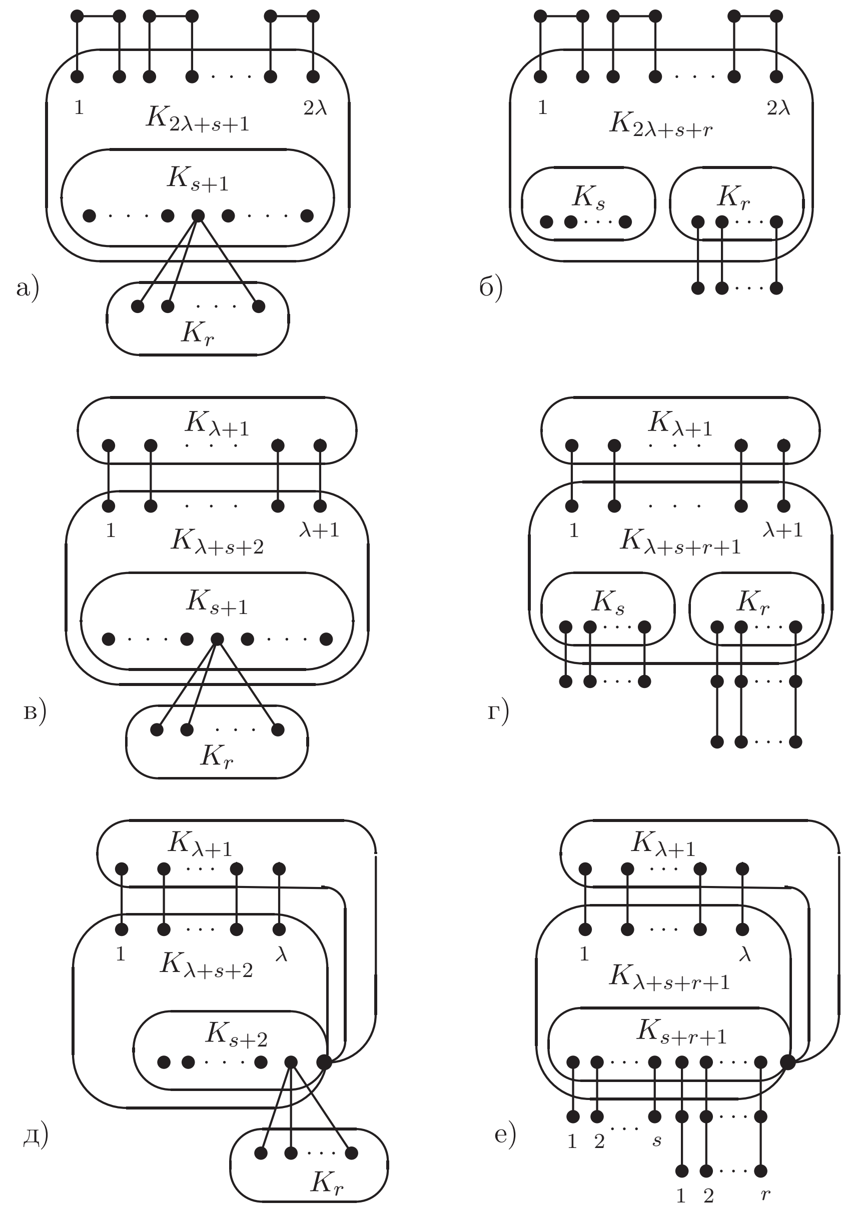


Рис. 3. Реберные графы

3. Двудольные внешнепланарные графы

Для вычисления индекса Винера графа G, полученного из графов H и F отождествлением вершин u из H и v из F, удобно использовать равенство

$$W(G) = W(H) + W(F) + (n_F - 1)d_H(u) + (n_H - 1)d_F(v), \qquad (2)$$

где индекс указывает, в каком графе берутся необходимые величины. Сводку разнообразных формул для вычисления индекса Винера можно найти в обзоре [9].

Двудольные внешнепланарные графы получаются в результате присоединения циклической части BO к древесным частям DS или GS_1.

3.1. Присоединение двойной звезды $\boldsymbol{DS}$. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части BO и двойной звезды DS отождествлением их вершин v (см. рис. 1, 2).

При задании значений параметрам λ, s и r граф $G_{\lambda,s,r}$ порождает семейство графов сходной структуры. Для поиска графов со свойством (1) естественно предполагать, что значения параметров s и r должны быть функциями от λ.

Число вершин построенного графа $G_{\lambda,s,r}$ равно $3\lambda + s + r + 2$. Применяя формулу (2), получим выражение для индекса Винера в терминах параметров циклической и древесной частей:

$$W(G_{\lambda,s,r}) = 12\lambda^2 + 3\lambda + 7\lambda s + 10\lambda r + s^2 + r^2 + 3sr + 2s + 2r + 1.$$

Структура реберного графа $L(G_{\lambda,s,r})$ показана на рис. 3 а. Так как он состоит, в основном, из полных подграфов и имеет диаметр, равный 3, индекс Винера нетрудно вычислить непосредственно:

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (32\lambda^2 - 4\lambda + 12\lambda s + 20\lambda r + s^2 + r^2 + 4sr + s + r)/2.$$

Тогда для разности индексов Винера графа $G_{\lambda,s,r}$ и его реберного графа имеем

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r}) \\ = (8\lambda^2 - 10\lambda - 2\lambda s - s^2 - r^2 - 2sr - 3s - 3r - 2)/2. \qquad (3)$$

Утверждение 1. *Для индекса Винера двудольных внешнепланарных графов $G_{\lambda,2\lambda-4,2}$ и $G_{\lambda,2\lambda-6,5}$ с цикломатическим числом λ и их реберных графов выполняются равенства*: $W(G_{\lambda,2\lambda-4,2}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2}))$ *при* $\lambda \geqslant 2$ *и* $W(G_{\lambda,2\lambda-6,5}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,5}))$ *при* $\lambda \geqslant 3$.

