

## ГРАФЫ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Е.Б.Мжельская

### В в е д е н и е

В работе изучаются свойства молекулярных графов полициклических бензоидных углеводородов.

Любой химической структуре  $S$  можно поставить в соответствие граф  $G$ , вершины которого соответствуют определенным атомам, а ребра - связям; такой граф называется молекулярным [1]. Графы, соответствующие полициклическим бензоидным углеводородам, являются плоскими топологическими графами [2], причем такими, что: границей каждой грани, кроме бесконечной, является простой цикл длины 6; две грани либо смежны и имеют точно одно общее ребро, либо не смежны; степень всех вершин  $\deg v: 2 \leq \deg v \leq 3$  [3].

Интерес к изучению полициклических структур проявляется в связи с решением следующих проблем. Во-первых, с классами графов данных структур связана классическая проблема роста клеток [4,5]. В [6,7] их называют "животными" по аналогии с организмом, который, начинаясь с одной (шестиугольной) клетки, растет на плоскости с добавлением подобных ему клеток. Встречаются также другие названия полициклических бензоидных структур: полигексы [8,9], полиарены [10], шестиугольные монстры [11]. Во-вторых, математическая проблема роста клеток шестиугольных "животных" родственна химической проблеме перечисления и определения числа конденсированных бензоидных углеводородов с заданным числом колец [12-15]. В-третьих, существование совершенного паросочетания в молекулярном графе полициклического бензоидного соединения означает, что этот граф соответствует молекуле некоторого ароматического углеводорода [16-18]. Такие структуры в химии принято называть системами с сопря-

женными связями, или просто сопряженными системами [19]. В-четвертых, перечисление и подсчет структур Кекуле [15,20], которые являются одним из основных элементов резонансной теории [21,22], структурно-резонансной теории [23] и количественной теории валентных связей [24], эквивалентно нахождению и подсчету совершенных паросочетаний в графе. Известен также ряд задач о покрытии плоскости полигексами [25,26] и шестиугольными монстрами [11].

Представителями полициклических бензоидных углеводородов являются ката-конденсированные и пери-конденсированные углеводороды. В [10] соответствующие молекулярные графы определяются через понятия характеристического графа. Ката-конденсированным бензоидным графам соответствует характеристический граф, являющийся деревом. Характеристический граф пери-конденсированных бензоидных графов содержит циклы. Там же предлагается численное описание молекулярных графов, которое в [15] называется **г р а н и ч н ы м к о д о м**.

В настоящей работе исследуется представление ката-конденсированных и пери-конденсированных молекулярных графов в виде **г р а н и ч н о й      с т е п е н н о й      п о с л е д о в а т е л ь н о с т и**, предложенной в [27], которое позволяет решать задачи канонизации графов и распознавания изоморфизма за линейное время. Показана возможность восстановления матрицы смежности графа по его граничной степенной последовательности и взаимно-однозначное соответствие граничной степенной последовательности с граничным кодом. Рассматриваются возможные пути нахождения симметрией графов и возможность их применения при нахождении пересечений и изоморфного вхождения.

## §1. Определение классов молекулярных графов

Граф  $G = (V, E)$  с множеством вершин  $|V(G)| = p$  и множеством ребер  $|E(G)| = q$  называют плоским, если существует его изображение на плоскости, не содержащее пересечений ребер. Такое изображение графа на плоскости называется плоским топологическим графом [2].

Пусть  $G$  - плоский топологический граф. Грань плоского топологического графа - это область плоскости, ограниченная ребрами и не содержащая внутри себя ни вершин, ни ребер. Ребра, ограничивающие грань, назовем граничными, а их множество - границей грани. Если границей грани плоского графа является простой цикл, то иногда под

гранью будем понимать этот цикл. У плоского топологического графа имеется единственная неограниченная или бесконечная грань. Все прочие грани будем называть собственными гранями графа  $G$  и обозначать  $q(G)$ ,  $|q(G)| = n$ . Граница плоского топологического графа — это множество ребер его граней, общих с неограниченной гранью. Ребро, принадлежащее границе графа, будем называть граничным ребром. Вершины, инцидентные граничным ребрам, будем называть граничными вершинами, остальные вершины будем называть внутренними. Две собственные грани смежны, если их пересечение содержит хотя бы одно ребро.

Грань вместе с некоторым направлением обхода ее границы называется ориентированной гранью; каждое из двух возможных направлений обхода грани называется ориентацией грани [28]. Ориентацию грани, соответствующую направлению обхода грани по часовой стрелке (против часовой стрелки), будем называть правой (левой) ориентацией. Каждая ориентация грани порождает определенное направление на собственных ребрах этой грани, или, как говорят, определенную ориентацию этих ребер, а значит, и границы грани.

Рассмотрим две смежные собственные грани. Пусть выбраны определенные ориентации этих граней. Говорят, что эти ориентации одинаковы или противоположны, в зависимости от того, порождают они на общем ребре обеих граней соответственно противоположные или одинаковые направления.

Плоский топологический граф называется ориентируемым, если можно ориентации всех его граней выбрать так, чтобы ориентации любых двух смежных граней оказались одинаковыми. Удовлетворяющее этому условию множество ориентаций всех граней называется ориентацией плоского топологического графа.

Пусть  $W$  — множество точек, расположенных в узлах бесконечной правильной шестиугольной решетки. Соседними точками для  $w \in W$  назовем точки, находящиеся от нее на кратчайшем расстоянии.

Рассмотрим бесконечный плоский топологический граф  $R^6 = (W, F, R)$ , все грани  $R$  которого есть правильные шестиугольники, а вершины имеют степень три. Здесь  $F$  — множество ребер, инцидентных соседним вершинам (точкам).

Зададим ориентацию  $R^6$  следующим образом. Пусть задана ориентация какого-нибудь шестиугольника из  $R^6$ . Тогда требование одинаковой ориентации всяких двух смежных шестиугольников однозначно определяет сначала ориентации шестиугольников, смежных с данным,

а затем последовательно определяет и ориентации всех шестиугольников  $R^6$ , а, значит, и ориентацию  $R^6$  в целом.

Будем говорить, что плоский топологический граф  $R^6$  имеет правую (левую) ориентацию, если все его грани имеют соответственно правую (левую) ориентацию.

Пусть  $G, H$  — плоские топологические графы. Определим граф  $L = G \mid H$  как граф, который получается путем отождествления одного или нескольких смежных граничных ребер графов  $G$  и  $H$ . Назовем 2-ребром графа  $G$  ребро, инцидентное вершинам степени 2.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1.** Ката-конденсированными бензоидными графами, или **КК-графами**, будем называть следующие однозначно отображаемые в  $R^6$  графы (обозначим этот класс через  $KK[6]$ ):

- 1) простой цикл длины шесть  $C_6 \in KK[6]$ ;
- 2)  $C_6 | C_6 = C_6^2 \in KK[6]$ , где  $C_6^2$  получен отождествлением одного любого 2-ребра;
- 3) пусть  $C_6^n \in KK[6]$ , тогда  $C_6^n | C_6 \in KK[6]$ .

