АНАЛИЗ ДАННЫХ В ЭКСПЕРТНЫХ СИСТЕМАХ
(Вычислительные системы)
1986 год

УДК 519.17:5/6

ДИСТАНЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

А.А. Добрынин

Во многих задачах обнаружения корреляций типа "структура-свойство" в органической химии используются метрические характеристики молекулярных графов в виде так называемых топологических индексов [1]. Одним из известных топологических индексов является число Винера, которому в теории графов соответствует дистанция графа. Изменение числа Винера при структурных перестройках полициклических соединений изучалось в [3-5]. В общем виде изменение дистанции при структурных преобразованиях графов, образованных из пары произвольных графов G и H отождествлением вершины, изучалось в [2]. В настоящей работе будет продолжено изучение изменения дистанции графа при его структурных преобразованиях. Результаты из [2] будут использованы для получения выражений, описывающих изменение дистанции при преобразованиях графов более простой структуры (вместо произвольного графа H рассматривается простой цикл). Будут также рассмотрены преобразования графов, образованных из G и простого цикла четного порядка отождествлением ребра. Преобразование в этом случае заключается в отождествлении другого ребра графа G с циклом. При преобразованиях допускается изменение типа присоединения цикла к графу G и изменение порядка цикла.

1. Определения и обозначения

Пусть G – связный неориентированный граф без петель и кратных ребер; $V(G)$ – множество вершин графа G, $|V(G)| = p_G$; C_k – простой цикл порядка k. Если $u, v \in V(G)$, то $d_G(u,v)$ есть расстояние между вершинами u и v, или длина кратчайшей простой цепи, соединяющей u и v. Пусть $v \in V(G)$ и $H \subseteq G$. Обозначим через $D_G(v) = \sum_{u \in V(G)} d_G(u, v)$ дистанцию вершины v в графе G, через $D_G(H) =$

$= \sum_{v \in V(H)} D_G(v)$ дистанцию подграфа H в графе G, через $D(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} D_G(v)$ дистанцию графа G. Граф L, образованный из графов G и C_k отождествлением вершин $u \in V(G)$ и $v \in V(C_k)$, будем обозначать $L = (G, C_k, u, v)$ [2].

Постановка задачи. Пусть $L = (G, C_k, u, v)$. Рассмотрим преобразование φ графа L такое, что $\varphi(L) = (G, C_k, u_1, v)$, где $u_1 \in V(G)$. Требуется определить, как будет изменяться дистанция графа L при преобразовании φ, т.е. оценить величину $D(L) - D(\varphi(L))$.

Более общий случай, когда $L = (G, H, u, v)$, где G, H – произвольные графы, рассматривался в [2].

2. Изменение дистанции графа при перемещении цикла, присоединенного по вершине

Пусть $L = (G, H, u, v)$. В [2] получено выражение дистанции графа L через дистанции графов G, H и дистанции вершин $u \in V(G)$, $v \in V(H)$.

ЛЕММА I [2]. $D(L) = D(G) + D(H) + (p_H - 1)D_G(u) + (p_G - 1)D_H(v)$.

Следующее утверждение является следствием леммы I. Пусть $L = (G, C_k, u, v)$, тогда выполняется

ТЕОРЕМА I. $D(L) = D(G) + \varphi_1(k)D_G(u) + \varphi_2(k)p_G + \varphi_3(k)$,

где $$\varphi_1(k) = k-1,\quad \varphi_2(k) = \begin{cases} \frac{1}{4}k^2, & k \text{ четно,} \\ \frac{1}{4}(k^2-1), & k \text{ нечетно;} \end{cases}$$

$$\varphi_3(k) = \begin{cases} \frac{1}{8}k^2(k-2), & k \text{ четно,} \\ \frac{1}{8}(k^2-1)(k-2), & k \text{ нечетно.} \end{cases}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. По лемме I дистанция графа L равна

$D(L) = D(G) + D(C_k) + (p_G - 1)D_{C_k}(v) + (k-1)D_G(u)$.

Для простого цикла порядка k справедливо

$$D(C_k) = \begin{cases} \frac{1}{8}k^3, & k \text{ четно;} \\ \frac{1}{8}k(k^2-1), & k \text{ нечетно;} \end{cases} \qquad D_{C_k}(v) = \begin{cases} \frac{1}{4}k^2, & k \text{ четно;} \\ \frac{1}{4}(k^2-1), & k \text{ нечетно.} \end{cases}$$

Подставляя значения для $D(C_k)$, $D_{C_k}(v)$ в (I), получаем утверждение теоремы.

