

## СВОЙСТВА ЦЕПЕЙ ГРАФОВ И ИЗОТОПИЧНОСТЬ

А.А.Добрынин, В.А.Скоробогатов

## В в е д е н и е

В работах [1,2] был предложен подход к исследованию метрических свойств графов, основанный на понятиях относительного разбиения и матрицы слоев графа. Непосредственным обобщением метрических характеристик графа [2] являются цепные характеристики, описывающие свойства цепей графа. Цепные характеристики позволяют получить более полную информацию, по сравнению с метрическими, о структуре графа, но вычисление их более трудоемко. Цепные характеристики находят применение в различных прикладных областях. Они используются в органической химии для задач определения структурного подобия молекул [3], поиска подфрагментов [4], характеристики молекулярной разветвленности [5] и т.п. Представляет интерес изучение возможности использования цепных характеристик для задачи прогнозирования активности химических соединений, различных физических и термодинамических параметров соединений [6]. В этом случае задача прогнозирования сводится к задаче распознавания образов [7], в которой значения цепных характеристик можно рассматривать в качестве признаков наличия (отсутствия) свойств объектов. Другое применение - теоретико-графовые исследования. Для различных классов графов составляются каталоги значений цепных характеристик, используемые для проверки гипотез, поиска контрпримеров, описания классов графов.

## 1. Цепные характеристики графов

Пусть  $G(V, X)$  - конечный связный неграф без петель и кратных ребер,  $V(G)$  - множество вершин,  $X(G)$  - множество ребер,  $|V(G)| = p$ ,  $|X(G)| = q$ . Простой цепью в графе  $G$ , соединяющей вер-

шины  $v_1, v_k \in V(G)$ , будем называть последовательность попарно различных вершин  $(v_1, v_2, \dots, v_k)$  такую, что  $(v_i, v_{i+1}) \in X(G), i=1, k-1$ . Длина простой цепи равна числу ребер  $(v_i, v_{i+1}), i=1, k-1$ . В дальнейшем изложении под цепью будем всегда понимать простую цепь. Другие определения и обозначения в основном соответствуют [8]. Класс характеристик графа, основанных на рассмотрении множества цепей графа, будем называть цепными характеристиками графа. Цепные характеристики графа подразделяются на два класса: характеристики протяженности и  $\tau$ -дистанционные характеристики. Иногда цепные характеристики будем называть  $\tau$ -характеристиками из-за их связи с  $\tau$ -матрицей графа, которая будет определена ниже.

1. Характеристики протяженности. Данный класс характеристик основан на понятии протяженности между двумя вершинами графа [9]. Протяженностью  $st(u, v)$  между вершинами  $u, v \in V(G)$  называется длина самой длинной связывающей их цепи. В табл. I приводятся характеристики протяженности, позволяющие выделить некоторые особые множества или конструкции графа. Цепным эксцентриситетом вершины  $v \in V(G)$  назовем величину  $e_\tau(v) = \max_{u \in V(G)} st(u, v)$ . Центр протяженности графа [9] есть множество вершин  $\{v\}$ , у которых значение  $e_\tau(v)$  минимально. Периферия протяженности графа - множество вершин таких, где  $e_\tau(v)$  принимает максимальное значение. Для деревьев характеристики протяженности совпадают с эксцентриситетными. Расстояние, введенное на основе протяженности, удовлетворяет аксиомам метрики. Значение  $st(u, v)$  для любых  $u, v \in V(G)$  удовлетворяет условию  $d(u, v) \leq st(u, v) \leq p-1$ , где  $d(u, v)$  - расстояние между  $u$  и  $v$ ,  $p$  - порядок графа  $G$ , следовательно, выполняется и  $e(v) \leq e_\tau(v) \leq p-1$ ,  $r(G) \leq r_\tau(G) \leq p-1$ ,  $d(G) \leq d_\tau(G) \leq p-1$ . Нижняя оценка для  $e_\tau(v)$ ,  $r_\tau(G)$ ,  $d_\tau(G)$  достигается на деревьях, а верхняя - на графах, обладающих гамильтоновыми цепями.