Справедливость утверждения 1 проверяется подстановкой соответствующих значений параметров r и s в выражение для разности индексов Винера (3). Графы $G_{\lambda,2\lambda-4,2}$ и $G_{\lambda,2\lambda-6,5}$ имеют 5λ и $5\lambda + 1$ вершин соответственно, а их индексы Винера являются квадратичными функциями от λ: $W(G_{\lambda,2\lambda-4,2}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2})) = 30\lambda^2 - 5\lambda - 7$ при $\lambda \geqslant 2$ и $W(G_{\lambda,2\lambda-6,5}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,5})) = 30\lambda^2 + 21\lambda - 30$ при $\lambda \geqslant 3$.

В таблице 1 приводятся характеристики начальных графов из этих бесконечных семейств. Здесь и далее число вершин графов в таблицах обозначается через n.

Т а б л и ц а 1

Графы $G_{\lambda,2\lambda-4,2}$ (верхний) и $G_{\lambda,2\lambda-6,5}$ для $\lambda \leqslant 11$

λ	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
n	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55
(s,r)	(0,2)	(2,2)	(4,2)	(6,2)	(8,2)	(10,2)	(12,2)	(14,2)	(16,2)	(18,2)
W	103	248	453	718	1043	1428	1873	2378	2943	3568
n	–	16	21	26	31	36	41	46	51	56
(s,r)	–	(0,5)	(2,5)	(4,5)	(6,5)	(8,5)	(10,5)	(12,5)	(14,5)	(16,5)
W	–	132	303	534	825	1176	1587	2058	3180	3831

Компьютерные вычисления показали, что других бесконечных семейств графов такой структуры с совпадающими значениями индекса для цикломатического числа $\lambda < 100$ не существует (встречаются только отдельные примеры).

В общем случае разность между индексами Винера графов, образованных из частей BO и DS, и их реберных графов может быть любым числом.

Утверждение 2. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 3$ существуют такие двудольные внешнепланарные графы G и H, что*

$$W(L(G)) - W(G) = t \text{ и } W(L(H)) - W(H) = -t.$$

Справедливость этого утверждения следует из выполнения следующих равенств:

$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,3})) - W(G_{\lambda,2\lambda-5,3}) = \lambda \text{ при } \lambda \geqslant 3 \text{ и}$$
$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-3,1})) - W(G_{\lambda,2\lambda-3,1}) = -\lambda \text{ при } \lambda \geqslant 2.$$

3.2. Присоединение обобщенной уравновешенной звезды GS_1. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части BO и обобщенной уравновешенной звезды GS_1 отождествлением вершин v (см. рис. 1, 2). Граф $G_{\lambda,s,r}$ имеет $3\lambda + s + 2r + 1$ вершин. Используя формулу (2), получаем

$$W(G_{\lambda,s,r}) = 12\lambda^2 - 4\lambda + 7\lambda s + 17\lambda r + s^2 + 6r^2 + 5sr - 2r.$$

Структура реберного графа для $G_{\lambda,s,r}$ изображена на рис. 3 б. Индекс Винера для графа $L(G_{\lambda,s,r})$ равен

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (32\lambda^2 - 16\lambda + 12\lambda s + 32\lambda r + s^2 + 8r^2 + 6sr - s - 6r)/2.$$

Тогда для разности индексов Винера имеем

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r}) \\ = (8\lambda^2 - 8\lambda - 2\lambda s - 2\lambda r - s^2 - 4r^2 - 4sr - s - 2r)/2. \quad (4)$$

Утверждение 3. *Для двудольных внешнепланарных графов $G_{\lambda,2\lambda-5,2}$ и $G_{\lambda,2\lambda-10,5}$ с цикломатическим числом λ выполняются равенства:*

$$W(G_{\lambda,2\lambda-5,2}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,2})) \text{ при } \lambda \geqslant 3 \text{ и}$$
$$W(G_{\lambda,2\lambda-10,5}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-10,5})) \text{ при } \lambda \geqslant 5.$$

Для доказательства достаточно подставить соответствующие значения параметров r и s в выражение для разности индекса Винера (4). В графах $G_{\lambda,2\lambda-5,2}$ и $G_{\lambda,2\lambda-10,5}$ имеется 5λ и $5\lambda+1$ вершин соответственно, а для их индексов Винера справедливы равенства:

$$W(G_{\lambda,2\lambda-5,2}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,2})) = 30\lambda^2 - 5\lambda - 5 \text{ при } \lambda \geqslant 3 \text{ и}$$
$$W(G_{\lambda,2\lambda-10,5}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-10,5})) = 30\lambda^2 + 21\lambda - 10 \text{ при } \lambda \geqslant 5.$$

В таблице 2 приводятся характеристики графов этих семейств для начальных значений λ. Отметим, что индексы Винера графов, построенных присоединением к циклической части OB указанных двойных и обобщенных уравновешенных звезд, отличаются на константу.

