ISSN 2949-5598

ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ

Том 32 № 4 2025

Новосибирск
Издательство Института математики

ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Октябрь–декабрь 2025. Т. 32, № 4. С. 138–145

УДК 519.178 DOI: 10.33048/daio.2025.32.836

ПОИСК ОСТОВНОГО ДЕРЕВА ГРАФА-КАКТУСА С МИНИМАЛЬНЫМ ИНДЕКСОМ ВИНЕРА

В. А. Клячин[a], *Е. В. Хижнякова*[b]

Волгоградский гос. университет,
Университетский пр., 100, 400062 Волгоград, Россия
E-mail: [a]klyachin.va@volsu.ru, [b]yakovleva.e.v@volsu.ru

Аннотация. Рассматривается задача построения остовного дерева в графе типа «кактус», минимизирующего значение индекса Винера — топологического индекса графа, который определяется суммой расстояний между всеми парами вершин. Граф-кактус представляет собой особый класс связных графов, в которых любые два простых цикла имеют не более одной общей вершины. Показывается, что в общем виде задача поиска остовного дерева с минимальным индексом Винера NP-полна, но для графов типа «кактус» данная задача решается за полиномиальное время. Приведён соответствующий алгоритм. Ил. 1, библиогр. 7.

Ключевые слова: индекс Винера, граф-кактус, остовное дерево.

Введение

Индекс Винера является важной характеристикой графов, определяемой как сумма длин кратчайших путей между всеми парами вершин. Существует немало работ, посвящённых исследованию и минимизации индекса Винера для различных классов графов. Например, работа [1] посвящена исследованию геометрических остовных деревьев, минимизирующих индекс Винера. В ней показано, что любое такое остовное дерево не имеет пересекающихся рёбер, и предложен алгоритм построения остовного дерева с минимальным индексом Винера для вершин, расположенных в выпуклой позиции. В [2] описываются графы, которые имеют экстремальный индекс Винера среди всех графов на n вершинах с k висячими вершинами.

В данной работе рассматривается задача поиска остовного дерева графа-кактуса с минимальным индексом Винера. Данная задача находит применение в различных сферах: например некоторые транспортные сети построены в виде графов-кактусов. Такие сети встречаются преимущественно в исторических центрах малых и средних городов.

Основная цель минимизации индекса Винера связана с поиском эффективного способа связи всех вершин графа такими путями, чтобы обеспечить наилучшую связь и минимум затрат на обслуживание сети. Этот показатель важен в различных приложениях, включая проектирование транспортных систем, электросетей, телекоммуникационных линий и логистику. Чем меньше индекс Винера, тем короче средние пути транспортировки товаров, пассажиров или услуг между различными пунктами назначения. Следовательно, снижаются расходы на топливо, рабочую силу и износ оборудования.

В органической химии графы-кактусы применяются для моделирования структуры полициклических соединений, таких как ароматические углеводороды (бензол, нафталин и др.) [3]. Индекс Винера коррелирует с температурой плавления, кипением, плотностью вещества и другими важными характеристиками. Чем больше значение индекса Винера, тем сложнее строение молекулы и, следовательно, сильнее проявляются физические эффекты [4–6].

Минимизация индекса Винера при выборе подходящего остовного дерева обеспечивает точное прогнозирование этих характеристик.

1. Постановка задачи

Граф-кактус — это связный неориентированный граф, в котором любые два простых цикла имеют не более одной общей вершины. Пусть $G(V, E)$ — кактус, где V и E — множества вершин и рёбер в G. Обозначим через $\delta_G(u, v)$ расстояние между вершинами u и v в G.

Индексом Винера $W(G)$ называется инвариант, определяемый как сумма кратчайших путей между всеми парами вершин графа:

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \in V(G)} \delta_G(u, v).$$

Для деревьев формула может выглядеть так:

$$W(T) = \sum_{e=(a,b) \in E(T)} |e| \cdot n(a) \cdot n(b), \tag{1}$$

где $n(a)$ — число вершин, которые в графе ближе к a, чем к b, $n(b)$ — число вершин, которые ближе к b, чем к a [4].