В работах [10-14] приводятся условия, позволяющие оценивать диаметр протяженности графа. Пусть  $G$  - двусвязный граф порядка  $p$  и  $3 \leq c \leq p$ ; тогда  $d_\tau(G) \geq c-1$ , если

- 1) для каждой  $v \in V(G)$   $deg(v) \geq c/2$  [11],
- 2) для несмежных  $u, v \in V(G)$   $deg(u) + deg(v) \geq c$  [13],
- 3)  $|\{v: deg(v) \leq j\}| \leq j-1$  для  $1 \leq j \leq (c-1)/2$ , [14],
- 4)  $d_j \leq j, d_k \leq k (j \neq k) \rightarrow d_j + d_k \geq c$ , где  $d_i$  -  $i$ -й член степенной последовательности графа  $d_1 \leq d_2 \leq \dots \leq d_p$  [12],

Т а б л и ц а 1

№	Обозначение	Наименование	Выражение для вычисления
1	$e_{\tau}(v)$	Цепной эксцентриситет вершины (число протяженности вершины [9])	$e_{\tau}(v) = \max_{u \in V} st(u, v)$
2	$r_{\tau}(G)$	Цепной радиус графа (радиус протяженности графа [9])	$r_{\tau}(G) = \min_{v \in V} e_{\tau}(v)$
3	$d_{\tau}(G)$	Цепной диаметр графа (диаметр протяженности графа [9])	$d_{\tau}(G) = \max_{v \in V} e_{\tau}(v)$
4	$e_{\tau}(G)$	Цепной эксцентриситет графа	$e_{\tau}(G) = \sum_{v \in V} e_{\tau}(v)$
5	$e_{\tau \text{ ср}}(G)$	Средний цепной эксцентриситет вершин в графе	$e_{\tau \text{ ср}}(G) = \frac{1}{p} e_{\tau}(G)$
6	$\Delta e_{\tau}(v)$ $\bar{\Delta} e_{\tau}(v)$	Цепная эксцентricность вершины	$\Delta e_{\tau}(v) =  e_{\tau}(v) - e_{\tau \text{ ср}} $ $\bar{\Delta} e_{\tau}(v) = e_{\tau}(v) - e_{\tau \text{ ср}}$
7	$\Delta_{\tau} G$	Цепная эксцентricность графа	$\Delta_{\tau} G = \frac{1}{p} \sum_{v \in V} \Delta e_{\tau}(v)$

б) для любых  $u, v \in V(G)$ ,  $d(u, v) = 2 \Rightarrow \max(\deg(u), \deg(v)) \geq c/2$  [10],

в)  $u, v \in S$ , где  $S = \{v: \deg(v) < c/2\} \Rightarrow d(u, v) \neq 2$  [10].

2.  $\tau$  - дистанционные характеристики. Этот класс характеристик основан на понятии цепного расстояния в графе.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Цепным расстоянием между вершинами  $u, v \in V(G)$  называется величина  $r(u, v)$ , равная сумме длин всевозможных цепей, соединяющих вершины  $u$  и  $v$ .

В табл. 2 приведены некоторые цепные характеристики графа. Другие цепные характеристики определяются аналогично дистанционным, таким как минимальная дистанция (униполярность), вариация графа, дистанционное отклонение графа (централизация), среднее от-

Т а б л и ц а 2

№	Обозначение	Наименование	Выражение для вычисления
1	$D_{\tau}(v)$	Цепная дистанция вершины	$D_{\tau}(v) = \begin{cases} \sum_{u \in V} p(u, v) - \text{граф } G \text{ связный} \\ \infty - G \text{ несвязный} \end{cases}$
2	$D_{\tau}(G)$	Цепная дистанция графа	$D_{\tau}(G) = \begin{cases} \frac{1}{2} \cdot \sum_{v \in V} D_{\tau}(v) - G \text{ связный} \\ \infty - G \text{ несвязный} \end{cases}$
3	$D_{\tau \text{ ср}}(G)$	Средняя цепная дистанция вершины	$D_{\tau \text{ ср}}(G) = \frac{2D_{\tau}(G)}{p}$
4	$\Delta_{\tau}D(v)$ $\bar{\Delta}_{\tau}D(v)$	Цепное дистанционное отклонение вершины от среднего	$\Delta_{\tau}D(v) =  D_{\tau}(v) - D_{\tau \text{ ср}} $ $\bar{\Delta}_{\tau}D(v) = D_{\tau}(v) - D_{\tau \text{ ср}}$
5	$\Delta_{\tau}D(G)$	Среднее цепное дистанционное отклонение графа	$\Delta_{\tau}D(G) = \frac{1}{p} \cdot \sum_{v \in V} \Delta_{\tau}D(v)$
6	$\mu_{\tau}(G)$	Цепная компактность графа	$\mu_{\tau}(G) = \frac{1}{\binom{p}{2}} \cdot \sum_{u, v \in V} p(u, v) =$ $= \frac{4}{p(p-1)} \cdot D_{\tau}(G)$

клонение вершины графа, среднее квадратичное отклонение вершины графа, дисперсия графа, обратная дистанция вершины, обратная дистанция графа, обратная наименьшая дистанция, обратная централизация [2].