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2.** Пери-конденсированными бензоидными графами, или **РК-графами**, будем называть следующие однозначно отображаемые в  $R^6$  графы (обозначим этот класс через  $PK[6]$ ):

- 1) пусть  $C_6^{k-1} \in KK[6]$ , тогда  $C_6^{k-1} | C_6 = P_6^k \in PK[6]$ , если  $P_6^k$  получен отождествлением не менее двух граничных смежных ребер (и не более пяти);
  - 2) пусть  $P_6^n \in PK[6]$ , тогда  $P_6^n | C_6 = P_6^{n+1} \in PK[6]$ .
- Примеры **КК-графов** и **РК-графов** приведены на рис. I.

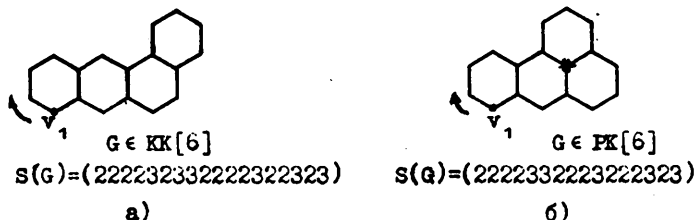


Рис. I

**УТВЕРЖДЕНИЕ I.** Пусть  $G = (V, E, Q) \in KK[6]$ . Тогда —

$$|V| = 4n+2, \quad |E| = 5n+1 \quad (1)$$

и все вершины  $v \in V(G)$  принадлежат границе графа  $G$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из определения I следует, что все вершины  $v \in V(G)$   $KK$ -графа  $G$  являются граничными вершинами. Докажем (I) методом математической индукции.

Для  $n=1$  формулы (I) верны. Пусть для  $n=k$  формулы (I) верны:  $|V| = 4k+2$ ,  $|E| = 5k+1$ . Добавляем еще одну грань  $C_6$ , одно 2-ребро отождествляется. При этом имеем:  $|V| = 4k + 2 + 4 = 4(k+1) + 2$ ,  $|E| = 5k+1+5 = 5(k+1)+1$ .

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Пусть  $G = (V, E, Q) \in PK[6]$ . Тогда  $|V| = 4n+2-i$ ,  $|E| = 5n+1-i$ , где  $i$  - число внутренних вершин графа  $G$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО следует из утверждения I и индуктивного определения  $PK$ -графов.

Обозначим  $K[6] = KK[6] \cup PK[6]$ . Граф, принадлежащий  $K[6]$ , будем называть  $K$ -графом. Любой  $K$ -граф есть плоский топологический граф, являющийся подграфом  $R^6$ . И, наоборот, каждый подграф  $G \subset R^6$ , границей которому служит простой замкнутой ориентированный маршрут, является  $K$ -графом.

Пусть  $G \in K[6]$ . В силу произвольности расположения  $G$  в  $R^6$ , граница одного и того же  $K$ -графа может быть представлена в виде различных ориентированных замкнутых маршрутов. Однако при выполнении на плоскости движений в виде параллельного переноса, зеркального отображения и поворота относительно неподвижного центра, различные ориентированные маршруты одного и того же  $K$ -графа совпадают как границы одной и той же геометрической фигуры.

Пусть  $G, H \subset R^6$  являются  $K$ -графами. Графы  $G$  и  $H$  называют конгруэнтными (обозначение  $G \sim H$ ), если существует движение на плоскости, при котором  $G$  и  $H$  совмещаются как геометрические фигуры. Следовательно, если при выполнении любых движений на плоскости различные замкнутые ориентированные маршруты в  $R^6$  не совпадают, то они соответствуют границам неконгруэнтных  $K$ -графов  $G$  и  $H$ . И, наоборот, границам неконгруэнтных  $K$ -графов  $G$  и  $H$  соответствуют различные замкнутые ориентированные маршруты, которые не совпадают ни при каких движениях плоскости. Таким образом, верно следующее

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Границы  $K$ -графов  $G$  и  $H$  в  $R^6$  совпадают тогда и только тогда, когда  $G \sim H$ .

Заметим, что конгруэнтность  $K$ -графов  $G$  и  $H$  в  $R^6$  влечет их изоморфизм ( $G \cong H$ ) и, наоборот, изоморфные  $K$ -графы конгруэнтны в  $R^6$ . Из утверждения 3 вытекает

**СЛЕДСТВИЕ 1.** Границы  $K$ -графов  $G$  и  $H$  в  $R^6$  совпадают тогда и только тогда, когда  $G \cong H$ .

## §2. Граничная степенная последовательность

В [27] вводится понятие граничной степенной последовательности. В данном разделе рассматривается ее канонический вид и обсуждаются свойства  $K$ -графов. Показана связь граничной степенной последовательности с матрицей смежности и граничным кодом [15].

### 2.1. Основные определения и свойства.

Пусть  $G = (V, E, Q) \in R^6$  есть  $K$ -граф с множеством граничных вершин  $V_B \subseteq V$ ,  $|V_B(G)| = p_B$  и множеством граничных ребер  $E_B \subseteq E$ ,  $|E_B(G)| = p_B$ . Выберем некоторую вершину  $v_1 \in V_B$  и зададим ориентацию  $R^6$ . Определим граничную степенную последовательность данного графа  $S(G) = (d_1 \dots d_{p_B})$  как последовательность степеней граничных вершин ориентированного замкнутого маршрута, при этом для всех  $1 \leq i \leq p_B - 1$ :  $v_i \in V_B$ ,  $v_i \text{ adj } v_{i+1}$ ,  $v_1 \text{ adj } v_{p_B}$  и  $d_i = \deg v_i \in \{2, 3\}$ . Длину последовательности  $S(G)$  будем обозначать  $\text{lng}(S)$ .

Для  $G \in KK[6]$  все вершины  $v \in V(G)$  являются граничными вершинами, поэтому для  $KK$ -графа степенная последовательность совпадает с граничной степенной последовательностью (рис. I, а). Для  $G \in PK[6]$  не все вершины являются граничными, поэтому  $S(G)$  не совпадает со степенной последовательностью графа (степень вершины, отмеченной звездочкой, в  $S(G)$  не входит (рис. I, б)).