Задача 1. *Дан граф. Найти его остовное дерево с минимальным индексом Винера.*

Отметим, что задача 1 NP-полна. В [7] показано, что эта задача является NP-полной даже в случае, когда веса всех рёбер равны между собой.

Однако граф-кактус представляет собой особый граф, обладающий следующей характеристикой: любая вершина входит не более чем в один простой цикл. Другими словами, в таком графе нельзя построить два цикла, пересекающихся по общему ребру. Простейшие примеры графов-кактусов включают линейные цепочки, кольца, звёзды и некоторые комбинации этих структур.

Благодаря данному свойству задача 1 может быть решена за полиномиальное время для графов-кактусов.

Задача 2. *Дан граф-кактус. Найти его остовное дерево с минимальным индексом Винера.*

2. Индекс Винера остовных деревьев графа-кактуса

Для получения остовного дерева графа-кактуса необходимо разорвать каждый из его циклов, при этом из цикла удаляется ровно одно ребро.

Число остовных деревьев для кактусов вычисляется по формуле

$$\tau(G) = m_1 m_2 \cdots m_l,$$

где m_i — число рёбер в i-м цикле, l — число циклов.

Рассмотрим удаление ребра в одном из циклов с целью минимизации $W(G)$. Предположим, что из цикла $C = \{p_0, p_1, \ldots, p_{n-1}\}$ удаляется ребро (p_k, p_{k+1}). К любой из вершин p_i цикла может присоединяться подграф T_i (рис. 1).

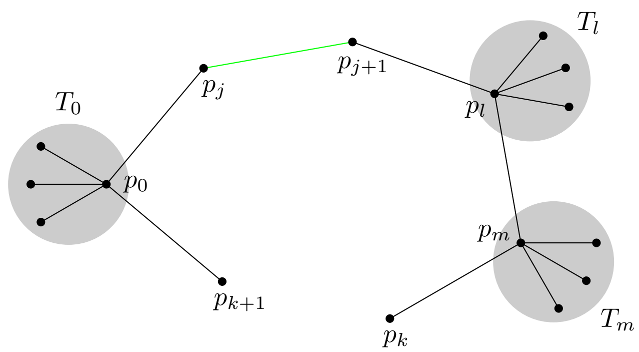

Рис. 1. Удаление ребра в одном из циклов графа-кактуса

Обозначим через $\delta_{p_i}(T_i)$ сумму длин путей от вершины p_i до каждой вершины из подграфа T_i:

$$\delta_{p_i}(T_i) = \sum_{q \in T_i} \delta_{T_i}(p_i, q).$$

Тогда индекс Винера графа G можно вычислить по формуле

$$W = \sum_{i=1}^{n-1} W(T_i) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1} \delta_{p_i}(T_i) \cdot (|V| - n(T_i)) + \\ + \sum_{i \in \overline{0,n-1} \setminus \{k\}} |u_i u_{i+1}| \cdot n(u_i) \cdot n(u_{i+1}). \quad (2)$$

Получается, что в формуле (2) только третье слагаемое зависит от выбора ребра, подлежащего удалению в текущем цикле, значит, именно его нужно сделать минимальным, чтобы минимизировать индекс Винера.

Следовательно, минимальный индекс Винера, который можно получить при разрыве одного из циклов графа-кактуса, может быть вычислен по формуле

$$W(G) = \sum_{i=1}^{n-1} W(T_i) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1} \delta_{p_i}(T_i) \cdot (|V| - n(T_i)) + \\ + \min_{k \in [0,n-1]} \sum_{i \in \overline{0,n-1} \setminus \{k\}} |u_i u_{i+1}| \cdot n(u_i) \cdot n(u_{i+1}). \quad (3)$$

Так как для решения задачи 2 необходимо удалить ровно одно ребро в каждом из циклов, с учётом формулы (1) получаем, что минимальный индекс Винера среди всех остовных деревьев графа-кактуса может быть вычислен по формуле

$$W(G) = \sum_{i=0}^{i<l} \min_{k \in C_i} \sum_{e=(a,b) \in C_i \setminus \{k\}} |e| \cdot n(a) \cdot n(b) + \sum_{e=(a,b) \notin C} |e| \cdot n(a) \cdot n(b), \quad (4)$$

где C — циклы в исходном графе-кактусе, l — число циклов, C_i — рёбра, принадлежащие i-му циклу, k — ребро, подлежащее удалению.