Использование характеристик, основанных на цепном расстоянии, позволяет получать более полную информацию о структуре графа по сравнению с дистанционными метрическими характеристиками.

## 2. Цепная матрица слоев графа

По аналогии с  $\lambda$ -матрицей графа  $G$  [1] определим цепную матрицу слоев  $\tau(G)$ , или  $\tau$ -матрицу графа  $G$ . Цепной матрицей слоев графа  $G$  называется матрица  $\tau(G) = \|\tau_{i,j}\|$ ,  $i = \overline{1, p}$ ,  $j = \overline{1, d_{\tau}(G)}$ ,

где  $\tau_{ij}$  равно числу различных цепей длины  $j$ , соединяющих вершину  $i$  с остальными вершинами  $G$ ,  $d_r(G)$  – диаметр протяженности  $G$ . Если цепей длины  $j$ , исходящих из вершины  $i$ , не существует, полагаем  $\tau_{ij} = 0$ . Число ненулевых элементов в строке матрицы  $\tau(G)$  назовем длиной строки. Будем считать, что строки в  $\tau(G)$  упорядочены по уменьшению длины, а строки одинаковой длины упорядочены лексикографически. На рис. I изображен граф и его матрицы  $\lambda(G)$  и  $\tau(G)$ .

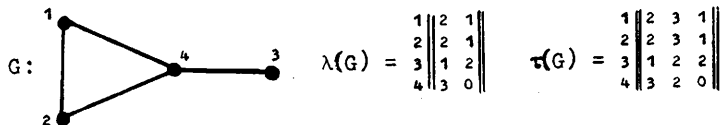


Рис. I

Для обозначения цепной матрицы слоев используем линейное представление  $\tau(G) = \|1, 2(2, 3, 1); 3(1, 2, 2); 4(3, 2)\|$  или, если номера вершин не важны,  $\tau(G) = \|2 \cdot (3, 2, 1), (1, 2, 2), (3, 2)\|$ . Для деревьев выполняется  $\tau(G) = \lambda(G)$ , так как две любые вершины дерева соединены единственной цепью, длина которой есть дистанционное расстояние между ними. Для некоторых графов цепную матрицу слоев можно представить в явном виде. Например, для  $K_p$ -полного графа порядка  $p$  цепная матрица слоев имеет вид

$$\tau(K_p) = \|p \cdot (p-1, (p-1)(p-2), (p-1)(p-2)(p-3), \dots, (p-1)!) \|,$$

для цикла порядка  $p$  –  $\tau(C_p) = \|p \cdot (2, 2, \dots, 2) \|$ , для полного двудольного графа  $K_{m,n}$  –  $\tau(K_{m,n}) = \|m \cdot (a_1^{p-1}, a_2, \dots, a_k); n \cdot (b_1, b_2, \dots, b_l) \|$ , где

$$b_r = \begin{cases} \frac{m!}{\left(m - \frac{r+1}{2}\right)!} \cdot \frac{(n-1)!}{\left(n - \frac{r+1}{2}\right)!} & \text{при } r \text{ нечетном,} \\ \frac{m!}{\left(m - \frac{r}{2}\right)!} \cdot \frac{(n-1)!}{\left(n - \frac{r+2}{2}\right)!} & \text{при } r \text{ четном.} \end{cases}$$

Значения  $a_r$  получаются из выражения для  $b_r$  взаимной заменой величин  $m$  и  $n$ . Если  $m < n$ , то  $k=2m-1$ ,  $l=2m$ , а при  $n < m$   $k=2n$ ,  $l=2n-1$ .