Т а б л и ц а 2

Графы $G_{\lambda,2\lambda-5,2}$ (верхний) и $G_{\lambda,2\lambda-10,5}$ для $\lambda \leqslant 12$

λ	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
n	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60
(s,r)	(1,2)	(3,2)	(5,2)	(7,2)	(9,2)	(11,2)	(13,2)	(15,2)	(17,2)	(19,2)
W	250	455	720	1045	1430	1875	2380	2945	3570	4255
n	–	–	26	31	36	41	46	51	56	61
(s,r)	–	–	(0,5)	(2,5)	(4,5)	(6,5)	(8,5)	(10,5)	(12,5)	(14,5)
W	–	–	845	1196	1607	2078	2609	3200	3851	4562

Для общего случая различия индексов получен следующий результат.

Утверждение 4. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 4$ существуют такие двудольные внешнепланарные графы G и H, что $W(L(G))-$*

$W(G) = t$ и $W(L(H)) - W(H) = -t$.

Справедливость утверждения 4 следует из равенств

$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-7,3})) - W(G_{\lambda,2\lambda-7,3}) = \lambda \text{ при } \lambda \geqslant 4 \text{ и}$$
$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-3,1})) - W(G_{\lambda,2\lambda-3,1}) = -\lambda \text{ при } \lambda \geqslant 2.$$

4. Недвудольные внешнепланарные графы

Внешнепланарные недвудольные графы образуются в результате присоединения циклической части $\overline{B}O$ к древесным частям DS или GS_1, изображенным на рис. 1, 2.

4.1. Присоединение двойной звезды DS. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части $\overline{B}O$ и двойной звезды DS отождествлением их вершин v. Число вершин в таком графе равно $2\lambda+s+r+2$. Применив формулу (2), имеем

$$W(G_{\lambda,s,r}) = 4\lambda^2 + 3\lambda + 4\lambda s + 6\lambda r + s^2 + r^2 + 3sr + 2s + 2r + 1.$$

Структура реберного графа $L(G_{\lambda,s,r})$ соответствует графу на рис. 3 а, за исключением того, что каждое верхнее горизонтальное ребро необходимо стянуть. Диаметр графа равен 3, а индекс Винера вычисляется по формуле

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (15\lambda^2 - \lambda + 8\lambda s + 14\lambda r + s^2 + r^2 + 4sr + s + r)/2.$$

Для разности индексов Винера получаем

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r}) = (7\lambda^2 - 7\lambda + 2\lambda r - s^2 - r^2 - 2sr - 3s - 3r - 2)/2. \quad (5)$$

Таблица 3

Графы $G_{\lambda,2\lambda-4,\lambda+2}$ (верхний) и $G_{\lambda,2\lambda-6,\lambda+5}$ для $\lambda \leqslant 10$

λ	2	3	4	5	6	7	8	9	10
n	10	15	20	25	30	35	40	45	50
(s,r)	(0,4)	(2,5)	(4,6)	(6,7)	(8,8)	(10,9)	(12,10)	(14,11)	(16,12)
W	95	233	429	683	995	1365	1793	2279	2823
n	–	16	21	26	31	36	41	46	51
(s,r)	–	(0,8)	(2,9)	(4,10)	(6,11)	(8,12)	(10,13)	(12,14)	(14,15)
W	–	270	486	760	1092	1482	1930	2436	3000

Утверждение 5. *Для недвудольных внешнепланарных графов $G_{\lambda,2\lambda-4,\lambda+2}$ и $G_{\lambda,2\lambda-6,\lambda+5}$ с цикломатическим числом λ справедливы равенства:*

$$W(G_{\lambda,2\lambda-4,\lambda+2}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,\lambda+2})) \text{ при } \lambda \geqslant 2 \text{ и}$$
$$W(G_{\lambda,2\lambda-6,\lambda+5}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,\lambda+5})) \text{ при } \lambda \geqslant 3.$$

Для доказательства достаточно подставить соответствующие значения параметров r и s в выражение для разности индексов Винера (5). Число вершин в графах $G_{\lambda,2\lambda-4,\lambda+2}$ и $G_{\lambda,2\lambda-6,\lambda+5}$ равно 5λ и $5\lambda+1$ соответственно, а индексы Винера этих графов равны:

$$W(G_{\lambda,2\lambda-4,\lambda+2}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,\lambda+2})) = 29\lambda^2 - 7\lambda - 7 \text{ при } \lambda \geqslant 2 \text{ и}$$
$$W(G_{\lambda,2\lambda-6,\lambda+5}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,\lambda+5})) = 29\lambda^2 + 13\lambda - 30 \text{ при } \lambda \geqslant 3.$$

В таблице 3 содержаться характеристики графов этих семейств для начальных значений цикломатического числа.