**УТВЕРЖДЕНИЕ 4.** Пусть  $G \in K[6]$ ,  $m_1$  - число троек в  $S(G)$ ,  $m_2$  - число двоек в  $S(G)$ ,  $i$  - число внутренних вершин графа  $G$ . Тогда:

$$\text{lng}(S) = 4n - 2(i-1), \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} m_1 &= 2(n-1) - i \\ m_2 &= 2(n+2) - i \end{aligned} \right\}. \quad (3)$$

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Докажем (2) (формулы (3) доказываются аналогично). Если  $i = 0$ , то  $G \in KK[6]$  и, по утверждению 1,  $\text{lng}(S) =$

$= |V(G)| = 4n+2$ . Рассмотрим случай, когда  $1 \neq 0$ . Пусть для  $i=k$  формула верна:  $\text{lng}(S) = 4n - 2(k-1)$ . Покажем, что она верна и для  $i = k+1$ . Появление еще одной внутренней вершины означает, что число собственных граней графа  $G$  увеличилось на единицу, а длина степенной последовательности увеличилась на два. Имеем  $\text{lng}(S) = 4n - 2(k-1) + 2 = 4n+4-2k = 4(n+1) - 2((k+1)-1)$ .

Следующее утверждение устанавливает достаточное условие принадлежности графа к классу  $PK[6]$ .

**УТВЕРЖДЕНИЕ 5.** Если в  $S(G)$  содержится фрагмент 32223, то  $G \in PK[6]$ .

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО** непосредственно следует из определения  $PK$ -графов. Граф, изображенный на рис. 1, б, иллюстрирует данное утверждение. Его граничная степенная последовательность  $S(G) = (2222332223222323)$  содержит два фрагмента 32223.

Пусть  $G \in K[6]$  и  $S(G) = (d_1 \dots d_{p_B})$ . Меняя выбор начальной вершины и ориентацию  $R^6$ , можно определить все множество  $M(G)$  граничных степенных последовательностей  $K$ -графа  $G$ , которым соответствуют все возможные ориентированные замкнутые маршруты, представляющие границу  $G$  в  $R^6$ .

**УТВЕРЖДЕНИЕ 6.**  $|S(G)| = 2 \cdot p_B$ .

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Пусть  $S(G)$  — некоторая граничная степенная последовательность  $G$ . Тогда  $M(G)$  есть множество граничных степенных последовательностей, эквивалентных данной по отношению к элементам диэдральной группы подстановок  $D_{p_B}$ . Элементами  $D_{p_B}$  являются инверсия и циклическая подстановка. Циклическая подстановка на  $S(G)$  означает изменение выбора начальной вершины, а инверсия на  $S(G)$  соответствует изменению ориентации  $R^6$ . Поскольку  $|D_{p_B}| = 2 \cdot p_B$ , следовательно, и  $|M(G)| = 2 \cdot p_B$ .

## 2.2. Каноническое представление $K$ -графа.

Пусть  $G \in K[6]$  и  $M(G)$  — множество всех граничных степенных последовательностей графа  $G$ . Как было отмечено выше,  $K$ -граф  $G$  имеет  $2 \cdot p_B$  различных представлений его границы в  $R^6$ , которым соответствуют различные граничные степенные последовательности.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3.**  $(2, k)$ -подпоследовательность  $s(2, k, G)$  граничной степенной последовательности  $S(G)$  графа  $G$  будем называть максимальной по включению последовательность, начинающуюся с  $k$  двоек, где  $k \in \{2, 3, 4\}$ , причем число вхождений  $k$  последовательных двоек в  $s(2, k, G)$  единственно. Через  $s_i(2, k, G)$  будем обозначать

$i$ -ю по порядку слева направо  $(2, k)$ -подпоследовательность  $S(G)$ , а через  $\text{lng}(s_i)$  - длину  $(2, k)$ -подпоследовательности  $s_i(2, k, G)$ .

Определим множество  $\mathcal{S}_2(G)$  графа  $G$  как множество всех его граничных степенных последовательностей,  $(2, k)$ -подпоследовательностями которых являются максимальные по включению последовательности, начинающиеся с максимального возможного числа двоек. Легко видеть, что  $\mathcal{S}_2(G) \subset \mathcal{S}(G)$ .

Пусть  $S(G) \in \mathcal{S}_2(G)$  и  $S(G) = (s_1(2, k, G) \| s_2(2, k, G) \| \dots \| s_t(2, k, G))$ , где  $s_i(2, k, G)$ ,  $i = \overline{1, t}$ , есть  $(2, k)$ -подпоследовательности, обладающие указанным свойством (символ  $\|$  обозначает конкатенацию подпоследовательностей). Для сокращения записи в дальнейшем будем представлять граничную степенную последовательность из множества  $\mathcal{S}_2(G)$  в виде  $S(G) = (s_i(2, k, G), i = \overline{1, t})$ . Для  $K$ -графов  $\mathcal{S}_2(G) = 2t$ .

Лексикографически минимальный элемент множества  $\mathcal{S}_2(G)$  будем называть каноническим представлением  $K$ -графа и обозначать  $S^*(G) = (s_i^*(2, k, G), i = \overline{1, t})$ . Нумерацию вершин, соответствующую нумерации степеней вершин, в каноническом представлении, будем называть канонической. Так, для графа  $G$ , изображенного на рис. 1, б,  $\mathcal{S}_2(G) = \{(2222332223222323), (2222323222322233)\}$ ,  $t = 1$  и  $S^*(G) = (2222323222322233)$ .

Пусть  $S(G) = (d_1 \dots d_{p_B})$  есть граничная степенная последовательность  $K$ -графа  $G$ , соответствующая некоторому ориентированному замкнутому маршруту. Тогда граница графа  $G$  в  $R^6$  восстанавливается по  $S(G)$  следующим образом. Пусть  $R^6$  имеет правую (левую) ориентацию. Договоримся, что  $d_i$  является степенью вершины, инцидентной некоторому фиксированному вертикальному ребру в  $R^6$ . Тогда: 1) если  $d_i = 2$ ,  $i = \overline{2, p_B - 1}$ , то ребро  $(v_i, v_{i+1}), (v_{p_B}, v_1)$  направлено вправо (влево) относительно вершины  $v_i, v_{p_B}$ ; 2) если  $d_i = 3$ ,  $i = \overline{2, p_B - 1}$ , то ребро  $(v_i, v_{i+1}), (v_{p_B}, v_1)$  направлено влево (вправо) относительно вершины  $v_i, v_{p_B}$ .

Таким образом, если задать ориентацию  $R^6$ , то граница  $K$ -графа  $G$  в  $R^6$  восстанавливается по  $S(G)$  единственным образом.

ТЕОРЕМА 1. Пусть  $G, H \in K[G]$  и  $S^*(G), S^*(H)$  - их канонические представления. Тогда  $S^*(G) = S^*(H) \Leftrightarrow G \cong H$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть  $G \cong H$ . Тогда  $G \sim H$  и по утверждению 3 границы  $K$ -графов  $G$  и  $H$  в  $R^6$  совпадают. Поскольку выбор лексикографически минимальной граничной степенной последовательности в качестве представления границы  $K$ -графа в  $R^6$  означает фиксацию



единственного ориентированного замкнутого маршрута, соответствующего границе графа, то, следовательно,  $S^*(G) = S^*(H)$ .