### 3. Цепная матрица слоев и идентификация графов

Так как цепная матрица слоев содержит в себе достаточно много информации о структуре графа, представляет интерес использование ее в задаче идентификации графов, изучение единственности представления графов такими матрицами. В работе [1] был построен пример неизоморфных деревьев с одинаковыми матрицами цепей, приведенных на рис.2. В [18] построены деревья, изображенные на рис.3,

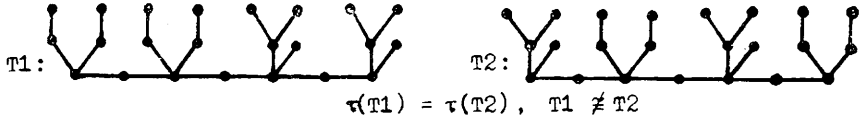


Рис.2

с этим свойством, имеющие наименьший известный сейчас порядок. Покажем, как, используя такие деревья, можно строить неизоморфные

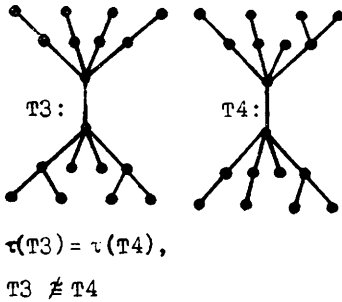


Рис. 3

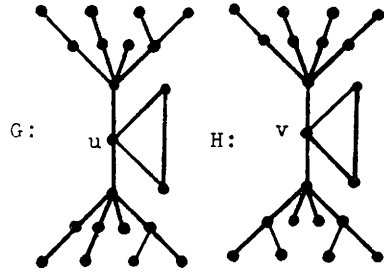


Рис. 4

графы, имеющие одинаковую цепную матрицу слоев. На рис.4 показаны графы порядка  $2l$ , имеющие совпадающую цепную матрицу слоев и получающиеся из деревьев на рис.3 путем введения новых вершин  $u$  и  $v$  и цикла длины три. Аналогично можно получить подобные пары графов путем замены цикла произвольным графом.

### 4. Цепные характеристики и цепная матрица слоев

Покажем, что цепные характеристики графа  $G$  можно вычислять по матрице  $\tau(G)$  графа  $G$ . Функцию, вычисляемую по этой матрице, будем называть  $\tau$ -вычисляемой. Непосредственно из свойства  $\tau(G)$  сле-

дует, что длина строки в ней равна числу протяженности соответствующей вершины. Длина первой строки равна диаметру протяженности графа  $d_{\tau}(G)$ , длина последней - радиусу протяженности графа  $r_{\tau}(G)$ . Таким образом, все характеристики протяженности графа являются  $\tau$ -вычислимыми. Так как цепные характеристики вычисляются через  $\tau$ -дистанцию вершин, то их  $\tau$ -вычислимость будет следовать из  $\tau$ -вычислимости  $D_{\tau}(v)$ ,  $v \in V(G)$ . Легко заметить, что для вершины  $i$  значение  $D_{\tau}(i)$  можно представить в виде

$$D_{\tau}(i) = \frac{e_{\tau}(i)}{\sum_{j=1} \tau_{ij} j}, \quad (1)$$

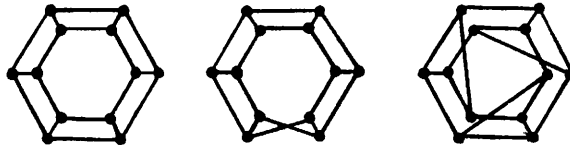
где  $\tau_{ij}$  - элемент матрицы  $\tau(G)$ , равный числу различных цепей длины  $j$ , исходящих из вершины  $i$ ,  $e_{\tau}(i)$  - число протяженности вершины  $i$ . Эту формулу можно использовать для вычисления цепных характеристик по матрице  $\tau(G)$ . Зная аналитический вид  $\tau$ -матриц графов, формулу (1) можно применять для получения явных выражений для цепных характеристик. Так как  $\tau(C_p) = \|p \cdot (2, 2, \dots, 2)\|$  и  $\tau(K_p) = \|p(p-1), (p-1)(p-2), (p-1)(p-2)(p-3), \dots, (p-1)!\|$ , то

$$D_{\tau}(C_p) = \frac{1}{2} p \frac{\sum_{j=1}^{p-1} 2 \cdot j}{2} = \frac{p^2(p-1)}{2},$$

$$D_{\tau}(K_p) = \frac{1}{2} p [(p-1) + 2(p-2)(p-1) + 3(p-3)(p-2)(p-1) + \dots + (p-1)(p-1)!] =$$

$$= \frac{p(p-1)!}{2} \sum_{r=1}^{p-1} \frac{r}{(p-r-1)!}.$$

Однако для произвольных графов цепные характеристики вычисляются только с помощью ЭЕМ. В качестве примера на рис. 5 изображены транзитивные графы с номерами по каталогу [15], для которых