Утверждение 6. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 3$ существуют такие недвудольные внешнепланарные графы G и H, что*

$$W(L(G)) - W(G) = t \textit{ и } W(L(H)) - W(H) = -t.$$

Справедливость утверждения 6 вытекает из следующих равенств:

$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,\lambda+3})) - W(G_{\lambda,2\lambda-5,\lambda+3}) = \lambda \text{ и}$$
$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,\lambda+4})) - W(G_{\lambda,2\lambda-5,\lambda+4}) = -\lambda \text{ для } \lambda \geqslant 3.$$

4.2. Присоединение обобщенной уравновешенной звезды GS_1. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части $\overline{B}O$ и обобщенной уравновешенной звезды GS_1 отождествлением их вершин v. Число вершин этого графа равно $2\lambda + s + 2r + 1$. По формуле (2) получаем

$$W(G_{\lambda,s,r}) = 4\lambda^2 - \lambda + 4\lambda s + 10\lambda r + s^2 + 6r^2 + 5sr - 2r.$$

Реберный граф $L(G_{\lambda,s,r})$ получается из графа на рис. 3б стягиванием верхних горизонтальных ребер. Для его индекса Винера получим следующее выражение

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (15\lambda^2 - 9\lambda + 8\lambda s + 22\lambda r + s^2 + 8r^2 + 6sr - s - 6r)/2.$$

Тогда разность индексов Винера равна

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r}) = (7\lambda^2 - 7\lambda + 2\lambda r - s^2 - 4r^2 - 4sr - s - 2r)/2. \quad (6)$$

Утверждение 7. *Для индекса Винера недвудольных внешнепланарных графов $G_{\lambda,\lambda-5,\lambda+2}$ и $G_{\lambda,\lambda-10,\lambda+5}$ с цикломатическим числом λ справедливы следующие равенства*: $W(G_{\lambda,\lambda-5,\lambda+2}) = W(L(G_{\lambda,\lambda-5,\lambda+2}))$ *при* $\lambda \geqslant 5$ *и* $W(G_{\lambda,\lambda-10,\lambda+5}) = W(L(G_{\lambda,\lambda-10,\lambda+5}))$ *при* $\lambda \geqslant 10$.

Справедливость утверждения проверяется подстановкой соответствующих значений параметров r и s в выражение для разности индексов (6). Число вершин в графах $G_{\lambda,\lambda-5,\lambda+2}$ и $G_{\lambda,\lambda-10,\lambda+5}$ равно 5λ и

$5\lambda+1$ соответственно. При этом для их индексов справедливы равенства: $W(G_{\lambda,\lambda-5,\lambda+2}) = W(L(G_{\lambda,\lambda-5,\lambda+2})) = 30\lambda^2-4\lambda-5$ при $\lambda \geqslant 5$ и $W(G_{\lambda,\lambda-10,\lambda+5}) = W(L(G_{\lambda,\lambda-10,\lambda+5})) = 30\lambda^2+22\lambda-10$ при $\lambda \geqslant 10$.

Начальные графы этих семейств имеют достаточно большое цикломатическое число, что видно из таблицы 4.

Таблица 4

Графы $G_{\lambda,\lambda-5,\lambda+2}$ (верхний) и $G_{\lambda,\lambda-10,\lambda+5}$ для $\lambda \leqslant 13$

λ	5	6	7	8	9	10	11	12	13
n	25	30	35	40	45	50	55	60	65
(s,r)	(0,7)	(1,8)	(2,9)	(3,10)	(4,11)	(5,12)	(6,13)	(7,14)	(8,15)
W	725	1051	1437	1883	2389	2955	3581	4267	5013
n	–	–	–	–	–	51	56	61	66
(s,r)	–	–	–	–	–	(0,15)	(1,16)	(2,17)	(3,18)
W	–	–	–	–	–	3210	3862	4574	5346

Для разности индексов Винера графов рассматриваемой структуры справедлив следующий результат.

Утверждение 8. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 8$ существуют такие недвудольные внешнепланарные графы G и H, что $W(L(G)) - W(G) = t$ и $W(L(H)) - W(H) = -t$.*

Для доказательства достаточно рассмотреть графы $G_{\lambda,\lambda-7,\lambda+3}$ и $G_{\lambda,\lambda-8,\lambda+4}$, для которых выполняются равенства:

$$W(L(G_{\lambda,\lambda-7,\lambda+3})) - W(G_{\lambda,\lambda-7,\lambda+3}) = \lambda \text{ при } \lambda \geqslant 7 \text{ и}$$
$$W(L(G_{\lambda,\lambda-8,\lambda+4})) - W(G_{\lambda,\lambda-8,\lambda+4}) = -\lambda \text{ при } \lambda \geqslant 8.$$

5. Двудольные невнешнепланарные графы

Двудольные невнешнепланарные графы получаются в результате присоединения циклической части $B\overline{O}$ к древесным частям DS или GS_2.

