ВОПРОСЫ АЛГОРИТМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА СТРУКТУРНОЙ ИНФОРМАЦИИ
(Вычислительные системы)

1987 год Выпуск 119

УДК 519.17

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗОМЕТРИЧНОСТИ КУБИЧЕСКИХ ГРАФОВ

Н.М.Мейрманова, В.А.Скоробогатов

Регулярные графы степени три, называемые также кубическими графами или кубами, являются традиционными объектами для испытаний вычислительных алгоритмов на графах и для изучения различных их свойств. В [1] приводятся значения плотности, неплотности, реберной связности, хроматических чисел, хроматические классы и орбиты группы автоморфизмов для кубов порядка $p = 8, 10, 12$. В [2] для кубов $4 \le p \le 14$ приведены коэффициенты характеристического полинома, собственные значения, число циклов различной длины, диаметр, связность, планарность, порядок групп автоморфизмов. В [3] для кубов $4 \le p \le 14$ приведены порядок и структура орбит групп автоморфизмов, установлены свойства планарности и гамильтоновости. В [2,3,4,6] приведены изображения кубических графов для $4 \le p \le 12$ и в [3] для $p = 14$. В [8] приводятся цикловые индексы групп автоморфизмов для p-кубов, $4 \le p \le 14$.

Критерий изометричности [5] позволил исследовать свойства классов изометричности и получить данные о структуре и составе этих классов.

Приведем необходимые свойства из [5].

Пусть $G = (V, X)$ – конечный связный неограф без петель и кратных ребер, $V(G)$ – множество его вершин, $X(G)$ – множество ребер, $|V(G)| = p$, $|X(G)| = q$. Расстоянием $d(v,u)$ между вершинами v, $u \in V(G)$ называется длина кратчайшей простой цепи, соединяющей вершины v и u. Множество $V_i(v)$ вершин, находящихся на расстоянии i от v, называется i-слоем графа. Относительным одновершинным разбиением $\hat{G}(v)$ графа G по отношению к вершине v называется упорядоченное разбиение $\hat{G}(v) = \{V_i(v), i = \overline{0,k}\}$, $\bigcup_{i=0}^{k} V_i(v) = V(G)$, $V_i(v) \cap V_j(v) = \emptyset$ при $i \ne j$. Число k называется длиной разбиения $\hat{G}(v)$.

Множество всех одновершинных разбиений порождает одновершинную матрицу слоев графа G : $\lambda(G) = \|\lambda_{ij}\|$, $i = 1,2,\ldots,p$, $j = 1,2,\ldots$ $\ldots,d(G)$; $d(G)$ – диаметр графа G , где λ_{ij} равно числу вершин в j-м слое относительного разбиения по отношению к i-й вершине графа G . Матрица $l(G)$, состоящая из всех попарно различных строк одновершинной матрицы слоев $\lambda(G)$, называется l-спектром $l(G)$ графа G .

По определению графы G и H изометричны $G \leftrightarrow H$, когда G изометричен из H и H изометричен из G . Изометричность H из G : $G \rightarrow H$ означает, что для каждой вершины $v \in V(G)$ можно определить однозначное соответствие $V(G)$ на $V(H)$ $\varphi_v : V(G) \to V(H)$ такое, что для любой вершины $u \in V(H)$ $d_G(v,u) = d_H(\varphi_v(v),\varphi_v(u))$, где $d_G(v,u)$ – расстояние между вершинами v и u в графе G . Критерий изометричности имеет вид $G \leftrightarrow H \Leftrightarrow l(G) = l(H)$. Равенство l-спектров графов определяет их изометричность. В данной работе были найдены при помощи комплекса программ метрического анализа графов [9] следующие метрические характеристики для p-кубов, $4 \leq p \leq 14$: радиус, диаметр, эксцентриситеты вершин и графа, эксцентричность графа, дистанции вершин и графа, униполярность, централизация, дисперсия, компактность, l-спектры, матрицы слоев, периферия, центр, медиана, центр тяжести, число графов с данным l-спектром, число изометричных графов с данным спектром и ряд других характеристик. Полученные справочные данные имеют большой объем, поэтому ниже мы приводим лишь характеристики классов изометричности для графов порядка $10 \leq p \leq 18$ и классы изометричности для графов порядка $10 \leq p \leq 14$.

Для описания результатов введем некоторые обозначения.