G: Призма, 71

H: Лестница  
Мёбиуса, 72

F: Граф 83

Рис. 5

представлены некоторые цепные характеристики, вычисленные с использованием ЭВМ. Для этих графов

$$\tau(G) = \|I2 \cdot (3, 6, 12, 20, 36, 56, 94, 104, 120, 72, 38)\|;$$

$$\tau(H) = \|I2 \cdot (3, 6, 12, 20, 36, 58, 86, 118, 108, 78, 38)\|;$$

$$\tau(F) = \|I2 \cdot (3, 6, 12, 22, 42, 60, 92, 108, 136, 80, 48)\|.$$

Пусть  $v \in V(G)$ ,  $u \in V(H)$ ,  $w \in V(F)$ , тогда  $D_{\tau}(v) = 4355$ ,  $D_{\tau}(u) = 4375$ ,  $D_{\tau}(w) = 4869$  и  $D_{\tau}(G) = 26130$ ,  $D_{\tau}(H) = 26250$ ,  $D_{\tau}(F) = 29214$ .

### 5. Функция сложности

В [16] для характеристики сложности структуры произвольного графа  $G$  была введена функция его сложности

$$\xi(G) = \frac{pq}{p+q} \sum_{\substack{i,j \\ i < j}} \gamma(i,j),$$

где  $p, q$  - число вершин и ребер  $G$ ,  $\gamma(i, j)$  - число различных простых путей из вершины  $i$  в вершину  $j$ . Указывается, что  $\xi(G)$  соответствует интуитивному понятию сложности графа. В [2] показано, что функция  $\xi(G)$  не является  $\lambda$ -вычислимой. Покажем, что  $\xi(G)$   $\tau$ -вычислима. Действительно, через компоненты матрицы  $\tau(G)$  функция  $\xi(G)$  выражается следующим образом:

$$\xi(G) = \frac{p \cdot q}{2(p+q)} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p e_{\tau}(i) \tau_{ij}(G),$$

где  $\tau_{ij}(G)$  - компонента  $\tau(G)$ ,  $e_{\tau}(i)$  - число протяженности вершины  $i$ . По этой формуле можно получить ряд известных значений  $\xi$  для  $p$ -вершинных графов: полного графа  $K_p$ , дерева  $T_p$  и простого цикла  $C_p$ . Имеем

$$\xi(K_p) = \frac{p(p-1)}{2(p+1)} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{p-1} \tau_{ij}(K_p) = \frac{p(p-1)}{2(p+1)} [p((p-1)+(p-1)(p-2)+\dots$$

$$\dots + (p-1)!] = \frac{p^2(p-1)}{2(p+1)} \sum_{r=0}^{p-2} \frac{(p-1)!}{(p-r-2)!} = \frac{p^2(p-1)(p-1)!}{2(p+1)} \sum_{r=0}^{p-2} \frac{1}{(p-r-2)!},$$

$$\xi(T_p) = \frac{p(p-1)}{(2p-1)2} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p e_{\tau}(i) \tau_{ij}(T_p) = \frac{p(p-1)}{(2p-1)} \sum_{i=1}^p (p-1) = \frac{p^2(p-1)^2}{2(2p-1)},$$



$$\xi(G_p) = \frac{p^2}{2p} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{p-1} \tau_{i,j}(C_p) = \frac{p}{4} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{p-1} 2 = \frac{p^2(p-1)}{2}$$

Полученные значения  $\xi(K_p)$ ,  $\xi(T_p)$ ,  $\xi(C_p)$  совпадают со значениями  $\xi$  для этих графов, приведенными в [16]. Зная явный вид  $\xi(G)$ , можно видеть, как связаны значения  $\xi(G)$  с цепными и метрическими характеристиками. Например, для простого цикла  $C_p$   $\xi(C_p) = D_{\tau}(C_p)$  и

$$\xi(G) = \begin{cases} D(C_p) \cdot \frac{4(p-1)}{p}, & p \text{ четное,} \\ D(C_p) \cdot \frac{4p}{p+1}, & p \text{ нечетное.} \end{cases}$$