При присоединении к G, например, цикла порядка 5 выражение для $D(L)$ имеет вид $D(L) = D(G)+4D_G(u)+6p_G+9$, а для цикла порядка 6 $D(L) = D(G)+5D_G(u)+9p_G+18$.

Используем теорему I для описания изменения дистанции графа при некоторых конкретных преобразованиях структуры графа, рассматриваемых в [3].

I. Пусть цикл порядка k, присоединенный к вершине u графа G, присоединяется к новой вершине $u_1 \in V(G)$, т.е. $L = (G, C_k, u, v)$ и $L_1 = (G, C_k, u_1, v)$ (рис. I), тогда

$$D(L) - D(L_1) = (k-1)(D_G(u)-D_G(u_1)). \qquad (2)$$

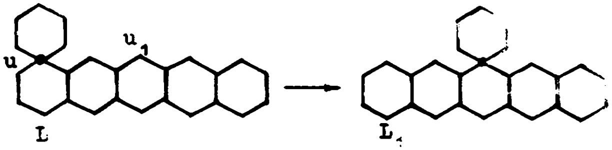

Рис. I

2. Пусть цикл C_k, присоединенный к вершине u графа G, изменяет свой порядок, т.е. $L = (G, C_k, u, v)$ и $L_1 = (G, C_{k_1}, u, v)$ (рис.2); тогда при четных k и k_1

$$D(L)-D(L_1) = \varphi_1(k, k_1)D_G(u)+\varphi_2(k, k_1)p_G+\varphi_3(k, k_1), \qquad (3)$$

где $\varphi_1(k, k_1) = k - k_1$, $\varphi_2(k, k_1) = \frac{1}{4}(k^2 - k_1^2)$,

$$\varphi_3(k, k_1) = \frac{1}{8}(k^3 - k_1^3) + \frac{1}{4}(k_1^2 - k^2).$$

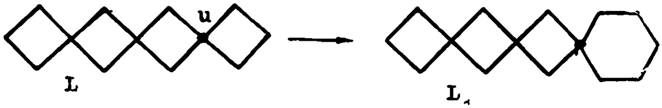

Рис. 2

3. Рассмотрим перемещение цикла в графе с изменением размера цикла. Пусть $L = (G, C_k, u, v)$ и $L_1 = (G, C_{k_1}, u_1, v)$ (рис.3), тогда при четных k и k_1

$$D(L)-D(L_1) = \varphi_1(k)D_G(u)-\varphi_1(k_1)D_G(u_1)+\varphi_2(k,k_1)p_G+\varphi_3(k,k_1), \quad (4)$$

где $\varphi_1(k)=k-1$, $\varphi_2(k, k_1)$ и $\varphi_3(k,k_1)$ такие же, как для (3).

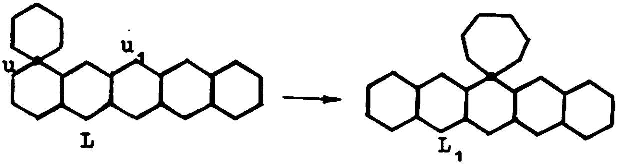

Рис. 3

3. Изменение дистанции графа при перемещении цикла, присоединенного по ребру

Пусть граф L образован из графа G и простого цикла C_k (k четно) отождествлением ребра (u, v) графа G и ребра (u_1, v_1) графа C_1. Дистанция графа L через дистанции графов G, C_k и дистанции соответствующих вершин выражается следующим образом:

ТЕОРЕМА 2.

$$D(L) = D(G)+\varphi_1(k)(D_G(u)+D_G(v))+\varphi_2(k)p_G+\varphi_3(k),$$

где $\varphi_1(k) = \frac{1}{2}(k-2)$, $\varphi_2(k) = \frac{1}{4}k(k-2)$, $\varphi_3(k) = \frac{1}{8}k^2(k-4)+1$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Представим множество вершин графа L в виде $V(L) = V(G) \cup V(H)$, где H – подграф, порожденный на множестве вершин $V(C_k) \setminus \{u_1, v_1\}$. Тогда

$$2D(L) = \sum_{v \in V(L)} D_L(v) = \sum_{v \in V(G)} D_L(v) + \sum_{v \in V(H)} D_L(v). \quad (5)$$

Рассмотрим каждое слагаемое из (5) в отдельности.