5.1. Присоединение двойной звезды DS. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части $B\overline{O}$ и двойной звезды DS отождествлением вершин v. Этот граф имеет $\lambda+s+r+5$ вершин, а его индекс Винера равен

$$W(G_{\lambda,s,r}) = \lambda^2+5\lambda+2\lambda s+3\lambda r+s^2+r^2+3sr+7s+9r+10.$$

Для индекса Винера реберного графа $L(G_{\lambda,s,r})$, изображенного на рис. 3 в, нетрудно получить выражение

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (6\lambda^2+14\lambda+6\lambda s+10\lambda r+s^2+r^2+4sr+7s+11r+8)/2.$$

Тогда для разности индексов Винера графа $G_{\lambda,s,r}$ и его реберного графа имеем

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r}) \\ = (4\lambda^2 + 4\lambda + 2\lambda s + 4\lambda r - s^2 - r^2 - 2sr - 7s - 7r - 12)/2. \quad (7)$$

Утверждение 9. *Для двудольных невнешнепланарных графов $G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}$ и $G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda}$ с цикломатическим числом λ справедливы равенства: $W(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}))$ при $\lambda \geqslant 3$ и $W(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda}))$ при $\lambda \geqslant 2$.*

Справедливость утверждения проверяется подстановкой соответствующих значений параметров r и s в выражение для разности индексов Винера графов (7). Графы $G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}$ и $G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda}$ имеют $5\lambda+1$ и 5λ вершин соответственно, а для их индексов Винера выполняются равенства: $W(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3})) = 31\lambda^2+4\lambda-14$ при $\lambda \geqslant 3$ и $W(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda})) = 31\lambda^2 - 11\lambda - 2$ при $\lambda \geqslant 2$.

Небольшим изменением структуры графов $G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}$ можно построить новое семейство с совпадающими значениями индекса Винера. Пусть граф $H_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}$ построен присоединением той же древесной части к вершине 1 циклической части $B\overline{O}$ (см. рис. 1). Тогда нетрудно проверить, что выполняется равенство

$$W(H_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}) = W(L(H_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3})) = 35\lambda^2 - 2\lambda - 12.$$

Таким образом, циклическая часть $B\overline{O}$ является примером графа, к любой вершине которого можно присоединить одну и ту же древесную часть той же вершиной с выполнением свойства (1).

Таблица 5 содержит данные о начальных графах этих семейств.

Таблица 5

Графы $G(H)_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+3}$ (сверху) и $G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda}$ для $\lambda \leqslant 10$

λ	2	3	4	5	6	7	8	9	10
n	–	16	21	26	31	36	41	46	51
(s,r)	–	(0,9)	(2,11)	(4,13)	(6,15)	(8,17)	(10,19)	(12,21)	(14,23)
W_G	–	277	498	781	1126	1533	2002	2533	3126
W_H	–	297	540	853	1236	1689	2212	2805	3468
n	10	15	20	25	30	35	40	45	50
(s,r)	(0,4)	(2,6)	(4,8)	(6,10)	(8,12)	(10,14)	(12,16)	(14,18)	(16,20)
W	100	244	450	718	1048	1440	1894	2410	2988

Для графов рассматриваемой структуры и их реберных графов разность между их индексами Винера может быть произвольной.

Утверждение 10. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 3$*

существуют такие двудольные невнешнепланарные графы G *и* H, *что* $W(L(G)) - W(G) = t$ *и* $W(L(H)) - W(H) = -t$.

Справедливость утверждения следует из выполнения равенств для индексов Винера: $W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,2\lambda+1})) - W(G_{\lambda,2\lambda-5,2\lambda+1}) = \lambda$ при $\lambda \geqslant 3$ и $W(L(G_{\lambda,2\lambda-3,2\lambda-1})) - W(G_{\lambda,2\lambda-3,2\lambda-1}) = -\lambda$ при $\lambda \geqslant 2$.

5.2. Присоединение обобщенной уравновешенной звезды GS_2. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части $B\overline{O}$ и обобщенной уравновешенной звезды GS_2 отождествлением вершин v. Граф имеет $\lambda + 2s + 3r + 3$ вершин. Применяя формулу (2), получаем

$$W(G_{\lambda,s,r}) = \lambda^2 + 3\lambda + 5\lambda s + 9\lambda r + 6s^2 + 18r^2 + 21sr + 10s + 13r + 4.$$

Структура реберного графа $L(G_{\lambda,s,r})$ показана на рис. 3 г. Его индекс Винера равен

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (6\lambda^2 + 8\lambda + 16\lambda s + 30\lambda r + 8s^2 + 27r^2 + 30sr + 10s + 11r + 2)/2.$$

Тогда для разности индексов Винера имеем

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r}) = (4\lambda^2 + 2\lambda + 6\lambda s + 12\lambda r - 4s^2 - 9r^2 - 12sr - 10s - 15r - 6)/2. \quad (8)$$

Пусть граф $H_{\lambda,s,r}$ построен аналогично графу $G_{\lambda,s,r}$, за исключением того, что циклическая часть $B\overline{O}$ присоединяется в вершине 1 (см. рис. 1). Графы имеют 5λ вершин и $W(G_{\lambda,2\lambda-3,1}) = 35\lambda^2 - 13\lambda - 4$, $W(H_{\lambda,2\lambda-3,1}) = 39\lambda^2 - 20\lambda - 1$ при $\lambda \geqslant 2$.

Утверждение 11. *Для индекса Винера двудольных невнешнепланарных графов* $G_{\lambda,2\lambda-3,1}$ *и* $H_{\lambda,2\lambda-3,1}$ *с цикломатическим числом* λ *справедливы следующие равенства*: $W(G_{\lambda,2\lambda-3,1}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-3,1}))$ *и* $W(H_{\lambda,2\lambda-3,1}) = W(L(H_{\lambda,2\lambda-3,1}))$ *при* $\lambda \geqslant 2$.