Заметим, что если  $\tau(G) = \tau(H)$ , то  $\xi(G) = \xi(H)$ , но обратное неверно. На рис.6 приведены графы  $G$  и  $H$ , для которых  $\xi(G) = \xi(H)$ , но

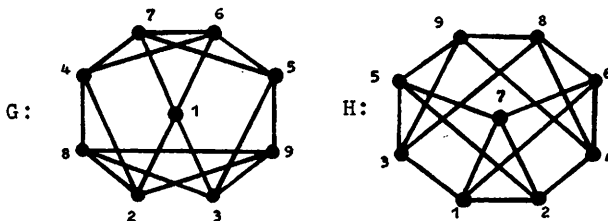


Рис. 6

$\tau(G) \neq \tau(H)$ . Для этих графов  $\xi(G) = \xi(H) = 26676$ , а матрицы  $\tau(G)$  и  $\tau(H)$  различаются уже первыми строками:  $\tau_1(G) = (4, 12, 34, 70, 142, 254, 300, 156)$ ,  $\tau_1(H) = (4, 12, 32, 74, 152, 258, 294, 164)$ .

## 6. Изотопичность графов

В [17] рассматривались отношения эквивалентности на графах, определяемые существованием отображения одного графа на другой, сохраняющего расстояние, введенное на множестве вершин графа. Ниже будет описан критерий изотопичности, позволяющий устанавливать эквивалентность графов, сохраняющую свойства цепей.

Пусть  $G$  - граф порядка  $p$  и  $u, v \in V(G)$ . Цепным распределением между вершинами  $u$  и  $v$  назовем набор  $\alpha(u, v) = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{p-1})$ , где  $\alpha_i$  есть число цепей длины  $i$ , соединяющих вершины  $u$  и  $v$ . При отсутствии цепей длины  $i$  полагаем  $\alpha_i = 0$ . Цепное расстояние между

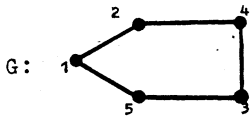
вершинами  $u$  и  $v$ , введенное в §1 как сумма длин цепей, соединяющих  $u$  и  $v$ , можно представить как  $p(u,v) = \sum_{i=1}^{p-1} i \cdot \alpha_i$ .

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Граф  $H$  изотопичен из графа  $G$ ,  $G \approx H$ , если  $\forall v \in V(G)$  существует однозначное соответствие  $\varphi_v: V(G) \xrightarrow{\text{на}} V(H)$  такое, что  $\forall u \in V(G)$  выполняется  $\alpha_G(u,v) = \alpha_H(\varphi_v(u), \varphi_v(v))$ .

Графы  $G$  и  $H$  изотопичны,  $G \approx H$ , если  $G \approx H$  и  $H \approx G$ . отображение  $\varphi_v$  будем называть изотопией  $G$  на  $H$ . В силу определения цепное расстояние при изотопии будет сохраняться. Сопоставим вершине  $v_i \in V(G)$  квадратную матрицу  $R(v_i)$  порядка  $p-1$

$$R(v_i) = \begin{pmatrix} \alpha(v_i, v_1) \\ \dots \dots \dots \\ \alpha(v_i, v_{i-1}) \\ \alpha(v_i, v_{i+1}) \\ \dots \dots \dots \\ \alpha(v_i, v_p) \end{pmatrix}.$$

Длиной строки в  $R(v)$  будет называться номер координаты последней ненулевой компоненты строки. Будем считать, что  $R(v)$  упорядочена сначала по



$$R(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

длине строк, а строки одинаковой длины затем упорядочены лексикографически.

Рис. 7

На рис.7 изображены граф  $G$  и его матри-

ца  $R(1)$ . Под  $s$ -спектром графа  $G$  будем понимать упорядоченный набор попарно различных матриц из набора  $\{R(v)\}$ ,  $v \in V(G)$ . Если для любой матрицы из  $s(G)$  существует равная ей матрица в  $s(H)$ , то будем говорить, что  $s$ -спектры графов  $G$  и  $H$  равны, и обозначать как  $s(G) = s(H)$  (обратное условие также выполняется).

Следующий результат дает возможность определять изотопию графов, используя понятие  $s$ -спектра.