3. Алгоритм поиска остовного дерева с минимальным индексом Винера для графа-кактуса

Дан граф-кактус $G = (V, E)$.

Шаг 1. Найти все простые циклы в графе G. К списку C отнести рёбра, принадлежащие какому-либо циклу. Сгруппировать рёбра по циклам.

Шаг 2. Вычислить сумму для рёбер, не принадлежащих ни одному циклу:

$$W_1 = \sum_{(a,b) \notin \mathrm{C}} |ab| \cdot n(a) \cdot n(b).$$

Шаг 3. Для каждого цикла C_i из C найти ребро, подлежащее удалению. Для этого для каждого ребра k цикла C_i

Шаг 3.1. Вычислить

$$W_{2_k} = \sum_{e=(a,b)\in C_i \setminus k} |e| \cdot n(a) \cdot n(b).$$

Шаг 3.2. Взять минимальную из сумм, полученных на шаге 3.1. Соответствующее ребро удалить.

Шаг 3.3. Вычислить

$$W_2 = \sum_{i=0}^{i<l} \min_{k\in C_i} W_{2_k}.$$

Шаг 4. Минимальный индекс Винера положить равным

$$W = W_1 + W_2.$$

Все лишние рёбра удалены на шаге 3.2. Конец алгоритма.

Таким образом, удаляя по одному ребру из каждого цикла и минимизируя индекс Винера по формуле (4), решаем задачу 2.

Проведём оценку сложности алгоритма. Поиск всех простых циклов в графе-кактусе можно осуществить посредством поиска в глубину, сложность которого равна $O(V+E)$. Подсчёт числа вершин в двух компонентах связности после удаления ребра (a,b), т. е. величины $n(a)$ и $n(b)$, также можно найти алгоритмами поиска в ширину или в глубину. Таким образом, сложность алгоритма равна $O(4EV+4E^2)$. Учитывая, что в алгоритме рассматривается только граф-кактус, в котором число рёбер ограничено числом вершин, $E \leqslant \left\lfloor \frac{3}{2}(V-1) \right\rfloor$, оценка принимает более простой вид: $O(V^2)$.

Заключение

В работе рассмотрена задача поиска остовного дерева графа-кактуса с минимальным значением индекса Винера. Для её решения разработан специальный алгоритм, учитывающий структурные особенности рассматриваемого класса графов. Этот алгоритм обладает полиномиальной сложностью относительно размера входного графа, что делает его применимым для обработки больших наборов данных.

Предложенная методика имеет практическое применение в различных областях науки и техники, таких как химия (оценка физико-химических характеристик соединений), биология (анализ белковых сетей), транспортная логистика и телекоммуникационные сети.

Таким образом, полученные результаты вносят значительный вклад в развитие теории оптимизации графовых структур и позволяют эффективно решать прикладные задачи на графах специального вида.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счёт бюджета Волгоградского гос. университета. Дополнительных грантов на проведение или руководство этим исследованием получено не было.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Литература

