СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ГРАФОВ С ЭКСТРЕМАЛЬНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ МЕТРИК ЗАГРЕБСКОГО ТИПА

Е. Н. Савенок

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь, savenokegorka7@gmail.com
Научный руководитель — Ю. Л. Орлович, кандидат физико-математических наук, доцент

В работе изучаются свойства графов с максимальными значениями метрик Загребского типа, которые по своему строению схожи с пороговыми графами, которые активно изучаются в геномной эпидемиологии. Главным результатом является получение общего вида графа с максмальным значением второй метрики Загребского типа.

Ключевые слова: метрики Загребского типа; s-метрика; m-метрика; пороговые графы.

Вторым Загребским индексом [1] (далее s-метрикой) графа G будем называть величину

$$s(G) = \sum_{\{u,v\}\in E(G)} \deg_G u \deg_G v$$

Лемма 1. Среди всех деревьев на n вершинах, максимальную s-метрику имеет звезда, а минимальную - цепь. Т.е. для любого дерева T, неизоморфного цепи или звезде выполняется

$$s(P_n) < s(T) < s(K_{1,n-1})$$

Теорема 1. Для (n,m)-графа G с максимальной s-метрикой выполняется $N_G(u) \subseteq N_G(v) \cup \{v\}$ или $N_G(v) \subseteq N_G(u) \cup \{u\}$, для любых $u, v \in V(G)$.

Доказательство. Предположим противное. Пусть G-(n,m)-граф с максимальной s-метрикой, но для него не выполняется условие теоремы, т.е. $N_G(u) \nsubseteq N_G(v) \cup \{v\}$ и $N_G(v) \nsubseteq N_G(u) \cup \{u\}$ для каких-то вершин u, v. Обозначим $Y = N_G(u) \cap N_G(v),\ X = N_G(u)\ /\ Y,\ Z = N_G(v)\ /\ Y$. Также положим $t = 1$, если $\{u, v\} \in E(G)$, $t = 0$ иначе.

Рассмотрим также случай, когда $\deg_G u \geq 2$ или $\deg_G v \geq 2$. Не нарушая общности, положим $\deg_G u \geq 2$. Тогда

$$s(G) = \deg_G u \sum_X \deg_G w + \deg_G u \sum_Y \deg_G w \ + \ \deg_G v \sum_Y \deg_G w +$$
$$\deg_G v \sum_Z \deg_G w \ + \ t \deg_G u \deg_G v + \sum_{\{w,w'\} \notin u \times v} \deg_G w \ \deg_G w'$$

Заметим, что $X \neq \emptyset$ и $Z \neq \emptyset$ по предположению. Наряду с G, рассмотрим граф G', такой что $V(G') = V(G)$, $E(G') = E(G) - uw + vw, w \in X$. Заметим также, что $|E(G')| = |E(G)|$. Тогда

$$s(G') = \deg_{G'} u \sum_Y \deg_{G'} w + \deg_{G'} v \sum_X \deg_{G'} w \ + \ \deg_{G'} v \sum_Y \deg_{G'} w +$$
$$\deg_{G'} v \sum_Z \deg_{G'} w \ + \ t \deg_{G'} u \deg_{G'} v + \sum_{\{w,w'\} \notin u \times v} \deg_{G'} w \ \deg_{G'} w' \ =$$
$$(\deg_G u - |X|) \sum_Y \deg_G w + (\deg_G v + |X|) \sum_X \deg_G w +$$
$$(\deg_G v + |X|) \sum_Y \deg_G w + (\deg_G v + |X|) \sum_Z \deg_G w \ +$$
$$t\,(\deg_G u - |X|)\,(\deg_G v + |X|) + \sum_{\{w,w'\} \notin u \times v} \deg_G w \ \deg_G w'$$

Заметим также, что $\deg_{\mathrm{G}} u = |X| + |Y| + t$, $\deg_{\mathrm{G}} v = |Y| + |Z| + t$. С учётом этого получаем:

$$s(G') - \ s(G) = \deg_G v \sum_X \deg_G w + |X| \sum_X \deg_G w + |X| \sum_Z \deg_G w +$$
$$t|X|(\deg_G u - \deg_G v) - t|X|^2 - \deg_G u \sum_X \deg_G w +$$
$$(|Y| + |Z| + t) \sum_X \deg_G w + |X| \sum_X \deg_G w - (|X| + |Y| + t) \sum_X \deg_G w +$$
$$|X| \sum_X \deg_G w + t|X|(|X| + |Y| - |Y| - |Z|) - t|X|^2 =$$
$$|Z| \sum_X \deg_G w + |X| \sum_Z \deg_G w - t|X||Z| \geq |Z||X| + |X||Z| - t|X||Z| > 0$$

Получили, что G' имеет большую s-метрику. Противоречие.