**ТЕОРЕМА (критерий изотопичности).**

$$G \approx H \Leftrightarrow s(G) = s(H).$$

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Пусть  $s(G) = s(H)$ . Выберем произвольную  $v \in V(G)$  и построим  $\varphi_v$ . Возьмем  $w \in V(H)$  такую, что  $R(v) = R(w)$ , и по-

ложим  $\varphi_v(v) = w$ . Далее, для любой  $u \in V(G) \setminus \{v\}$  полагаем  $\varphi_v(u) = z$ , где  $\alpha_G(v, u) = \alpha_H(w, z)$ . Такая вершина  $z$  существует в силу равенства  $s$ -спектров, т.е.  $G \approx H$ . Аналогично устанавливается и  $H \approx G$ .

Предположим, что  $s(G) \neq s(H)$ . Покажем, что существует  $v \in V(G)$ , для которой нельзя построить изотопии  $G$  на  $H$ . Пусть  $v \in V(G)$  такая, что  $R(v)$  не равна ни одной матрице из  $s(H)$ . Пусть  $R(u) \in s(H)$ . Если в  $R(v)$  есть строка, которой нет в  $R(u)$ , то изотопию, очевидно, установить не удастся ввиду несоблюдения цепного распределения. Если же совпадающие строки в  $R(v)$  и  $R(u)$  имеют разные кратности, то в силу однозначности  $\varphi_v$  получаем, что цепное распределение также не сохраняется, т.е.  $G \not\approx H$ . Теорема доказана.

Для деревьев понятие изотопичности эквивалентно понятию изометричности [17].

СЛЕДСТВИЕ. Если  $T_1, T_2$  - деревья, то  $T_1 \approx T_2 \Leftrightarrow T_2 \approx T_1 \Leftrightarrow T_1 \approx T_2$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для доказательства достаточно воспользоваться критериями изометричности и изотопичности и заметить, что две любые вершины дерева соединены единственной цепью.

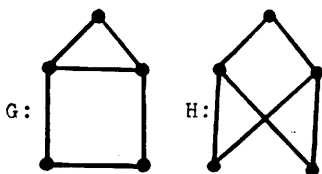


Рис. 8

Для произвольных графов это неверно. Например, графы на рис. 8 имеют совпадающие  $\lambda$ -матрицы всех порядков, но не являются изотопичными. Это следует из того, что в графе  $G$  из вершины степени три существует цепь длины 4, а для вершины такой же степени в графе  $H$  цепи такой длины не существует.

Примером изотопичных графов могут служить графы, изображенные на рис. 4.

Изотопия определяет множество подстановок вершин графов, при которых изотопичные вершины переходят друг в друга. Общее число таких подстановок дается формулой

$$I(G, H) = \sum_{i=1}^k m_i(G) m_i(H) \prod_{j=1}^{n_i} r_{ij}!$$

где  $k$  - мощность  $s$ -спектра графа  $G$ ,  $m_i(G)$  - кратность  $i$ -й матрицы  $s(G)$  в наборе  $\{R(v)\}$ ,  $v \in V(G)$ ,  $m_i(H)$  - кратность  $i$ -й матрицы в наборе  $\{R(v)\}$ ,  $v \in V(H)$ ,  $r_{ij}$  - мощность  $j$ -го блока, состоящего из

одинаковых строк в  $i$ -й матрице  $s(G)$ ,  $n_i$  - число таких блоков в  $i$ -й матрице  $s(G)$ .

### 7. Структурная изотопия

Изотопия графов отражает сохранение распределения количеств - венных характеристик и цепей в графе и не несет информации о структуре цепей. Для представления структуры цепей будем использовать понятие дерева цепей графа. Подобные деревья рассматривались, например, в [5]. Пусть  $v \in V(G)$ , тогда  $T(G, v)$  будет обозначать дерево цепей с корнем  $v$ , исходящих из вершины  $v$ . На рис.9 приве -

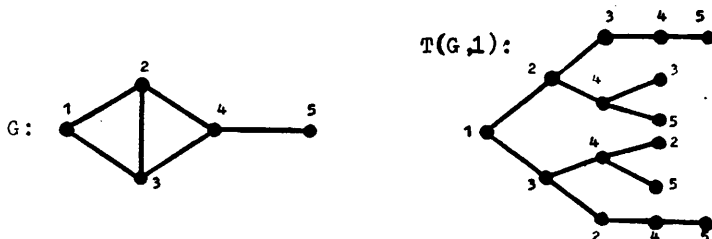


Рис. 9

дены граф  $G$  и его дерево цепей  $T(G, 1)$ . Определим эквивалентность графов, сохраняющую структуру цепей графа.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ.** Граф  $H$  структурно-изотопичен из графа  $G$ ,  $G \rightarrow H$ , если  $\forall v \in V(G), \exists u \in V(H)$  такая, что  $T(G, v)$  изоморфно  $T(H, u)$ .