Нетривиальным классом изометричности порядка p назовем состоящее не более чем из одного графа множество p-кубов, имеющих одинаковые l-спектры. Число кубов в нетривиальных классах изометричности обозначим через $N_H(p)$. Назовем p-куб уникальным, если он имеет уникальный l-спектр, не совпадающий с l-спектром остальных p-кубов. Число уникальных p-кубов обозначим через $N_y(p)$. Число нетривиальных классов изометричности обозначим через $k_H(p)$ и через $k(p)$ – число всех классов изометричности p-кубов. Все введенные обозначения с индексом l вверху будут иметь тот же смысл для фиксированного значения l , где l – число строк в l-спектре. Через $N(p)$ обозначим число p-кубов, через $N_l(p)$ – число p-кубов с данным l .

Полученные данные о структуре и числе классов изометричности I0-кубов приведены в табл.I. В графе "Состав $k_H(p)$ " содержатся сведения о структуре нетривиальных классов изометричности при фиксированном l. Обозначение 3/I означает, что для l = I имеется один класс изометричности I0-кубов, состоящий из трех графов. Из диаграммы на рис.2 можно легко установить, что это графы I4, I5, I7, а запись 2/I, 3/I для l = 3 означает, что имеется 2 нетривиальных класса: один состоит из двух графов и один из трех графов. На рис.I можно видеть характер изменения числа I0-кубов в зависимости от l. Структура отношения изометричности и l-спектры класса I0-кубов приведены в виде диаграммы на рис.2. Графы из классов, расположенные на нижних уровнях, "изометричны из" графов соответствующих классов (смежные "вершины") на верхних уровнях.За-

Таблица I

l(G)	$N_l(p)$	$N_y^l(p)$	$N_H^l(p)$	Состав $k_H(p)$	$k_H(p)$	$k(p)$
1	4	1	3	3/1	1	2
2	6	2	4	2/2	2	4
3	8	3	5	2/1 3/1	2	5
4	-	-	-	-	-	-
5	1	1	-	1/1	1	1
Σ	19	7	12	p = 10	6	12