Для доказательства достаточно подставить соответствующие значения параметров r и s в выражение для разности индексов Винера (8).

Характеристики графов этих семейств для начальных значений цикломатического числа указаны в таблице 6.

Т а б л и ц а 6

Графы $G_{\lambda,2\lambda-3,1}$ *и* $H_{\lambda,2\lambda-3,1}$ *для* $\lambda \leqslant 11$

λ	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
n	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55
(s,r)	(1,1)	(3,1)	(5,1)	(7,1)	(9,1)	(11,1)	(13,1)	(15,1)	(17,1)	(19,1)
W_G	110	272	504	806	1178	1620	2132	2714	3366	4088
W_H	115	290	543	874	1283	1770	2335	2987	3699	4498

Утверждение 12. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 2$ существуют такие двудольные невнешнепланарные графы G и H, что $W(L(G)) - W(G) = -t$.*

Справедливость утверждения 12 следует из равенства индексов Винера графов: $W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2})) - W(G_{\lambda,2\lambda-4,2}) = -\lambda$ при $\lambda \geqslant 2$.

6. Недвудольные и невнешнепланарные графы

При присоединении к циклической части $\overline{BO}$ древесных частей DS и GS_2 получим графы, которые не являются ни двудольными, ни внешнепланарными.

6.1. Присоединение двойной звезды DS. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части $\overline{BO}$ и двойной звезды DS отождествлением вершин v. Число вершин графа равно $\lambda+s+r+3$. Вычислив его индекс Винера по формуле (2), получим

$$W(G_{\lambda,s,r}) = \lambda^2 + 3\lambda + 2\lambda s + 3\lambda r + s^2 + r^2 + 3sr + 4s + 5r + 4.$$

Для реберного графа $L(G_{\lambda,s,r})$, изображенного на рис. 3 д, имеем

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (6\lambda^2 + 6\lambda + 6\lambda s + 10\lambda r + s^2 + r^2 + 4sr + 3s + 5r + 2)/2.$$

Отсюда следует, что разность индексов Винера равна

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r}) \\ = (4\lambda^2 + 2\lambda s + 4\lambda r - s^2 - r^2 - 2sr - 5s - 5r - 6)/2. \quad (9)$$

Утверждение 13. *Для недвудольных невнешнепланарных графов $G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda+1}$ и $G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+4}$ с цикломатическим числом λ справедливы равенства: $W(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda+1}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda+1}))$ при $\lambda \geqslant 2$ и $W(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+4}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+4}))$ при $\lambda \geqslant 3$.*

Справедливость утверждения 13 можно проверить, подставив значения параметров r и s в выражение для разности индексов Винера (9). Число вершин в графах $G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda+1}$ и $G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+4}$ равно 5λ и $5\lambda+1$ соответственно. При этом $W(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda+1}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda+1})) = 31\lambda^2 - 14\lambda - 2$ при $\lambda \geqslant 2$ и $W(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+4}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+4})) = 31\lambda^2 + \lambda - 20$ при $\lambda \geqslant 3$.

В таблице 7 даны характеристики графов полученных семейств для начальных значений цикломатического числа.

Таблица 7

Графы $G_{\lambda,2\lambda-4,2\lambda+1}$ (сверху) и $G_{\lambda,2\lambda-6,2\lambda+4}$ для $\lambda \leqslant 10$

l	2	3	4	5	6	7	8	9	10
n	10	15	20	25	30	35	40	45	50
(s,r)	(0,5)	(2,7)	(4,9)	(6,11)	(8,13)	(10,15)	(12,17)	(14,19)	(16,21)
W	94	235	438	703	1030	1419	1870	2383	2958
n	–	16	21	26	31	36	41	46	51
(s,r)	–	(0,10)	(2,12)	(4,14)	(6,16)	(8,18)	(10,20)	(12,22)	(14,24)
W	–	262	480	760	1102	1506	1972	2500	3090

Утверждение 14. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 3$ существуют такие недвудольные невнешнепланарные графы G и H, что $W(L(G)) - W(G) = t$ и $W(L(H)) - W(H) = -t$.*

Справедливость утверждения 14 следует из выполнения следующих равенств для индексов Винера графов:

$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,2\lambda+2})) - W(G_{\lambda,2\lambda-5,2\lambda+2}) = \lambda \text{ при } \lambda \geqslant 3 \text{ и}$$
$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-3,2\lambda})) - W(G_{\lambda,2\lambda-3,2\lambda}) = -\lambda \text{ при } \lambda \geqslant 2.$$

Заметим, что до сих пор не было построено графов, для которых индексы Винера различались бы на 1. Для индекса Винера графа $G_{\lambda,2\lambda-2,2\lambda-2}$ выполняется необходимое свойство: $W(L(G_{\lambda,2\lambda-2,2\lambda-2})) - W(G_{\lambda,2\lambda-2,2\lambda-2}) = -1$ для любого цикломатического числа $\lambda \geqslant 2$. Для графа $G_{\lambda,2\lambda-3,2\lambda-1}$ справедливо равенство

$$W(L(G_{\lambda,2\lambda-3,2\lambda-1})) - W(G_{\lambda,2\lambda-3,2\lambda-1}) = \lambda - 1$$

при $\lambda \geqslant 2$. При $\lambda = 2$ имеем $W(L(G_{2,1,3})) - W(G_{2,1,3}) = 1$.