Пусть  $S^*(G) = S^*(H)$ . Так как граница  $K$ -графа в  $R^6$  восстанавливается по его граничной степенной последовательности единственным образом, то границы  $K$ -графов  $G$  и  $H$  в  $R^6$  совпадают. Тогда, по утверждению 3, имеем  $G \sim H$ . Конгруэнтность  $K$ -графов  $G$  и  $H$  означает, что  $G \cong H$ .

Для  $K$ -графа  $G$  каноническое представление  $S^*(G)$  может быть получено путем непосредственного построения множества  $S_2(G)$ , его лексикографического упорядочивания и выбора наименьшего элемента.

В предлагаемом способе нахождения канонического представления  $K$ -графа  $G$  используется не все множество  $S_2(G)$ , а лишь один его элемент  $S(G) \in S_2(G)$ .

Пусть  $S(G) = (d_1 \dots d_j \dots d_{p_B}) = (s_i(2, k, G), i = \overline{1, t}) \in S_2(G)$ , где  $d_j$  — последняя двойка первой  $(2, k)$ -подпоследовательности  $S(G)$ . И пусть  $\bar{S}(G) = (d_j \dots d_1 d_{p_B} \dots d_{j+1}) = (\bar{s}_i(2, k, G), i = \overline{1, t})$ . Поскольку каноническое представление  $S^*(G)$  является лексикографически минимальным элементом множества  $S_2(G)$ , то первая  $(2, k)$ -подпоследовательность  $s_1^*(2, k, G) \subset S^*(G)$  должна удовлетворять следующим свойствам:

1) для всех  $i = \overline{1, t}$ :  $s_1^*(2, k, G) \leq s_i(2, k, G)$  и  $s_1^*(2, k, G) \leq \bar{s}_i(2, k, G)$ ;

2)  $\lg(s_1^*) = \min_{1 \leq i \leq t} \{ \lg(s_i), \lg(\bar{s}_i) \}$ .

Следовательно, определение канонического представления сводится к нахождению  $(2, k)$ -подпоследовательности в  $S(G)$  и  $\bar{S}(G)$ , удовлетворяющей условиям 1 и 2. Пусть такая подпоследовательность найдена. Тогда  $S^*(G)$  получается из  $S(G)$  (или  $\bar{S}(G)$ ) действием соответствующей циклической подстановки, при которой найденная  $(2, k)$ -подпоследовательность является в  $S^*(G)$  первой.

Поиск  $s_1^*(2, k, G)$  предполагает последовательное сравнение подпоследовательностей и выбор на каждом шаге сравнения  $(2, k)$ -подпоследовательности с нужными свойствами. Можно показать, что когда не существует  $i, j = \overline{1, t}$ :  $s_i(2, k, G) = s_j(2, k, G)$  и  $\bar{s}_i(2, k, G) = \bar{s}_j(2, k, G)$ , число требуемых операций есть  $(t-1) + t$ . В случае, когда  $s_{\frac{t}{2}}(2, k, G) = s_t(2, k, G)$ , потребуется дополнительно  $\frac{t}{2} + 1$

$(\frac{t}{2} - 1)$  сравнений. При этом среди первых  $\frac{t}{2}$   $(2, k)$ -подпоследо-

вательностей возможны дополнительные сравнения на каждом из четырех соседних  $(2, k)$ -подпоследовательностях. Аналогично для  $\bar{S}(G)$ . Таким образом, в этом случае число требуемых операций есть  $(t-1) + t + 2 \left( \frac{1}{2} t - 1 \right) + \frac{1}{2} t$ . Для  $t < 8$  ( $n < 14$ ) последнее слагаемое не имеет места.

Пусть  $G, H \in K[6]$ . Метод распознавания изоморфизма  $K$ -графов вытекает из теоремы I: различные канонические представления соответствуют неизоморфным  $K$ -графам; таким образом, распознавание изоморфизма графов  $G$  и  $H$  сводится к нахождению их канонических представлений и сравнению.

### 2.3. Связь граничной степенной последовательности с матрицей смежности и граничным кодом.

В данном разделе показана возможность восстановления матрицы смежности  $K$ -графа по его граничной степенной последовательности. Устанавливается взаимнооднозначное соответствие между граничным кодом и граничной степенной последовательностью.

Пусть  $G = (V, E, Q) \in K[6]$  и  $S(G) = (d_1, \dots, d_{p_B})$  - его граничная степенная последовательность. Положим  $V^3 = \{v_i \in V, i = \overline{1, p_B}; d_i = 3\} \subset V$  и  $V_B^3 = \{v_j \in V_B, j = \overline{1, p_B}; d_j = 3\} \subseteq V^3$ .

Смежность вершин степени два устанавливается просто. Для всех  $d_i = 2, i = \overline{2, p_B - 1}$ , вершина  $v_i$  смежна с вершинами  $v_{i-1}$  и  $v_{i+1}$ . Первая вершина смежна со второй и последней, последняя - с первой и предпоследней. Для вершин  $v \in V^3$  две смежные вершины определяются аналогично. Третью смежную вершину позволяют определить следующие очевидные свойства граничных степенных последовательностей  $K$ -графов. Пусть  $d_i = 3$  и  $d_j = 3$ . Тогда

Свойство 1. Если  $i = j + 5$ , то  $v_i \text{ adj } v_j$ .

Свойство 2. Если  $i = j + 4$ , то существует  $v_k \in V^3$ :  $v_i \text{ adj } v_k$  и  $v_j \text{ adj } v_k$ .

Свойство 3. Если  $i = j + 3$ , то существуют  $v_k, v_l \in V^3$ :  $v_i \text{ adj } v_l$ ,  $v_j \text{ adj } v_k$  и  $v_l \text{ adj } v_k$ .

Свойство 4. Если  $i = j + 2$ , то существуют  $v_k, v_l, v_m \in V^3$ : либо 1)  $v_i \text{ adj } v_l$ ,  $v_l \text{ adj } v_k$  и  $v_l \text{ adj } v_m$ ,  $v_k \text{ adj } v_m$ ; либо 2)  $v_i \text{ adj } v_k$ ,  $v_j \text{ adj } v_l$ .

Пусть  $G \in KK[6]$ , тогда  $V_B^3 = V^3$  и смежность граничных вершин определяется на основании свойств 1 и 4.2.