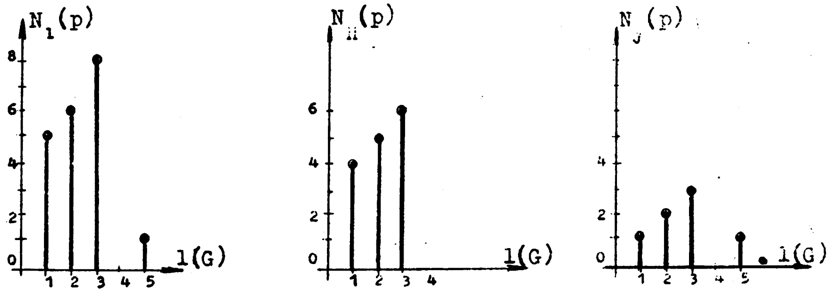

Рис. I

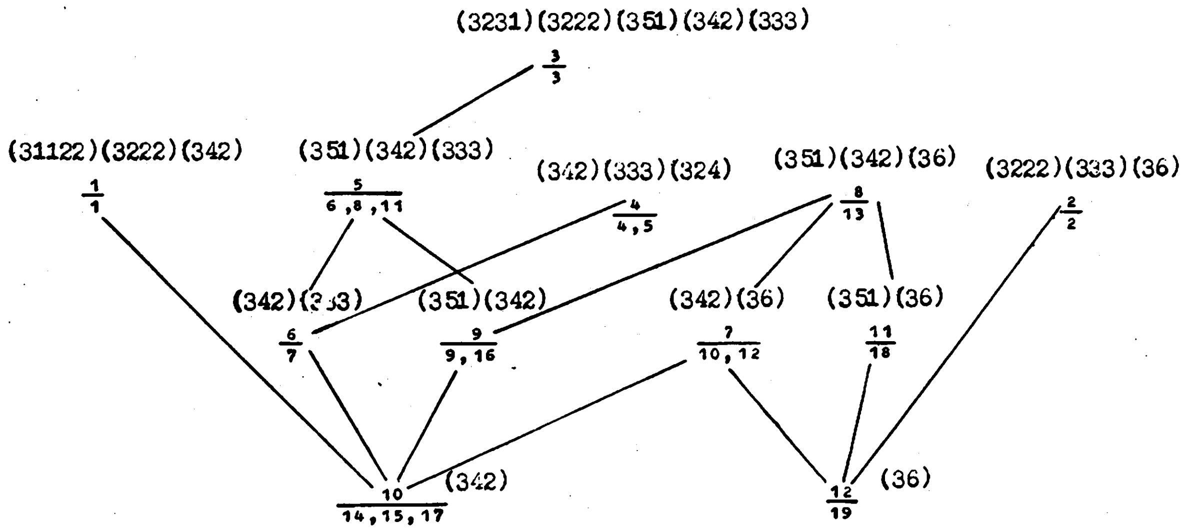

Рис. 2. Диаграмма изометричности в классе 10-кубов. В виде разбиений в скобках указан 1-спектр. Над чертой номер класса изомет - ричности, под чертой номера графов по каталогу [3] из класса

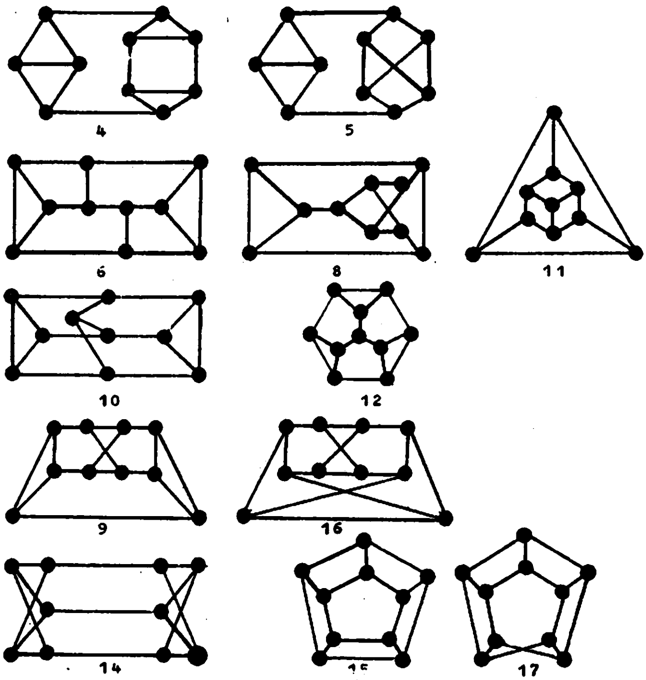

Рис.3.

метим, что графы 6,8,II изометричны между собой и изометричны из графа 3. На рис.3 приведены нетривиальные изометричные IO-кубы (4, 5)(6,8,II)(IO,I2)(9,I6)(I4,I5,I7). Изображения графов взяты из [3].

Табл.2-5 для I2-,I4-,I6-,I8-кубов аналогичны табл.I, рис.4-7 аналогичны рис.I.

Табл. 6 содержит сводные данные по всем изученным клас - сам графов. Можно заметить, что среднее число кубов в нетривиальном классе не превышает четырех и с ростом p меняется незначительно.

Для I2-кубов были установлены следующие группы изометричных графов: (3,4)(7,8)(24,25)(26,27,64)(30,36)(35,37,38)(39,40)(42,60, 68,69,73)(43,52,62,63,65)(45,50)(46,47,5I)(48,49,53,54,55,56, 57, 6I,67,70,75)(59,72)(76,77,79,80,8I,82)(78,83)(84,85).

Для I4-кубов классы изометричности представлены в табл.7.

Кубические графы порождались на ЭВМ при помощи программного генератора [7]. Нумерация графов соответствует принятой в [I,3].

Таблица 2

$l(G)$	$N_1(p)$	$N_y^1(p)$	$N_H^1(p)$	Состав $k_H(p)$	$k_H(p)$	$k(p)$
1	7	1	6	2/3 1/1	3	4
2	22	3	19	3/1 5/2 6/1 1/3	4	7
3	19	6	13	2/1 11/1 1/6	2	8
4	9	4	5	2/1 3/1 1/4	2	6
5	16	9	7	2/2 3/1 1/9	3	12
6	7	3	4	2/2 1/3	2	5
7	3	3	–	1/3	–	3
8	2	2	–	1/2	–	2
Всего	85	31	54	$p = 12$	16	47