Легко указать пример графа с $\lambda = 1$, дающего разность индексов равную -1, т. е. $t = \lambda = 1$. Наименьшим является треугольник G с висячим ребром, для которого $W(L(G)) - W(G) = 7 - 8 = -1$. Так как для моноциклических графов всегда выполняется $W(L(G)) - W(G) \leqslant 0$, то разность индексов, равная 1, не может быть реализована на графах с $\lambda = 1$.

В связи с указанным выше примером возникает вопрос о существовании такого графа G с произвольным цикломатическим числом, что $W(L(G)) - W(G) = t$ для заданного целого t. Укажем еще одно такое значение t. Именно, для графа $G_{\lambda,2\lambda,2\lambda-5}$ справедливо равенство $W(L(G_{\lambda,2\lambda,2\lambda-5})) - W(G_{\lambda,2\lambda,2\lambda-5}) = -3$ при $\lambda \geqslant 3$.

6.2. Присоединение обобщенной уравновешенной звезды GS_2. Пусть граф $G_{\lambda,s,r}$ образуется из циклической части $\overline{BO}$ и обобщенной уравновешенной звезды GS_2 отождествлением вершин v. Число вершин графа равно $\lambda + 2s + 3r + 2$. По формуле (2) имеем

$$W(G_{\lambda,s,r}) = \lambda^2 + \lambda + 5\lambda s + 9\lambda r + 6s^2 + 18r^2 + 21sr + 3s + r + 1.$$

Реберный граф $L(G_{\lambda,s,r})$ приведен на рис. 3е. Его индекс равен

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) = (6\lambda^2 + 16\lambda s + 30\lambda r + 8s^2 + 27r^2 + 30sr - 7r)/2.$$

Тогда разность индексов Винера запишется в виде

$$W(L(G_{\lambda,s,r})) - W(G_{\lambda,s,r})$$
$$= (4\lambda^2 - 2\lambda + 6\lambda s + 12\lambda r - 4s^2 - 9r^2 - 12sr - 6s - 9r - 2)/2. \quad (10)$$

Пусть граф $H_{\lambda,s,r}$ строится аналогично графу $G_{\lambda,s,r}$, за исключением того, что для присоединения циклической части $\overline{BO}$ выбирается вершина с номером λ (см. рис. 1).

Утверждение 15. *Для недвудольных невнешнепланарных графов $G_{\lambda,2\lambda-5,3}$ и $H_{\lambda,2\lambda-5,3}$ с цикломатическим числом $\lambda \geqslant 3$ справедливы равенства*:

$$W(G_{\lambda,2\lambda-5,3}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,3})) \text{ и } W(H_{\lambda,2\lambda-5,3}) = W(L(H_{\lambda,2\lambda-5,3})).$$

Справедливость утверждения 15 проверяется подстановкой соответствующих значений параметров r и s в выражение для разности индекса Винера (10). В каждом графе имеется $5\lambda + 1$ вершин и $W(G_{\lambda,2\lambda-5,3}) = W(L(G_{\lambda,2\lambda-5,3})) = 35\lambda^2 + 15\lambda - 14$, $W(H_{\lambda,2\lambda-5,3}) = W(L(H_{\lambda,2\lambda-5,3})) = 39\lambda^2 + 10\lambda - 13$ при $\lambda \geqslant 3$.

В таблице 8 приводятся данные о начальных графах этих семейств.

Таблица 8

Графы $G_{\lambda,2\lambda-5,3}$ и $H_{\lambda,2\lambda-5,3}$ для $\lambda \leqslant 12$

λ	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
n	16	21	26	31	36	41	46	51	56	61
(s,r)	(1,3)	(3,3)	(5,3)	(7,3)	(9,3)	(11,3)	(13,3)	(15,3)	(17,3)	(19,3)
W_G	346	606	936	1336	1806	2346	2956	3636	4386	5206
W_H	368	651	1012	1451	1968	2563	3236	3987	4816	5723

Утверждение 16. *Для произвольного натурального числа $t \geqslant 2$ существуют такие недвудольные невнешнепланарные графы G, что $W(L(G)) - W(G) = t$.*

Равенство $W(L(G_{\lambda,2\lambda-4,2})) - W(G_{\lambda,2\lambda-4,2}) = \lambda$ для $\lambda \geqslant 2$ влечет справедливость утверждения.

7. Доказательства теорем

Справедливость теоремы 1 следует из утверждений с четными номерами и замечания в конце пункта 6.1. Теорема 2 следует из утверждений с нечетными номерами.

Замечание. Кроме плоских графов существуют и неплоские графы, обладающие свойством (1). Известно, что наименьшими по числу вершин неплоскими графами являются графы Понтрягина–Куратовского K_5 и $K_{3,3}$.

Пусть граф G_1 получен из полного графа K_5, к одной вершине которого присоединена звезда $K_{1,20}$ своей центральной вершиной. Он не является двудольным, имеет 25 вершин, цикломатическое число $\lambda(G_1) = 6$ и $W(L(G_1)) = W(G_1) = 570$.

Пусть граф G_2 получен из полного двудольного графа $K_{3,3}$, к одной вершине которого присоединена звезда $K_{1,11}$ своей центральной вершиной. Он является двудольным, имеет 17 вершин, цикломатическое число $\lambda(G_2) = 4$ и $W(L(G_2)) = W(G_2) = 274$.