Пусть  $G \in \mathcal{K}[6]$ , тогда  $V_B^3 \neq V^3$  и пусть  $V_1(V_B^3)$  - множество вершин степени три, находящихся на расстоянии 1 от  $V_B^3$  [29]. Используя свойства 1-4, найдем смежность вершин множества  $V_B^3$  и определим множество  $V_1(V_B^3)$ . Заменой фрагментов 322223 и 32223 (3223, если перечисленные ранее фрагменты отсутствуют в  $S(G)$ ) на 22 и 232 (2332) в граничной степенной последовательности  $S(G)$  добьемся, чтобы вершины из множества  $V_1(V_B^3)$ , удовлетворяющие свойству 2 (свойству 3, если в  $V_1(V_B^3)$  нет вершин, для которых выполняется свойство 2), рассматривались как граничные. Установим, с использованием свойств 1-4, смежность вершин множества  $V_1(V_B^3)$ , определим множество  $V_2(V_B^3)$  и т.д.

Таким образом, можно получить все граничные и внутренние вершины степени три и восстановить их смежность.



Рис.2

Возможны другие представления границы  $K$ -графов [10, 15, 30, 31]. Так, если в  $K_6$  каждому из шести ребер  $e_i$  поставить в соответствие определенную цифру и задать направление, как показано на рис.2, то его граница может быть описана реберной граничной последовательностью, например 123456. Таким образом можно описать границу любого  $K$ -графа. В [15] такое представление называется граничным кодом.

Между граничным кодом и граничной степенной последовательностью можно установить взаимно-однозначное соответствие следующим образом. Пусть  $R(G) = (e_1 \dots e_{p_B})$  - последовательность ребер граничного кода  $K$ -графа  $G$  и  $S(G) = (d_1 \dots d_{p_B})$  - его граничная степенная последовательность, причем  $d_i$  является степенью вершины, инцидентной некоторому вертикальному ребру.

Пусть  $\Psi$  - циклическая подстановка (123456). Тогда  $S(G)$  может быть восстановлена по граничному коду:

- 1) если  $e_{i+1} = \Psi^{-1}(e_i)$ ,  $1 \leq i \leq p_B - 1$ ,  $e_1 = \Psi^{-1}(e_{p_B})$ , то  $\deg v_{i+1} = 3$ ;
- 2) если  $e_{i+1} = \Psi(e_i)$ ,  $1 \leq i \leq p_B - 1$ ,  $e_1 = \Psi(e_{p_B})$ ,  $\deg v_{i+1} = 2$ .

И, наоборот, по  $S(G)$  можно получить граничный код

$$e_{i+1} = \begin{cases} \Psi(e_i), & \text{если } \deg v_i = 2, \\ \Psi^{-1}(e_i), & \text{если } \deg v_i = 3, \end{cases} \quad 1 \leq i \leq p_B - 1.$$

### §3. Анализ симметрий K-графов

Пусть  $G \in K[6]$  и  $\Gamma(G)$  - его группа автоморфизмов - совокупность подстановок на множестве вершин  $V_B(G)$ , сохраняющих смежность. Элементами  $\Gamma(G)$  K-графа  $G$  являются инверсия и циклическая подстановка.

Вершины  $v, u \in V_B(G)$  называются эквивалентными относительно  $\Gamma(G)$ , если  $\exists \varphi \in \Gamma(G): \varphi v = u$ . Под орбитами графа будем понимать классы эквивалентности  $\theta_i, i = \overline{1, r}$ , разбиения множества граничных вершин по отношению к  $\Gamma(G)$ . Такое разбиение обозначим через  $\hat{V}_e(G) = \{e_1, \dots, e_r\}$ . Граф считается симметричным, если его группа автоморфизмов имеет нетривиальные орбиты [32].

Если рассматривать симметрию в терминах граничной степенной последовательности  $S(G)$ , то условие  $\varphi v = u$  означает, что  $S^i(G)$ , упорядоченная в соответствии с подстановкой  $\varphi$ , совпадает с  $S(G)$ , т.е.  $\varphi S^i(G) = S(G)$ .

Пусть  $S(G) = (s_i(2, k, G), i = \overline{1, t}) = (d_1, \dots, d_{P_B}) \in \mathcal{S}_2(G)$ .

Зафиксируем нумерацию степеней вершин в  $S(G)$  и рассмотрим все  $S^j(G) \in \mathcal{S}_2(G), j = \overline{1, 2t}$ , полученные из  $S(G)$  действием циклической подстановки и инверсии, с сохранением нумерации, соответствующей  $S(G)$ . Тогда каждое равенство  $S^i(G) = S^j(G), i, j \in \{1, 2t\}$ , элементов из  $\mathcal{S}_2(G)$  будет соответствовать подстановке  $\varphi =$

$= \begin{pmatrix} d_1^i & \dots & d_{P_B}^i \\ d_1^j & \dots & d_{P_B}^j \end{pmatrix}$ , являющейся автоморфизмом; вершины, степени кото-

рых входят в один и тот же независимый цикл подстановки  $\varphi$ , эквивалентны, и все множество таких подстановок будет определять группу  $\Gamma(G)$ .

Следующие свойства граничных степенных последовательностей позволяют установить наличие в графе  $G$  симметрий.

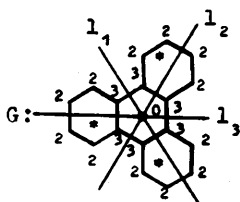
Свойство 5. Пусть  $G \in K[6]$  и  $S(G) = (s_i(2, k, G), i = \overline{1, t}) \in \mathcal{S}_2(G)$ . Тогда

а) если  $s_i(2, k, G) = s_{i+1}(2, k, G)$  для всех  $i = \overline{1, t-1}$ , то граф  $G$  имеет симметрии;

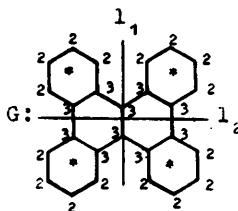
б) если  $s_i(2, k, G) = s_{i+\frac{t}{2}}(2, k, G)$ , где  $t$  четное, для все  $i = \overline{1, \frac{t}{2}}$ , то граф  $G$  имеет симметрии.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Равенство всех  $(2, k)$ -подпоследовательностей в  $S(G)$  K-графа  $G$  (условие "а") гарантирует совпадение исходног

графа  $G$  с ним самим при вращении на плоскости на  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $270^\circ$  и при зеркальном отображении относительно любой из трех возможных для  $K$ -графа осей симметрии. Так, граф  $G$ , изображенный на рис.3,а,



а)



б)

$$S(G) = (2222333222233 \quad 2222333222233)$$

Рис. 3

границной степенной последовательностью которого является  $S(G) = (222233222233222233)$ , симметричен относительно осей  $l_1, l_2, l_3$  и совпадает с самим собой при вращении относительно точки  $O$ . Выполнение условия "б" в  $S(G)$  означает, что граф  $G$  имеет две оси симметрии (см. рис.3,б - выделенные подпоследовательности совпадают) и накладывается на себя при вращении на  $180^\circ$ .