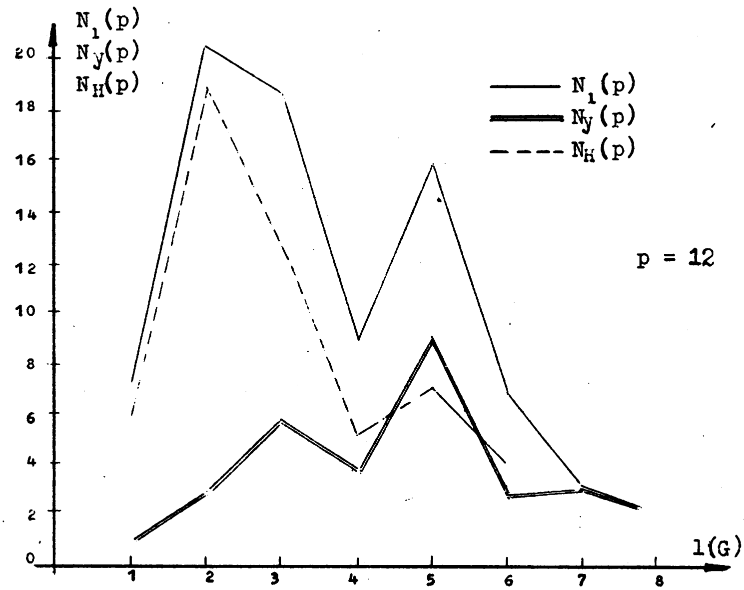

Рис.4

Таблица 3

$l(G)$	$N_1(p)$	$N_y^1(p)$	$N_H^1(p)$	Состав $k_H(p)$	$k_H(p)$	$k(p)$
1	9	–	9	2/1 7/1	2	2
2	37	2	35	2/1 3/1 4/2 6/1 15/1	6	8
3	50	11	39	2/3 3/3 4/2 16/1	9	20
4	74	28	46	2/9 3/4 4/1 6/2	16	44
5	91	30	61	2/9 3/3 4/2 7/1 19/1	16	46
6	87	44	43	2/10 3/1 5/1 7/1 8/1	14	48
7	65	44	21	2/9 3/1	10	54
8	48	38	10	2/2 3/2	4	42
9	28	22	6	2/3	3	25
10	14	10	4	2/2	2	12
11	2	2	–	–	–	2
12	3	3	–	–	–	3
13	1	1	–	–	–	1
Всего	509	235	274	p = 14	82	307

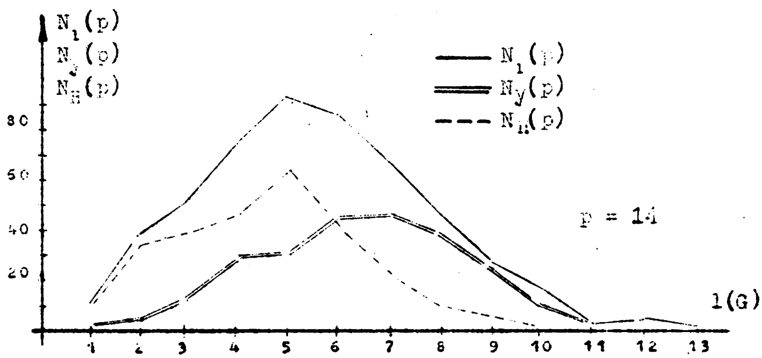

Рис.5

Т а б л и ц а 4

$l(G)$	$N_1(p)$	$N_y(p)$	$N_H(p)$	Состав $k_H(p)$	$k_H(p)$	$k(p)$
1	11	3	8	2/1 6/1	2	5
2	64	11	53	2/1 3/1 4/1 7/1 8/1 29/1	6	17
3	112	28	84	2/13 3/6 4/1 5/1 7/1 12/2	24	52
4	289	68	221	2/23 3/4 4/5 6/1 7/1 9/1 5/3 10/1 12/2 25/1 47/1	43	111
5	447	132	315	2/40 3/18 4/4 6/1 8/1 19/1 21/1 22/1 34/1 55/1	69	201
6	529	201	328	2/41 3/11 4/8 5/4 6/2 7/4 8/1 9/1 11/1 12/2 15/1 16/1 17/1 21/1	79	280
7	621	276	345	2/56 3/17 4/10 6/2 7/1 8/2 9/3 12/1 17/1 20/1 26/1 5/1	96	372
8	612	319	293	2/43 3/10 4/5 5/1 6/1 7/2 8/1 9/2 10/1 12/1 13/2 14/1 24/1 20/1	72	391
9	495	343	152	2/48 3/3 4/2 6/1 7/1 8/1 9/2	58	401
10	343	294	49	2/17 5/3	20	314
11	264	232	32	2/16	16	248
12	169	153	16	2/8	8	161
13	76	72	4	2/2	2	74
14	25	25	–		–	25
15	3	3	–		–	3
Всего	4060	2160	1900	p = 16	495	2655