1) $$\sum_{v \in V(G)} D_L(v) = \sum_{v \in V(G)} \Big(\sum_{u \in V(G)} d_L(u,v) + \sum_{u \in V(H)} d_L(u,v) \Big) =$$

$$= \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v) + \sum_{\substack{v \in V(G)\\ u \in V(H)}} d_L(u,v) = 2D(G) + \sum_{\substack{v \in V(G)\\ u \in V(H)}} d_L(u,v);$$

2) $$\sum_{v \in V(H)} D_L(v) = \sum_{v \in V(H)} \Big(\sum_{u \in V(G)} d_L(u,v) + \sum_{u \in V(H)} d_L(u,v) \Big) = \sum_{\substack{v \in V(H)\\ u \in V(G)}} d_L(u,v) +$$

$$+\sum_{u,v\in V(H)} d_L(u,v)=\sum_{\substack{v\in V(H)\\ u\in V(G)}} d_L(u,v)+\sum_{u,v\in V(H)} d_{C_k}(u,v)=\sum_{\substack{v\in V(H)\\ u\in V(G)}} d_L(u,v)\ +$$

$$+\sum_{v\in V(H)} D_{C_k}(v)-(D_{C_k}(u_1)+D_{C_k}(v_1)+2)=\sum_{\substack{v\in V(H)\\ u\in V(G)}} d_L(u,v)\ +$$

$$+(k-2)\,\frac{1}{4}\,k^2-2\frac{1}{4}\,k^2+2=\sum_{\substack{v\in V(H)\\ u\in V(G)}} d_L(u,v)+\frac{1}{4}\,k^2(k-4)+2\,.$$

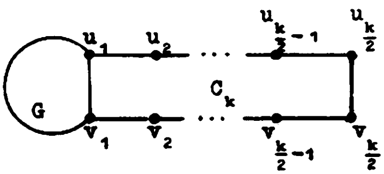

Рис. 4

Подставив полученные выражения в (5), получим

$$2D(L)=2D(G)+\frac{1}{4}\,k^2(k-4)+2\ +$$

$$+\ 2\sum_{\substack{v\in V(H)\\ u\in V(G)}} d_L(u,v)\,.$$

Для определения значения $\sum_{\substack{v\in V(H)\\ u\in V(G)}} d_L(u,v)$ рассмотрим граф L на рис.4.Обозначим $V_1=\{u_2,u_3,\dots,u_{\frac{k}{2}}\}$, $V_2=\{v_2,v_3,\dots,v_{\frac{k}{2}}\}$, $V(H)=V_1\cup V_2$, тогда

$$\sum_{\substack{v\in V(G)\\ u\in V(H)}} d_L(u,v)=\sum_{\substack{v\in V(G)\\ u\in V_1}} d_L(u,v)+\sum_{\substack{v\in V(G)\\ u\in V_2}} d_L(u,v)=$$

$$=\sum_{i=2}^{k/2}\ \sum_{v\in V(G)}(d(u_i,u_1)+d(u_1,v))+\sum_{i=2}^{k/2}\ \sum_{v\in V(G)}(d(v_i,v_1)+d(v_1,v))=$$

$$=\sum_{i=2}^{k/2}(p_G d(u_i,u_1)+D_G(u_1))+\sum_{i=2}^{k/2}(p_G d(v_i,v_1)+D_G(v_1))=$$

$$=p_G\sum_{i=2}^{k/2} d(u_i,u_1)+\left(\frac{k}{2}-1\right)D_G(u_1)+p_G\sum_{i=2}^{k/2} d(v_i,v_1)+\left(\frac{k}{2}-1\right)D_G(v_1)=$$

$$=p_G\,\frac{k}{4}\left(\frac{k}{2}-1\right)+\left(\frac{k}{2}-1\right)D_G(u_1)+p_G\,\frac{k}{4}\left(\frac{k}{2}-1\right)+\left(\frac{k}{2}-1\right)D_G(v_1)\,.$$

Окончательно получаем $D(L)=D(G)+\frac{1}{2}(k-2)(D_G(u)+D_G(\ v\ )\ )\ +$ $+\ \frac{1}{4}k(k-2)p_G+\frac{1}{8}k^2(k-4)+1$.**Теорема доказана.**

Если к ребру (u,v) графа G присоединяется шестичленное кольцо, то формула для $D(L)$ имеет вид $D(L) = D(G) + 2(D_G(v) + D_G(u)) + 6p_G + 10$.