**Свойство 6.** Пусть  $G \in K[6]$ ,  $S(G) = (s_i(2, k, G), i = \overline{1, 2}) : s_i(2)$  и  $s_i(2, k, G) = (d_1^i \dots d_{k+1}^i)$ , где  $l = \lg(s_i)$ . Тогда если для  $\forall i = \overline{1, 2}$  подстановка

$$\varphi^i = \begin{pmatrix} d_{k+1}^i & \dots & d_1^i \\ d_1^i & \dots & d_{k+1}^i \end{pmatrix}$$

является тождественной, то граф  $G$  имеет симметрии.

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Поскольку по условию для всех  $i = \overline{1, 2}$  под-

становка  $\varphi^i = \begin{pmatrix} d_{k+1}^i & \dots & d_1^i \\ d_1^i & \dots & d_{k+1}^i \end{pmatrix}$  является тождественной, то вершины,

степени которых входят в  $\varphi^i$  в один независимый цикл, являются эквивалентными и это возможно в случае зеркального отображения графа  $G$  относительно единственной оси. Для графа  $G$  (рис.4) осью симметрии является  $l_1$ .

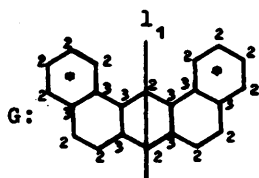


Рис. 4

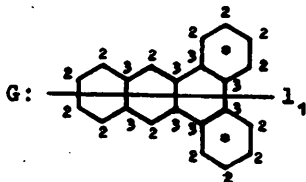


Рис. 5

**Свойство 7.** Пусть  $G \in K[6]$ ,  $s(G) = (s_1(2, k, G), \dots, s_t(2, k, G))$ ,  $1 = \overline{1, t} \in \overline{s_2(G)}$ . Тогда если существуют  $-1, j \in \{1, t\}$  такие, что:

$$1) \text{ подстановка } \varphi_j^1 = \begin{pmatrix} d_{k+1}^1 & \dots & d_1^1 \\ d_1^j & \dots & d_{k+1}^j \end{pmatrix},$$

$$\text{где } s_1(2, k, G) = (d_1^1 \dots d_k^1), \quad s_j(2, k, G) = (d_1^j \dots d_k^j), \quad 1 = \lg(s_1) = \lg(s_j),$$

является тождественной и

2) для всех  $p \neq 1, j$  подстановка

$$\varphi_p^D = \begin{pmatrix} d_{k+1}^p & \dots & d_1^p \\ d_1^p & \dots & d_{k+1}^p \end{pmatrix}, \quad \text{где } 1 = \lg(s_p),$$

$s_p(2, k, G) = (d_1^p \dots d_k^p)$ , является тождественной, то граф  $G$  имеет симметрии.

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Тождественность подстановок  $\varphi_j^1$ , где  $1, j \in \{1, t\}$ :  $\lg(s_1) = \lg(s_j)$  и  $\varphi^D$  означает совпадение графа  $G$  с самим собой при зеркальном отображении относительно одной из трех возможных для  $K$ -графа осей симметрии. Граф  $G$ , изображенный на рис. 5, симметричен относительно оси  $1$ , и подстановки  $\varphi_j^1 = \begin{pmatrix} 3233 \\ 3233 \end{pmatrix}$

и  $\varphi^2 = \begin{pmatrix} 33 \\ 33 \end{pmatrix}$  являются тождественными.

Заметим, что свойства 5-7 позволяют установить наличие симметрий не только на множестве граничных вершин  $V_B(G)$ , но и на множестве граней  $Q_B(G) = \{q_i \in Q(G), i = \overline{1, n}: G_i = G \setminus q_i \text{ связан}\}$ . Здесь под  $G \setminus q_i$  понимаем граф без грани  $q_i$ , имеющей граничные вершины или граничные ребра графа  $G$ . Висячими будем называть грани  $q_i \in Q_B(G)$ , по крайней мере, две вершины которых имеют степень два. Висячие грани  $q_i, q_j$  называются эквивалентными относительно  $\Gamma(G)$ , если  $\exists \varphi \in \Gamma(G): \varphi q_i = q_j$ . Так как степени граничных вершин любой висячей грани из  $Q_B(G)$  принадлежат в  $s(G)$  некоторой  $(2, k)$ -подпоследовательности, то эквивалентность всех вершин, степени которых входят в  $s_1(2, k, G)$ , вершинам, степени которых входят в  $s_j(2, k, G)$ , означает эквивалентность соответствующих висячих граней  $q_i$  и  $q_j$ . Так, для графов, изображенных на рис. 3-5, грани, отмеченные звездочками, являются эквивалентными.

#### §4. Нахождение пересечений К-графов

Пересечением двух графов называется максимальный по включению подграф, изоморфно входящий как в первый граф, так и во второй [33]. При нахождении пересечений учитываются симметрии графов, что позволяет сократить время решения задач путем "отсечения" эквивалентных вариантов.

В настоящем разделе предлагается способ нахождения всех пересечений К-графов; выписывается условие изоморфного вхождения К-графов.

##### 4.1. Разбор К-графов.

Разбор графов [34,35] можно использовать как один из методов определения пересечений К-графов.

В общем виде под разбором графа понимается следующая последовательность операций: исходному графу  $G = (V, E, Q)$  по некоторому правилу ставится в соответствие определенный набор графов  $G_1, G_2, \dots, G_n$ , каждый из которых проще исходного. Каждому из полученных графов по этому же правилу ставится в соответствие новый набор графов и т.д. Процесс продолжается до тех пор, пока не будет выполнено некоторое правило остановки.

Отношение  $G_1$  проще  $G$  определим как  $G_1$  есть подграф  $G$  такой, что:

1)  $G_1 = G \setminus q_1$ , где  $q_1 \in Q_B(G)$ ,

2)  $G_1$  связан.

Конкретная последовательность операций разбора графа и фиксация правила остановки называется схемой разбора. Для описания схемы разбора графа  $G$  используется дерево разбора  $T = T(G)$ . Исходному графу  $G$  ставится в соответствие корневая вершина дерева; подграфам исходного графа соответствуют вершины дерева, смежные с корневой и т.д. Вершина дерева является висячей, если соответствующий ей подграф удовлетворяет условию остановки. В данном случае висячим вершинам дерева  $T$  будут соответствовать подграфы с числом граней, равным двум.

Высотой дерева  $T(G)$  называется расстояние между корневой вершиной и самой удаленной от нее висячей вершиной. Нетрудно показать, что высота дерева  $T(G)$  не превосходит  $n - 2$ , где  $n = |Q(G)|$  - число граней в графе  $G$ .

Множество подграфов, находящихся на расстоянии  $i$  от графа  $G$  (в метрике дерева  $T$ ), будем называть  $i$ -м слоем дерева разбора.