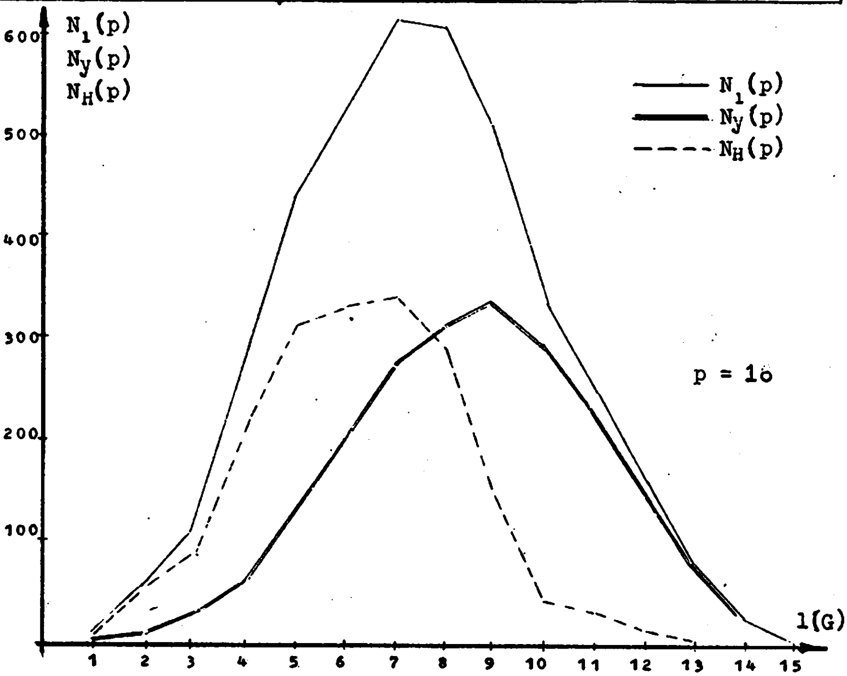

Рис. 6

$l(G)$	$N_l(p)$	$N^l_y(p)$	$N^l_H(p)$	Состав $k_H(p)$	$k_H(p)$	$k(p)$
1	2	3	4	5	6	7
1	9	3	6	2/1 4/1	2	5
2	89	8	81	2/6 4/1 7/1 14/1 21/1 23/1	11	19
3	414	47	367	2/9 3/5 4/3 8/2 7/2 11/1 13/1 18/1 54/1 196/1	26	73
4	845	126	719	2/31 3/19 4/7 5/7 6/2 7/5 9/1 10/1 11/1 12/1 14/1 15/1 16/1 17/1 18/1 21/1 33/1 73/1	85	211
5	1841	329	1512	2/88 3/21 4/17 5/8 6/6 7/8 8/2 9/1 10/3 11/3 12/1 13/1 14/1 23/1 26/1 27/1 28/1 32/1 33/1 36/1 47/1 52/1 69/1 70/1 80/1 84/1 90/1 111/1 138/1	176	505
6	3355	674	2681	2/116 3/35 4/30 6/15 5/18 7/7 8/11 9/6 10/5 11/4 12/2 14/1 15/1 16/1 17/3 18/3 23/1 26/1 29/3 30/1 31/1 34/1 43/1 49/1 63/1 66/1 77/1 106/1 190/1 226/1 230/1 272/1	277	951
7	4045	1135	2910	2/231 3/63 4/45 5/18 6/7 7/12 8/9 10/2 11/5 12/3 13/2 14/3 15/2 16/2 17/2 18/4 19/1 20/2 9/8 21/2 24/2 26/2 28/2 29/1 30/1 31/2 32/1 34/1 36/1 38/1 39/2 41/1 50/1 59/1 65/1 85/1 95/1 98/1 128/1 155/1	448	1583
8	4751	1910	2841	2/302 3/79 4/40 5/24 6/20 7/14 8/5 9/12 10/3 11/5 12/2 13/2 14/4 15/3 16/5 17/2 19/1 20/2 22/2 23/1	545	2455
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