Графы  $G$  и  $H$  структурно-изотопичны,  $G \leftrightarrow H$ , если  $G \rightarrow H$  и  $H \rightarrow G$ . Представляет интерес пример неизоморфных структурно-изотопичных графов.

### б. Вычисление цепных характеристик

Для вычисления цепных характеристик графов была написана программа на языке ПЛ/I. Данная программа дополняет программу МЕТСНАР [2] для вычисления метрических характеристик графов. Программа применялась для вычисления цепных характеристик некоторых классов графов. Была исследована однозначность представления графов цепными матрицами слоев и предпринят поиск изотопичных графов в семействах кубических графов порядка 10, 12, 14 [15]. Вычисления показали отсутствие среди указанных семейств изотопичных графов. Для ряда графов вычислялась также функция их сложности.

## Л и т е р а т у р а

1. СКОРОВОГАТОВ В.А. Относительные разбиения и слои графов. - В кн.: Вопросы обработки информации при проектировании систем (Вычислительные системы, вып. 89). Новосибирск, 1977, с.6-9.
2. СКОРОВОГАТОВ В.А., ХВОРОСТОВ П.В. Анализ метрических свойств графов. - В кн.: Методы обнаружения закономерностей с помощью ЭВМ (Вычислительные системы, вып. 91). Новосибирск, 1982, с.1-20.
3. RANDIC M., WILKINS C.L. Graph Theoretical Approach to recognition of Structural Similarity in Molecules. - J.Chem. Inf. Comput.Sci., 1979, v.19, N 1, p.31-36.
4. RANDIC M., WILKINS C.L. Graph-Based Fragment Searches in Polycyclic Structures. - J.Chem.Inf.Comput.Sci., 1979, v.19, N 1, p.23-31.
5. RANDIC M. Characterization of atoms, molecules, and classes of molecules based on path enumerations. - MATCH, 1979, v. 7, p.5-64.
6. СТЬЕПЕР Э., БРЮГЕР У., ДЖУРС П. Машинный анализ связи химической структуры и биологической активности. - М.: Мир, 1982. 236 с.
7. ЗАГОРУЖКО Н.Г. Методы распознавания и их применение. -М.: Сов.радио, 1982. - 206 с.
8. ХАРАРИ Ф. Теория графов. -М.: Мир, 1973. - 350 с.
9. ОРЕ О. Теория графов. -М.: Наука, 1980. - 336 с.
10. GENG-Hua Fan. New sufficient conditions for cycles in Graphs. - J.Combin.Theory, Ser.B., 1984, v.37, N 3, p.221-227.
11. DIRAC G.A. Some theorems on abstract graphs.- Proc.London Math.Soc., 1952, v.3, N 2, p.69-81.
12. BONDY J.A. Large cycles in graphs.- Discrete Math., 1971, v.1, p.121-132.
13. BERMOND J.C. On Hamiltonian walks.- Proc.Fifth British Combinatorial Conference, Aberdeen, 1975, Utilitas Math., 1976, p.41-51.
14. POSA L. On the circuits of finite graphs.- Magyar Tud. Akad. Kutato Int.Közl., 1963, v.8, p.335-361.
15. ХВОРОСТОВ П.В. Симметрии кубических графов.- В кн.: Машинные методы обнаружения закономерностей, анализа структур и проектирования (Вычислительные системы, вып. 92). Новосибирск, 1982, с.80-141.
16. MINOLY D. Combinational graph complexity.- Attis Acad.Was. Iincei Rend.A.Sci.fis.mat. 1'natur, 1975(1976), v.59, N 6, p. 154-171.
17. СКОРОВОГАТОВ В.А. Матрицы слоев и изометричность графов. - В кн.: Автоматизация проектирования в микроэлектронике. Теория. Методы. Алгоритмы (Вычислительные системы, вып. 77). Новосибирск, 1976, с.20-24.
18. КАЦ А.О. Исследование системы векторов расстояний графа. - В кн.: Латв.мат.ежегодник, Рига, 1976, т.20, с.170-179.  
Поступила в ред.-изд.отд.  
3 октября 1985 года