УДК 519.176

Минимизация обобщенного первого загребского индекса на различных множествах графов

М.В. Губко[1], О.А. Милосердов[1, 2]

[1]Институт проблем управления им В.А. Трапезникова РАН

[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)

Топологические индексы – числовые функции, заданные на графах. Они широко используются при поиске количественных соотношений между структурой химических веществ и их физико-химическими или биологическими свойствами. Задача молекулярного дизайна (поиска вещества с заданными свойствами) часто сводится к оптимизации одних топологических индексов при ограничениях на другие.

Ниже рассматриваются простые связные неориентированные графы. Пусть $V(G)$ – множество вершин графа G, $E(G)$ – множество его ребер. Через $d_G(v)$ обозначим степень вершины $v \in V(G)$ в графе G (количество ее соседей в графе G), а через $n_d(G)$, $d = 1, \ldots, n-1$ – количество вершин степени d в графе G.

Первый загребский индекс графа G определяется как сумма квадратов степеней его вершин: $M_1(G) = \sum_{v\in V(G)} d_G(v)^2$. Пусть зафиксирована функция $c(d)$, $d \in \mathbb{N}$. Тогда *обобщенный первый загребский индекс* $C_1(G) := \sum_{v\in V(G)} c(d_G(v))$.

M_1 – один из наиболее востребованных и хорошо исследованных индексов. Обобщенный индекс C_1 исследован гораздо хуже, хотя к нему сводятся и мультипликативный второй загребский индекс, и индекс Рэндича нулевого порядка и др.

В частности, в [1] предложена нижняя оценка $C_1(\cdot)$ на множестве деревьев с заданным количеством висячих вершин. В [2] охарактеризованы деревья с заданным числом висячих вершин, доставляющие минимум M_1 и C_1. В [3] найдены минимумы M_1 на множествах графов с n вершинами, n_1 висячими вершинами и числом циклов $\gamma = 0, 1, 2$.

Во всех этих работах используется похожая схема доказательства. Ниже мы используем для характеризации минимумов C_1 на более сложных множествах графов.

Для пары натуральных чисел n и m обозначим через $\Xi(n,m)$ множество графов с n вершинами и m ребрами. Если вдобавок заданы неотрицательные целые числа $l_1, \ldots, l_{n-1}$, можно определить множество

$$\Xi(n,m,l_1,\ldots,l_{n-1}) := \left\{G\in\Xi(n,m) : n_d(G) \ge l_d,\ d = 1,\ldots,n-1\right\}$$

графов с n вершинами и m ребрами, имеющими не менее l_d вершин степени d. Для краткости обозначим $L := \sum_{d=1}^{n-1} l_d$ и $D := \sum_{d=1}^{n-1} d \cdot l_d$, а через $\lfloor \cdot \rfloor$ обозначим операцию округления вниз.

Теорема 1. Пусть функция $c(\cdot)$ строго выпукла. Тогда для любого $G \in \Xi(n, m, l_1, \ldots, l_{n-1})$

$$C_1(G) \geq \sum_{d=1}^{n-1} l_d c(d) + \Delta_1 c\left(\lfloor d^* \rfloor\right) + \Delta_2 c\left(\lfloor d^* \rfloor + 1\right),$$

где $d^* := (2m - D)/(n - L)$, $\Delta_1 := (n-L)\left(\lfloor d^* \rfloor + 1 - d^*\right)$, $\Delta_2 := (n-L)\left(d^* - \lfloor d^* \rfloor\right)$. Если $\Xi(n, m, l_1, \ldots, l_{n-1})$ непусто, равенство в (1) достигается, причем на любом графе, в котором $n_{\lfloor d^* \rfloor}(G) = l_{\lfloor d^* \rfloor}(G) + \Delta_1$, $n_{\lfloor d^* \rfloor + 1}(G) = l_{\lfloor d^* \rfloor + 1}(G) + \Delta_2$ и $n_d(G) = l_d(G)$ для остальных *d*.

Таким образом, минимум C_1 достигается на произвольном графе, имеющем l_d «обязательных» вершин степени $d = 1, \ldots, n-1$, и, вдобавок, Δ_1 вершин степени $\lfloor d^* \rfloor$ и Δ_2 вершин степени $\lfloor d^* \rfloor + 1$. При этом d^*, Δ_1 и Δ_2 не зависят от $c(\cdot)$ (при условии ее выпуклости).

Рассмотрим множество $\Xi(n, m-1+\gamma, l_1, 0, ..., 0)$ графов с *n* вершинами, не менее чем l_1 висячими вершинами и цикломатическим числом *γ*. Для $G \in \Xi(n, n-1+\gamma, l_1, 0, ..., 0)$ $d^* = 2 + \dfrac{2\gamma + l_1 - 2}{n - l_1}$, соответственно, $\Delta_1 := (n - l_1)(\lfloor d^* \rfloor + 1 - d^*)$, $\Delta_2 := (n - l_1)\left(d^* - \lfloor d^* \rfloor\right)$.

Следствие 1. Для первого загребского индекса $M_1(G)$ выполняется неравенство

$$M_1(G) \geq -(n - l_1)\lfloor d^* \rfloor^2 + (3n - l_1 + 4\gamma - 4)\lfloor d^* \rfloor + 2(n - 1 + \gamma).$$

Следствие 2. Для *F*-индекса $F(G) = \sum_{v \in V(G)} d_G(v)^3$ выполняется неравенство

$$\mathrm{F}(G) \geq -2(n - l_1)\lfloor d^* \rfloor^3 + 3(n - 2 + 2\gamma)\lfloor d^* \rfloor^2 + (5n - 2l_1 + 6\gamma - 6)\lfloor d^* \rfloor + 2(n + \gamma - 1).$$

Следствие 3. Для мультипликативного 2-го загребского индекса $\Pi_2(G) = \prod_{uv \in E(G)} d_G(u) d_G(v)$

$$\Pi_2(G) \geq \lfloor d^* \rfloor^{[(n-l_1)\lfloor d^* \rfloor - (n-2+2\gamma)]\lfloor d^* \rfloor} (\lfloor d^* \rfloor + 1)^{[(2n-l_1+2\gamma-2)-(n-l_1)\lfloor d^* \rfloor](\lfloor d^* \rfloor + 1)}.$$

Эти следствия являются основной для минимизации индексов на множествах допустимых графов, сводящихся к объединению множеств $\Xi(n, n-1+\gamma, l_1, 0, ..., 0)$, например, графов с фиксированным числом l_1 висячих вершин.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 13-07-00491

Литература

1. *Goubko M.V.* Minimizing degree-based topological indices for trees with given number of pendent vertices // MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 2014. V. 71, No 1. P. 33-46.
2. *Goubko M.V., Gutman I.* Degree-based topological indices: Optimal trees with given number of pendents // Applied Mathematics and Computation. V. 240, 1 August 2014, P. 387–398.
3. *Gutman I., Kamran Jamil M., Akhter N.* Graphs with fixed number of pendent vertices and minimal first Zagreb index // Transactions on Combinatorics. 2015. V. 4, No. 1, P. 43-48.