Пусть  $|Q_B(G)| = s$ . В частности, для КК-графов  $|Q_B(G)| = s = t$ , где  $t$  — есть число  $(2, k)$ -подпоследовательностей в  $S(G) \in \mathcal{S}_2(G)$ . Пусть грани  $q_i \in Q_B(G)$ ,  $i = \overline{1, s}$ , некоторым образом занумерованы и пусть  $G_i = G \setminus q_i$ . Тогда если после удаления грани  $q_i \in Q_B(G)$  смежные ей грани, не принадлежащие  $Q_B(G)$ , принадлежат множеству  $Q_B(G_i)$  (таких граней не более трех), то им приписываются номера  $s+1$ ,  $s+2$  и номер удаленной грани, при этом  $|Q_B(G_i)| - 2 \leq |Q_B(G)| \leq |Q_B(G_i)|$ ; в противном случае грань с номером  $i$  удаляется и  $|Q_B(G_i)| = |Q_B(G)| - 1$ . Рис. 6. иллюстрирует описанную выше процедуру.

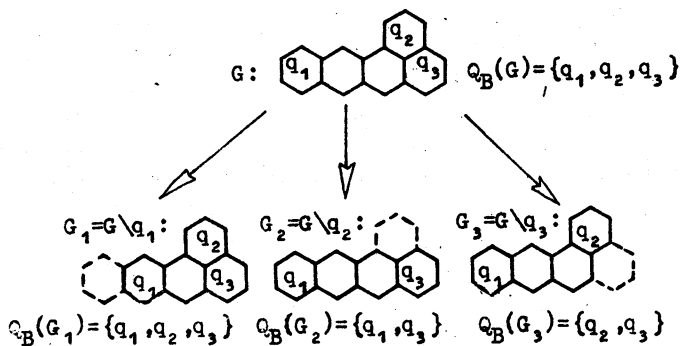


Рис. 6

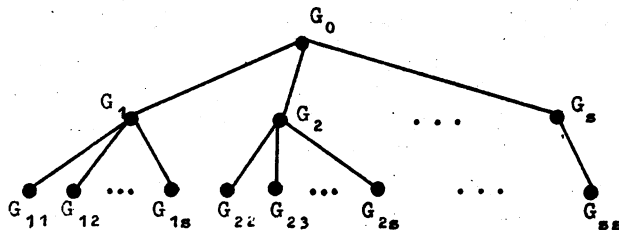


Рис. 7

Подграфы, получающиеся в результате разбора, будем помечать многокомпонентными индексами вида  $v = i_1 i_2 \dots i_k$ , где  $i_j = \overline{1, s}$  — числа, соответствующие номерам удаленных граней;  $1 \leq k \leq n-2$ . Исход-



ный граф  $G$  пометим индексом  $v=0$ . С учетом введенных обозначений процесс разбора можно представить в виде дерева, изображенного на рис.7. Пусть  $q_1, q_j \in Q_B(G)$ . Последовательное удаление граней  $q_1$ ,  $q_j$  и  $q_1$  из графа  $G$  дает один и тот же результат  $G_{1j} = G_{j1}$ . Естественно, в ходе разбора графа  $G$  в каждом  $i$ -м слое получаются только подграфы, число индексов которых в совокупности есть  $\binom{s+i-1}{i}$  - число сочетаний с повторениями из  $s$  элементов по  $i$  элементов, где  $1 \leq i \leq n-2$ , а  $s = |Q_B(G)|$ .

Таким образом, устраняется возможность получения в ходе разбора графа одинаковых подграфов.

Использование знаний о симметриях множества висящих граней множества  $Q_B(G)$  позволяет сократить число ветвей дерева  $T(G)$  и рассматривать только неизоморфные подграфы графа  $G$ .

Каждый граф  $G_p$  дерева  $T(G)$  задается своим каноническим представлением  $S^*(G_p)$  и для получения пересечений  $K$ -графов  $G$  и  $H$  достаточно найти все совпадающие канонические представления их подграфов. Тогда если  $S^*(G_p) = S^*(H_r)$ , то  $G_p \cong H_r$ ,  $G_p \subseteq G$ ,  $H_r \subseteq H$ .

Возможны другие способы поиска пересечений  $K$ -графов. В частности, на основе выделения клик в модульном произведении  $K$ -графов, определенном с учетом расстояний между парами их вершин [36].

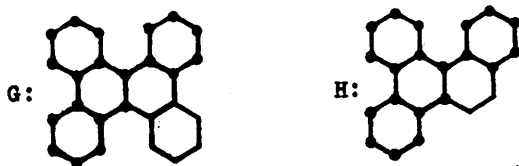
#### 4.2. Изоморфное вхождение $K$ -графов.

Распознавание изоморфного вхождения одного графа в другой есть частный случай задачи определения пересечений графов.

Одно из условий изоморфного вхождения  $K$ -графов дает следующее

**УТВЕРЖДЕНИЕ 6.** Пусть  $G, H \in K[u]$ ,  $S(G) = (s_i(2, k, G), i = \overline{1, t_G}) \in S_2(G)$ ,  $S(H) = (s_i(2, k, G), i = \overline{1, t_H}) \in S_2(H)$ , и пусть  $s(G, H) \subset S(G)$ ,  $s(G, H) \subset S(H)$  - некоторая общая подпоследовательность максимальной длины. Тогда если для всех  $i = \overline{1, t_G}$  либо  $s_i(2, k, G)$ , либо ее часть входит в  $s(G, H)$ , то  $G \subseteq H$ .

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** По условию утверждения для любого  $i = \overline{1, t_G}$  либо  $s_i(2, k, G)$ , либо ее часть входит в  $s(G, H)$ . Значит, по крайней мере,  $(t_G - 2)$  подпоследовательности  $s_i(2, k, G) \subset S(G)$  входят в  $s(G, H)$  полностью, а оставшиеся две частично. Это означает, что степени граничных вершин всех собственных граней  $K$ -графа  $G$  входят в  $s(G, H)$ , и поскольку  $s(G, H) \subset S(H)$ , то  $G \subseteq H$ .



$$s(G) = (22223322223332222332222333) \quad s(H) = (2222332222333222232233) \\ s(G, H) = (33222233222233322223)$$

Рис.8

Рис.8 иллюстрирует доказанное утверждение. Общей подпоследовательностью  $s(G, H)$  максимальной длины граничных степенных последовательностей графов  $G$  и  $H$  является последовательность степеней вершин, выделенных на рисунке жирными точками. Для  $s(G, H)$  выполняется условие утверждения и  $H \subseteq G$ .

### З а к л ю ч е н и е

Представление ката-конденсированных и пери-конденсированных молекулярных графов в виде граничной степенной последовательности позволяет решать задачи канонизации и распознавания изоморфизма графов с линейной трудоемкостью.