1	2	3	4	5	6	7
				25/1 26/1 27/4 30/2 31/2 44/1 46/1 60/1 86/1 105/1 120/1 136/1		
9	5049	2762	2287	2/355 3/77 4/44 5/30 6/16 7/8 8/6 9/6 10/4 11/3 12/1 13/2 14/2 15/4 16/1 18/3 19/2 23/1 24/1 28/1 33/1 36/1 55/1 56/1 59/1 68/1 77/1	574	3336
10	5145	1398	3747	2/1146 3/41 4/100 5/12 6/23 7/4 8/17 9/1 10/8 11/3 12/4 13/2 14/6 16/3 17/1 18/1 20/1 21/1 22/1 23/2 24/1 33/1 41/1	1380	2778
11	4675	1471	3204	2/1290 3/20 4/80 5/4 6/19 8/4 10/4 12/2 14/1	1424	2895
12	4048	2087	1961	2/897 3/3 4/31 6/4 10/1	936	3023
13	3262	2940	322	2/159 4/1	160	3100
14	2100	1948	152	2/76	76	2024
15	1120	1046	74	2/37	37	1083
16	421	415	6	2/3	3	418
17	113	111	2		1	112
18	19	19	–		–	19
Всего	41301	18429	22872		6161	24590

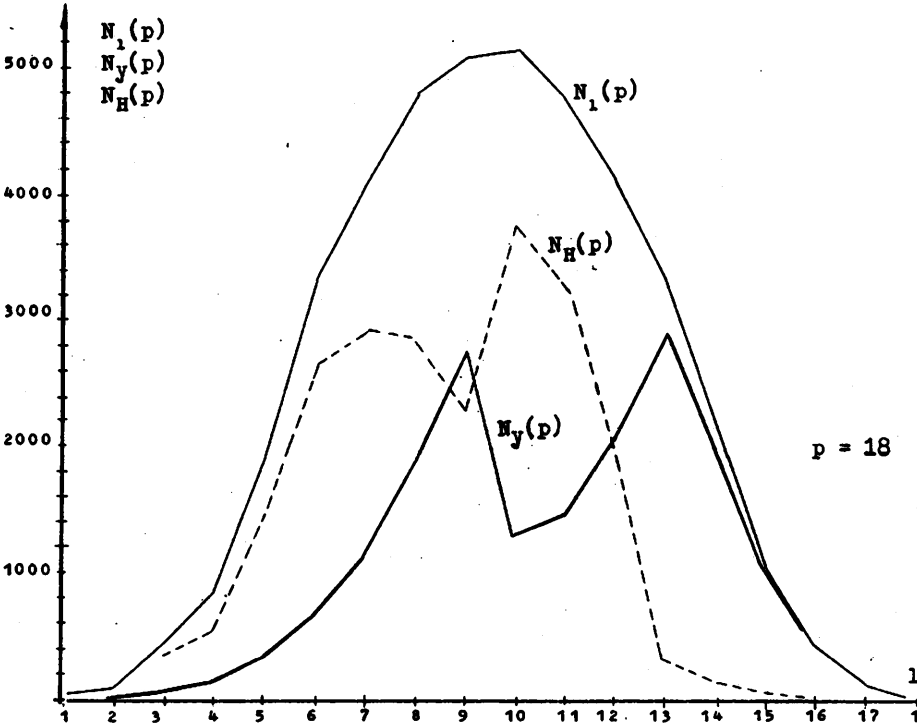

Рис.7. Свойства изометричности кубов 18 порядка.

Т а б л и ц а 6

p	10	12	14	16	18
$N_H^{cp}(p)$	2,4	3,37	3,34	3,84	3,71
$N(p)/k(p)$	1,58	1,81	1,61	1,53	1,68
$N_H(p)$	12	54	274	1900	22872
$N_y(p)$	7	31	235	2160	18429
$k_H(p)$	5	16	82	495	6161
$k(p)$	12	47	317	2655	24590
$N(p)$	19	85	509	4060	41301

Примечание: $N_H^{cp}(p) = (N(p) - N_y(p))/k_H(p)$ - среднее число графов в нетривиальном классе, $N_H(p)$ - число графов, входящих в нетривиальные классы, $N_y(p)$ - число уникальных графов, $k_H(p)$ - число нетривиальных классов, $k(p)$ - число классов изометричности, $N(p) = N_H(p) + N_y(p)$ - число всех кубов.