Используем теорему 2 для описания изменения дистанции графа при структурных преобразованиях, рассматриваемых в [5]. Ниже предполагается, что цикл C_k имеет четный порядок.

I. Пусть цикл C_k, присоединенный к графу G по ребру (u,v), вновь присоединяется к G по ребру (u_1,v_1) (рис.5), тогда

$$D(L) - D(L_1) = \varphi_1(k)(D_G(u) - D_G(u_1)) + \varphi_1(k)(D_G(v) - D_G(v_1)), \quad (6)$$

где $\varphi_1(k) = \frac{1}{2}(k-2)$.

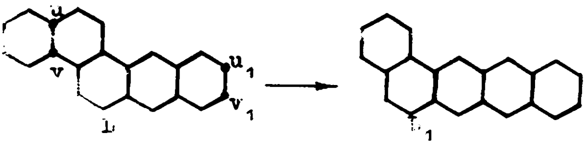

Рис. 5

2. Пусть цикл C_k, присоединенный к графу G по ребру (u, v), изменяет свой порядок и становится циклом порядка k_1 (рис.6), тогда

$$D(L) - D(L_1) = \varphi_1(k,k_1)(D_G(u)+D_G(v)) + \varphi_2(k,k_1)p_G + \varphi_3(k,k_1), \quad (7)$$

где

$$\varphi_1(k,k_1) = \frac{1}{2}(k-k_1), \quad \varphi_2(k,k_1) = \frac{1}{4}(k^2-k_1^2) + \frac{1}{2}(k_1-k),$$

$$\varphi_3(k,k_1) = \frac{1}{8}(k^3-k_1^3) + \frac{1}{2}(k_1^2-k^2).$$

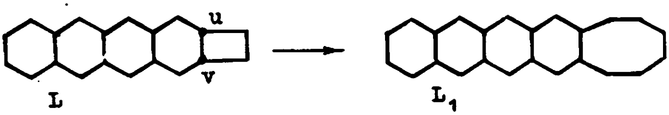

Рис. 6

3. Рассмотрим перемещение цикла в графе с одновременным изменением порядка цикла. Пусть цикл C_k, присоединенный к ребру (u,v) графа G, преобразуется в цикл C_{k_1} и присоединяется к графу G по ребру (u_1,v_1) (рис.7), тогда

$$D(L) - D(L_1) = \varphi_1(k)D_G(u) - \varphi_1(k_1)D_G(u_1) + \varphi_1(k)D_G(v) -$$
$$- \varphi_1(k_1)D_G(v_1) + \varphi_2(k,k_1)p_G + \varphi_3(k,k_1), \qquad (8)$$

где $\varphi_1(k)$, $\varphi_2(k,k_1)$, $\varphi_3(k,k_1)$ такие же, как в (7).

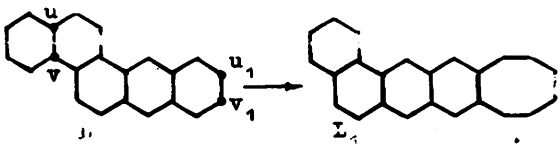

Рис. 7

4. Изменение дистанции графа при перемещении цикла с изменением типа присоединения цикла

Результаты, сформулированные в предыдущих пунктах, позволяют описать изменение дистанции графа, и в случае, когда присоединенный по вершине к графу G цикл вновь присоединяется к G уже по ребру, и обратно.

I. Пусть цикл C_k (k четно), присоединенный по ребру (u,v) графа G, изменяет свое положение и присоединяется к вершине $u_1 \in V(G)$ (рис.8), тогда

$$D(L) - D(L_1) = \varphi_1(k)(D_G(u)+D_G(v)) - \varphi_2(k)D_G(u_1) + \varphi_3(k)p_G + \varphi_4(k), \qquad (9)$$

где $\varphi_1(k) = \frac{1}{2}(k-2)$, $\varphi_2(k) = k-1$, $\varphi_3(k) = -\frac{1}{2}k$, $\varphi_4(k) = 1 - \frac{1}{4}k^2$.