Показана возможность использования симметрий  $K$ -графов на множестве граничных вершин и висячих граней при нахождении пересечений и изоморфного вхождения.

Представление  $K$ -графов в виде граничной степенной последовательности является удобным для машинной обработки и может быть использовано в алгоритмах генерации  $K$ -графов с заданными свойствами.

### Л и т е р а т у р а

1. ХАРАРИ Ф. Теория графов. - М.: Мир, 1973. - 300 с.
2. БЕРЖ К. Теория графов и ее применение. - М.: ИЛ, 1962. - 311 с.
3. ЦВЕТКОВИЧ Д., ДУБ М., ЗАХС Х. Спектры графов. Теория и применение. - Киев: Наукова думка. 1984. - 383 с.

4. ХАРАРИ Ф. Комбинаторные задачи перечисления графов // Прикладная комбинаторная математика. - М.: Мир, 1968. - С.107-140.
5. ХАРАРИ Ф., ПАЛМЕР Э. Применение графов. - М.: Мир, 1977. - 324 с.
6. HARARY F. Graphical enumeration problems// Graph theory and theoretical physics.-London, 1967.-Chapter 1.-P.1-41.
7. ХАРАРИ Ф. Задачи перечисления графов // Успехи мат. наук, 1969. - Вып. 24, №5. - С. 208-212.
8. KLARNER D.A. Some results concerning polynominoes// Fibonacci Quarterly.-1965.-Vol.3.-P.9-20.
9. KLARNER D.A. Self growth problems// Can.J.Math.-1967.-Vol.19, N 4.-P.851-863.
10. BALABAN A.T., HARARY F. Enumeration and proposed nomenclature of benzenoid cata-condensed polycyclic aromatic hydrocarbons// Tetrahedron.-1968.-Vol.24.-P.2505-2516.
11. ГОЛОМБ С.В. Полимино. - М.: Мир, 1975. - 207 с.
12. HARARY F., READ R.C. The enumeration of tree-like polyhexes// Proc.Edinburgh Math.Soc., Ser.11. - 1970. - Vol.17, N 1.-P.1-15.
13. LUNNON W.F. Counting hexagonal and trigonal polyminoes// Graph Theory and computing, Ed.by R.C.Read.- New York, 1972. - P.87-100.
14. TRINAJSTIC N., JERICEVIC Z., KNOP J.V., MULLER W.R., SZYMANSKI K. Computer generation of isomeric structures// Pure Appl. Chem.-1983.-Vol.55. - P.379-390.
15. KNOP J.V., MULLER W.R., SZYMANSKI K., TRINAJSTIC N. Computer generation of certain classes of molecules.- Zagreb: SKITH/Kemija u industrija.-1985.- 166 p.
16. SACHS H. Perfect matching in hexagonal systems// Combinatorica.-1984.-Vol.4.- P.89-99.
17. КОСТОЧКА В.А. Критерий существования совершенных паросчетаний в шестиугольных системах// Graphen und Netwerke-Theorie und Anwendungen; 30 Intern.Wiss.Koll.TH Ilmenau.-1985.-P.49-52.
18. GUTMAN I. Covering hexagonal systems with hexagons//Proc. Fourth Yugoslav Seminar on Graph Theory, Novi Sad, 15-16 Apr., 1983.-Novi Sad, 1984. - P.151-160.
19. ПЕТРОВ А.А., БАЛЫН Х.В., ТРОЛЕНКО А.Т. Органическая химия. - М.: Высшая школа, 1981. - 592 с.
20. DZONOVA-JERMAN-BLAZIC B., TRINAJSTIC N. Computer-aided enumeration of the Kekule structures in conjugated hydrocarbons// Computer&Chemistry.- 1982.-Vol.6,N 3.- P.121-132.
21. PAULING L. The nature of the chemical bond.- Ithaca, New York: Cornell Univ.Press, 1940.- 450 p.
22. WHEELAND G.W. Resonance in organic chemistry.- New York: Wiley London, Chapman & Hall, 1955. - 846 p.
23. HERNDON W.C. Thermal reactivities of polynuclear aromatic hydrocarbons and alkyl derivatives//Tetrahedron.-1982.- Vol.38, N 10.- P.1389-1396.

24. KLEIN G. Valence bond theory for conjugated hydrocarbons // Pure & Appl. Chem. - 1983. - Vol. 55, N 2. - P. 299-306.
25. ГАРДНЕР М. Математические досуги. - М.: Мир, 1972. - 496 с.
26. ГАРДНЕР М. Математические новеллы. - М.: Мир, 1974. - 454 с.
27. МЯШЕВСКАЯ Л.В., СКОРОБОГАТОВ В.А. Исследование молекулярных графов полициклических соединений // Тезисы доклада на УП Всесоюз. конф. по использованию вычислительных машин в химических исследованиях и спектроскопии молекул. - Рига, 1986. - С. 205.
28. АЛЕКСАНДРОВ П.С. Комбинаторная топология. - М.: ОГИЗ, 1947. - 660 с.
29. СКОРОБОГАТОВ В.А. Относительные разбиения и слои графов // Вопросы обработки информации при проектировании систем. Новосибирск, 1977. - Вып. 69: Вычислительные системы. - С. 3-10.
30. BALABAN A.T. Configurations of annulenes // Tetrahedron. - 1971. - Vol. 27, N 23-24. - P. 6115.
31. ВЕДУЦ Т.О., ГЕДБАНДОВ Э.А. Автоматизированные информационные системы для химии. - М.: Наука, 1974. - 305 с.
32. СКОРОБОГАТОВ В.А., ХВОРОСТОВ И.В. Методы и алгоритмы анализа симметрий графов // Алгоритмы анализа структурной информации. - Новосибирск, 1984. - Вып. 103: Вычислительные системы. - С. 6-26.
33. LEVI G.A. Note on the derivation of maximal common subgraphs of two directed or undirected graphs // Colcolo. - 1972. - N 19. - P. 341-352.
34. БЕССОНОВ Ю.Е., СКОРОБОГАТОВ В.А. О рекурсивном разборе графов // Алгоритмические основы обработки структурной информации. - Новосибирск, 1981. - Вып. 85: Вычислительные системы. - С. 3-20.
35. БЕССОНОВ Ю.Е., СКОРОБОГАТОВ В.А. Об одном семействе схем рекурсивного разбора графов // Машинные методы обнаружения закономерностей анализа структур и проектирования. - Новосибирск, 1982. - Вып. 92: Вычислительные системы. - С. 3-43.
36. БЕССОНОВ Ю.Е. Определение пересечений геометрических графов с помощью операции модульного произведения // Настоящий сборник. - С. 43-48.

Поступила в ред.-изд. отд.  
13 апреля 1987 года