1. **Abu-Affash A. K., Carmi P., Luwisch O., Mitchell J. S. B.** Geometric spanning trees minimizing the Wiener index // Algorithms and data structures. Proc. 18th Int. Symp. (Montreal, QC, Canada, July 31 – Aug. 2, 2023). Cham: Springer, 2023. P. 1–14. (Lect. Notes Comput. Sci.; V. 14079).
2. **Pandey D., Patra K. L.** Wiener index of graphs with fixed number of pendant or cut-vertices // Czechoslov. Math. J. 2022. V. 72, No. 2. P. 411–431.
3. **Klein D. J., Randić M.** Resistance distance // J. Math. Chem. 1993. V. 12. P. 81–95.
4. **Wiener H.** Structural determination of paraffin boiling points // J. Am. Chem. Soc. 1947. V. 69, No. 1. P. 17–20.
5. **Gutman I., Trinajstic N.** Graph theory and molecular orbitals. Total φ-electron energy of alternant hydrocarbons // Chem. Phys. Lett. 1972. V. 17, No. 4. P. 535–538.
6. **Bonchev D., Rouvray D. H.** Complexity in chemistry, biology, and ecology. New York: Springer, 2005. 348 p.
7. **Johnson D. S., Lenstra J. K., Rinnooy Kan A. H. G.** The complexity of the network design problem // Networks. 1978. V. 8, No. 4. P. 279–285.

Клячин Владимир Александрович
Хижнякова Екатерина Владимировна

Статья поступила
28 мая 2025 г.
После доработки —
11 июня 2025 г.
Принята к публикации
22 сентября 2025 г.

DISKRETNYI ANALIZ I ISSLEDOVANIE OPERATSII
/DISCRETE ANALYSIS AND OPERATIONS RESEARCH/
October–December 2025. Vol. 32, No. 4. P. 138–145

UDC 519.178 DOI: 10.33048/daio.2025.32.836

SEARCH FOR A SPANNING TREE IN A CACTUS GRAPH WITH THE MINIMUM WIENER INDEX

V. A. Klyachin[a] and *E. V. Khizhnyakova*[b]

Volgograd State University,
100 Universitetskiy Avenue, 400062, Volgograd, Russia
E-mail: [a]`klyachin.va@volsu.ru`, [b]`yakovleva.e.v@volsu.ru`

Abstract. We consider the problem of constructing a spanning tree in a cactus graph that minimizes the value of the Wiener index, which is a topological graph index determined by the sum of distances between all pairs of vertices. The cactus graph is a special class of connected graphs in which any two simple cycles have at most one vertex in common. It is shown that the problem of finding a spanning tree with the minimum Wiener index is NP-complete, while for cactus-type graphs this problem can be solved in polynomial time. The corresponding algorithm is provided. Illustr. 1, bibliogr. 7.

Keywords: Wiener index, cactus graph, spanning tree.

References

1. **A. K. Abu-Affash, P. Carmi, O. Luwisch,** and **J. S. B. Mitchell,** Geometric spanning trees minimizing the Wiener index, in *Algorithms and Data Structures*, Proc. 18th Int. Symp. (Montreal, QC, Canada, July 31 – Aug. 2, 2023) (Springer, Cham, 2023), pp. 1–14 (Lect. Notes Comput. Sci., V. 14079).
2. **D. Pandey** and **K. L. Patra,** Wiener index of graphs with fixed number of pendant or cut-vertices, *Czechoslov. Math. J.* **72** (2), 411–431 (2022).
3. **D. J. Klein** and **M. Randić,** Resistance distance, *J. Math. Chem.* **12**, 81–95 (1993).
4. **H. Wiener,** Structural determination of paraffin boiling points, *J. Am. Chem. Soc.* **69** (1), 17–20 (1947).
5. **I. Gutman** and **N. Trinajstic,** Graph theory and molecular orbitals. Total φ-electron energy of alternant hydrocarbons, *Chem. Phys. Lett.* **17** (4), 535–538 (1972).
6. **D. Bonchev** and **D. H. Rouvray,** *Complexity in Chemistry, Biology, and Ecology* (Springer, New York, 2005).

English transl.: *Journal of Applied and Industrial Mathematics* **19** (4) (2025).

7. **D. S. Johnson, J. K. Lenstra, A. H. G. Rinnooy Kan,** The complexity of the network design problem, *Networks* **8** (4), 279–285 (1978).

Vladimir A. Klyachin
Ekaterina V. Khizhnyakova

Received May 28, 2025
Revised June 11, 2025
Accepted September 22, 2025