Если $\deg_G u = 1$ и $\deg_G v = 1$ рассматривается аналогично (случай, когда степени хотя бы одной из вершин равны нулю очевидно невозможен, потому что множество соседей такой вершины пустое и оно является подмножеством соседей другой вершины).

Лемма 2. Любой (n, m)-граф G с максимальной s-метрикой не содержит порождённых подграфов $2K_2, P_4, C_4$.

Доказательство. Пусть G содержит порождённый подграф $G' = 2K_2$. Обозначим $u, v, x, y \in G', \{u, v\} \in E(G'), \{x, y\} \in E(G')$ - вершины, образующие порождённый $2K_2$. Заметим, что $y \in N_G(x) \,\&\, y \notin N_G(u)$ и $v \in N_G(u) \,\&\, v \notin N_G(x)$. Получили противоречие с теоремой 1.

Аналогичные рассуждения для P_4 и C_4.

Теорема 2. Если (n, m)-граф G с максимальной s-метрикой связный, то он содержит доминирующую вершину.

Утверждение 1. (n, m)-граф G, имеющий максимальную s-метрику связен $\Leftrightarrow m > \frac{1}{2}(n-1)(n-2)$.

Теорема 3. Пусть (n, m)-граф G, имеющий максимальную s-метрику не связен. Тогда не более одной из его компонент связности будут состоять из более чем одной вершины.

Теорема 4. Пусть на (n, m)-графе G достигается максимально возможное значение s-метрики. Тогда на графе G', полученном из G удалением вершины максимальной степени и всех инцедентных ей рёбер, тоже достигается максимальное значение s-метрики.

Используя рассуждения выше, можем построить *общий вид графа с максимальной* s*-метрикой*. Если $m > \frac{1}{2}(n-1)(n-2)$, то по *утверждению 1* граф связен, и по *теореме 2,* содержит доминирующую вершину. Выберем произвольную вершину и соединим её со всеми остальными. Если же $m \leq \frac{1}{2}(n-1)(n-2)$, то по *теореме 3* граф содержит изолированную вершину. В обоих случаях отделяем эту вершину и работаем с оставшимся подграфом. На нём по *теореме 4* также достигается максимальное значение s-метрики. Далее повторяем рассуждения, пока возможно. Ясно, что такой процесс конечный.

Из построения следует, граф с максимальной s-метрикой строится однозначно.

Теперь опишем *построение графа с максимальной* s*-метрикой*. Будем добавлять рёбра по одному, начиная с пустого графа. Рассмотрим произвольный шаг: по *теореме 3* граф имеет единственную компоненту связности размера большего единицы. Если она образует клику, то выбираем новую вершину и соединяем с ней. Если этот подграф ещё не полный, то в нём выбираем вершину, которая была добавлена на предыдущем шаге и соединяем с одной из вершин рассматриваемой компоненты.

Такой алгоритм однозначно строит требуемый граф.

Из построения справедлива следующая лемма:

Лемма 3. Граф с максимальной s-метрикой не содержит порождённого подграфа $K_{1,3}$.

Первым Загребским индексом [1] (далее m-метрикой) графа G будем называть величину

$$m(G) = \sum_{u \in V(G)} \deg_G^2 u = \sum_{\{u,v\} \in E(G)} (\deg_G u + \deg_G v)$$

Лемма 4. Среди всех деревьев на n вершинах, максимальную m-метрику имеет звезда, а минимальную - цепь. Т.е. для любого дерева T, неизоморфного цепи или звезде выполняется

$$m(P_n) < m(T) < m(K_{1,n-1})$$

Теорема 5. Для (n, m)-графа G с максимальной m-метрикой выполняется $N_G(u) \subseteq N_G(v) \cup \{v\}$ или $N_G(v) \subseteq N_G(u) \cup \{u\}$, для любых $u, v \in V(G)$.

Из *теоремы 5* следует справедливость аналога *леммы 2* для графа с максимальной m-метрикой:

Лемма 5. Любой (n, m)-граф G с максимальной s-метрикой не содержит порождённых подграфов $2K_2, P_4, C_4$.

Из *лемм 2* и *5*, получаем, что графы с максимальным значением s- и m-метрик относятся к *классу пороговых*.

Библиографические ссылки

1. Scale-Free Spanning Trees and Their Application in Genomic Epidemiology / Y. Orlovich, K. Kukharenko, V. Kaibel, P. Skums // Journal of Computational Biology. 2021. Vol. 28, No 10. P. 945–960.