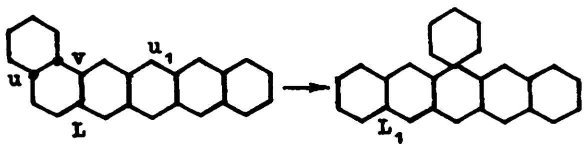

Рис. 8

2. Пусть преобразование структуры графа происходит, как и в предыдущем случае, но порядок присоединяемого цикла становится равным k_1 (k_1 четно), тогда (рис.9)

$$D(L)-D(L_1)=\varphi_1(k)(D_G(u)+D_G(v))-\varphi_2(k_1)D_G(u_1)+\varphi_3(k,k_1)p_G+\varphi_4(k,k_1), \quad (10)$$

где $\varphi_1(k)$, $\varphi_2(k)$ такие же, как и в предыдущем случае,

$$\varphi_3(k,k_1) = \frac{1}{4}(k^2-2k-k_1^2), \quad \varphi_4(k,k_1) = \frac{1}{8}(k^3-k_1^3+2k_1^2-4k^2) + 1.$$

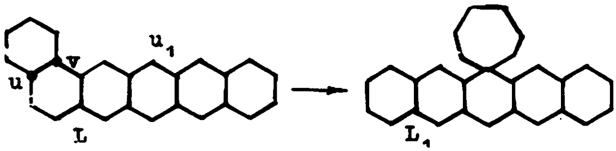

Рис. 9

В [3] рассматривается преобразование графа L в случае, когда G также является простым циклом и исследуется изменение числа Винера. Используя формулы для $D(L)$, можно в явном виде найти выражение, описывающее изменение дистанции графа. Пусть, например, $L = (C_k, C_{k_1}, u, v)$ и $L_1 = (C_{k_2}, C_{k_3}, u, v)$ такие, что $k+k_1 = k_3+k_4$ (L

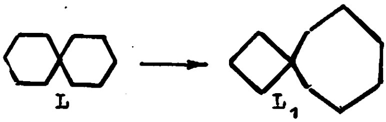

Рис.10

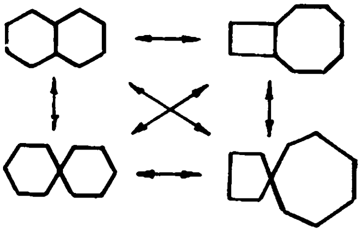

Рис.II

и L_1 - изомеры) (рис.10), тогда $D(L)-D(L_1) = \varphi(k,k_1,k_2,k_3)$. На рис.II приведена диаграмма преобразований, при которых изменение дистанции графов представимо в указанном виде.

Заключение

В работе изучалось изменение дистанции графа при преобразованиях его структуры. Рассматривались графы, состоящие из заданного графа и соединенного с ним простого цикла. Присоединение цикла осуществляется по вершине или по ребру. Получены формулы, описывающие в явном виде изменение дистанции графа. Результаты могут использоваться в алгоритмах построения графов с заданными значениями дистанций.

Литература

1. ROUVRAY D.H. Should we have designs on topological indices? - Chemical applications of topology and graph theory, 1983, v.28, p.159-177.

2. СКОРОБОГАТОВ В.А., ДОБРЫНИН А.А. Влияние структурных преобразований графа на значение его дистанции. -Настоящий сборник, с. 103-113.

3. MEKENYAN O., BONCHEV D., TRINAJSTIĆ N. Topological rules for spirocompounds.- Math.chem.(MATCH), 1979, N 6, p.93-115.

4. MEKENYAN O., BONCHEV D., TRINAJSTIĆ N. A topological characterization of cyclic structures with acyclic branches.- Math. chem. (MATCH), 1981, N 11, p.145-168.

5. MEKENYAN O., BONCHEV D. Structural Complexity and Molecular Properties of Cyclic Systems with Acyclic Branches.- Croat. Chem.Acta, 1983, v.56, N 2, p.237-261.

Поступила в ред.-изд.отд.
23 июля 1986 года