8. Открытые вопросы

Отметим, что число вершин во всех построенных графах равно $n = 5k$ или $n = 5k+1$, $k \geqslant 2$. Пусть $n(\lambda)$ — наименьшее число вершин графа с цикломатическим числом $\lambda \geqslant 2$, для которого выполняется свойство (1). Напомним, что $n(2) = 9$ и $n(3) = 12$. Из теоремы 2 следует, что $n(\lambda) \leqslant 5\lambda$ при всех $\lambda \geqslant 4$. Из начальных конструкций [11] следует, что $n(5) \leqslant 21$ и $n(7) \leqslant 29$.

Вопрос 1. Можно ли явно определить функцию $n(\lambda)$ при $\lambda \geqslant 4$.

Нам представляется, что вид функции $n(\lambda)$ является сложным и может зависеть от теоретико-числовых свойств λ. Кроме того, мы полагаем, что на основе $n(\lambda)$–вершинных или 5λ–вершинных графов со свойством (1) можно построить графы с числом вершин n, где $n \geqslant n(\lambda)$ или $n \geqslant 5\lambda$.

Вопрос 2. Для любого ли числа вершин, не меньшего $n(\lambda)$, существуют графы с цикломатическим числом $\lambda \geqslant 2$, удовлетворяющие свойству (1).

Для приложений теории графов представляет интерес вопрос о существовании бесконечных рядов молекулярных графов с рассматриваемым свойством индекса Винера. Такие графы имеют ограничение на степени вершин.

Вопрос 3. Существуют ли бесконечные серии графов со свойством (1), в которых максимальная степень вершин не превышает 4.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Добрынин А. А., Гутман И.** Индекс Винера для деревьев и графов гексагональных систем // Дискрет. анализ и исслед. операций. Сер. 2. 1998. Т. 5, № 2. С. 34–60.
2. **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.
3. **Евстигнеев В. А., Касьянов В. Н.** Толковый словарь по теории графов в информатике и программировании. Новосибирск: Наука, 1999.
4. **Руврэ Д.** Следует ли заниматься разработкой топологических индексов? // Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С. 183–205.
5. **Станкевич И. В.** Графы в структурной химии // Применение теории графов в химии. Новосибирск: Наука, 1988. С. 7–69.
6. **Станкевич М. И., Станкевич И. В., Зефиров Н. С.** Топологические индексы в органической химии // Успехи химии. 1988. Т. 57. С. 337–366.
7. **Bertz S. H., Wright W. F.** The graph theory approach to synthetic analysis: definition and application of molecular complexity and synthetic complexity // Graph Theory Notes New York. 1998. V. 35. P. 32–48.
8. **Buckley F.** Mean distance in line graphs // Congr. Numer. 1981. V. 32. P. 153–162.
9. **Dobrynin A. A., Entringer R., Gutman I.** Wiener index for trees: theory and applications // Acta Appl. Math. 2001. V. 66, N 3. P. 211–249.
10. **Dobrynin A. A., Gutman I., Klavžar S., Žigert P.** Wiener index of hexagonal systems // Acta Appl. Math. 2002. V. 72, N 3. P. 247–294.
11. **Dobrynin A. A., Mel'nikov L. S.** Wiener index for graphs and their line graphs with increasing cyclomatic number // Appl. Math. Lett. 2004. (в печати).
12. **Entringer R. C., Jackson D. E., Snyder D. A.** Distance in graphs // Czechoslovak Math. J. 1976. V. 26, N 2. P. 283–296.
13. **Gutman I.** Distance of line graphs // Graph Theory Notes New York. 1996. V. 31. P. 49–52.
14. **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.

15. **Gutman I., Pavlović L.** More of distance of line graphs // Graph Theory Notes New York. 1997. V. 33. P. 14–18.
16. **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.
17. **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.
18. **Gutman I., Polansky O. E.** Mathematical concepts in organic chemistry. Berlin: Springer–Verl., 1986.
19. **Gutman I., Popović L., Mishra B. K., Kaunar M., Estrada E., Guevara N.** Application of line graphs in physical chemistry Predicting surface tension of alkanes. // J. Serb. Chem. Soc. 1997. V. 62. P. 1025–1029.
20. **Nikolić S., Trinajstić N., Mihalić Z.** The Wiener index: developments and applications // Croat. Chem. Acta. 1995. V. 68, N 1. P. 105–129.
21. **Plesnik J.** On the sum of all distances in a graph or digraph // J. Graph Theory. 1984. V. 8, N 1. P. 1–21.
22. **Todeschini R., Consonni V.** Handbook of molecular descriptors. Weinheim: Wiley–VCH, 2000.
23. **Trinajstić N.** Chemical graph theory. Boca Raton, FL: CRC Press, 1992.
24. **Wiener H.** Structural determination of paraffin boiling points // J. Amer. Chem. Soc. 1947. V. 69. P. 17–20.

Адрес авторов:

Институт математики
им. С. Л. Соболева СО РАН,
пр. Академика Коптюга, 4,
630090, Новосибирск, Россия.
E-mail: dobr@math.nsc.ru,
omeln@math.nsc.ru

Статья поступила
7 июля 2004 г.