Т а б л и ц а 7

Классы изометричности кубических графов P = 14

4,5	141,142,400
22,23	143,144,401
26,27	209,210,220
37,41	212,224,225
43,44	257,381,433
46,47	275,374,406
72,73	281,287,432
94,96	288,308,320
125,126	295,328,350
128,129	297,319,343
145,158	311,324,355
146,183	336,349,452
147,254	351,379,391
148,157	415,425,445
149,156	493,498,499
150,402	
151,252	265,293,301,411
152,403	289,305,306,314
153,405	309,335,339,345
154,270	310,353,367,388
155,404	360,394,396,456
169,189	412,426,440,449
173,175	442,446,447,451
174,176	
177,178	
197,199	262,285,290,303,416
214,222	
218,228	268,277,278,424,428,443
231,232	370,372,393,397,399,421
240,248	468,472,476,487,492,494
245,246	
249,250	260,300,315,333,334,358,430
255,273	280,283,307,344,365,376,434
267,382	501,503,504,505,506,508,509
271,272	
296,423	284,291,299,302,318,325,431,444
304,329	
316,326	
322,342	458,459,460,461,463,464,466,467,473,474,475,477,479,
327,368	484,486,490
337,418	
338,414	462,465,469,470,471,481,482,483,485,488,489,491,495,
354,389	496,497,500
361,437	
363,373	312,323,347,348,352,357,359,366,377,378,384,385,387,
369,371	390,392,395,398,420,450
427,441	
436,438	
502,507	

Литература

I. БАРАЕВ А.М., ФАРАДЖЕВ И.А. Построение и исследование на ЭВМ однородных и однородных двудольных графов //Алгоритмические исследования в комбинаторике. - М.: Наука, 1978. С. 26-61.

2. Computer investigation of cubic graphs/F.S.Bassmaker,S.Cobeljic, L.M.Covetković, J.J.Seidel.- Technol.Univ.Eindhoven,1976. - (T.H.Rept.76-WSK-01)

3. ХВОРОСТОВ П.В. Симметрии кубических графов //Вычислительные системы. - Новосибирск, 1982. - Вып. 92: Машинные методы обнаружения закономерностей, анализа структур и проектирования. - С. 8-141.

4. BALABAN A.T.,DAVIES R.O.,HARARY F. a.o. Cubic identity graphs and planar graphs derivid from trees//J.Austral.Math.Soc.- 1970.- Vol.XI,N 2.- P.207-215.

5. СКОРОБОГАТОВ В.А. Матрицы слоев и изометричность графов //Вычислительные системы. - Новосибирск, 1978. Вып. 77: Автоматизация проектирования в микроэлектронике. Теория. Методы. Алгоритмы. - С. 20-24.

6. КОХОВ В.А., КУЗНЕЦОВ И.О., ЛАЗАРЕВ В.А. О кубических графах //Труды МЭИ. Теория графов. - 1975. - Вып.250. - С. 113-122.

7. МОЛОДЦОВ С.Г., ПИОТТУХ-ПЕЛЕЦКИЙ В.Н. Построение всех неизоморфных химических графов из заданного набора структурных фрагментов //Вычислительные системы. - Новосибирск, 1984. - Вып. 103: Алгоритмы анализа структурной информации. - С. 51-58.

8. КОХОВ В.А. Цикловые индексы групп автоморфизмов кубических графов //Вычислительные системы. - Новосибирск, 1985. - Вып. 112: Алгоритмический анализ структурной информации. - С.106-120.

9. ДОБРЫНИН А.А., МЕЙРМАНОВА Н.М., СКОРОБОГАТОВ В.А. Метрический анализ молекулярных графов и программный комплекс МЕТАН-МГ //УП. Всесоюз. конф. Использование вычислительных машин в химических исследованиях и спектроскопии молекул. - Рига, 21-23 окт. 1986 г.: Тез. докл. - Рига, 1986. - С.203-204.

Поступила в ред.-изд.отд.
6 марта 1987 года