

УДК 519.17:547.64

ИЗУЧЕНИЕ МЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК  
КАТА-КОНДЕНСИРОВАННЫХ ПОЛИБЕНЗОЛОВ

В.А.Скоробогатов, Е.В.Мжельская, Н.М.Мейрманова

В в е д е н и е

Топологические индексы молекулярных структур используются для классификации и идентификации химических соединений, исследования корреляций структура-активность при изучении свойств биологически активных соединений и корреляций структура-свойство при изучении физико-химических свойств соединений [1-3]. Метрические характеристики молекулярных графов как топологические индексы применяются для изучения вопросов эквивалентности графов или их структурного подобия [4], при исследовании зависимостей структура-свойство [5-7]. В качестве молекулярного топологического индекса, называемого числом Винера [8], широко используется дистанция графа. Изучению этой характеристики посвящено большое число работ [9-16]. Изменение дистанции графа при структурных преобразованиях полициклических соединений изучалось в [9-11, 13, 14]. В [5] рассматривались вопросы установления связей между значениями дистанции графа и свойствами химических соединений, в частности для полициклических бензоидных углеводородов, молекулярные графы которых в [17,18] называются К-графами. Вычислению дистанции К-графов определенного типа посвящены работы [15,16]. Для молекулярных графов неразветвленных ката-конденсированных бензоидных углеводородов в

[16] показано, что значение их дистанций не превосходит величины  $\frac{1}{3}(16h^3 + 36h^2 + 26h + 3)$ , где  $h$  - число циклов. Свойства дистанций  $K$ -графов и аналитические выражения для некоторых гомологических серий полициклических соединений обсуждались в [4]. Там же изучен вопрос о совпадении дистанций молекулярных графов неразветвленных ката-конденсированных бензоидных углеводородов с числом циклов до 9.

Для разветвленных ката-конденсированных бензоидных углеводородов значения дистанций их графов, а также другие метрические характеристики [19] в перечисленных выше работах не изучались.

В настоящей работе рассматриваются метрические характеристики молекулярных графов разветвленных и неразветвленных ката-конденсированных бензоидных углеводородов, которые называют  $h$ - $KK[6]$ -графами, с целью использования их для идентификации и упорядочения структур. Изучается возможность применения для

Т а б л и ц а 1

Эксцентриситетные характеристики графа [19]

Обозначение	Наименование	Выражения для вычисления
$e(v)$	эксцентриситет вершины	$e(v) = \max_{u \in V(G)} d(u, v)$
$r(G)$	радиус графа	$r(G) = \min_{v \in V(G)} e(v)$
$d(G)$	диаметр графа	$d(G) = \max_{v \in V(G)} e(v)$
$e(G)$	эксцентриситет графа	$e(G) = \sum_{v \in V(G)} e(v)$

Дистанционные характеристики графа [19]

Обозначение	Наименование	Выражения для вычисления
$D(v)$	дистанция вершины (центральность вершины)	$D(v) = \sum_{u \in V(G)} d(u, v)$
$D(G)$	дистанция графа (интеграция графа)	$D(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} D(v)$
$var(G)$	вариация графа	$var(G) = \max_{v \in V(G)} \{ D(v) - \min_{v \in V(G)} D(v) \}$
$\Delta G^*$	дистанционное отклонение графа (централизация)	$\Delta G^* = 2D(G) - p \cdot \min_{v \in V(G)} D(v)$
$\Delta D(G)$	среднее дистанционное отклонение графа	$\Delta D(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)}   D(v) - \frac{2D(G)}{p}  $
$m_2^*(G)$	дисперсия графа	$m_2^*(G) = \min_{v \in V(G)} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{u \in V(G)} [d(u, v)]^2 \right\}$

этих целей сравнительно малоизвестного химикам метрического инварианта графов - матрицы слоев [20,21]. Приводится алгоритм идентификации h-KK[6]-графов по их метрическим характеристикам и матрицам слоев.

Для всех  $h$ -КК[6]-графов с числом циклов  $3 \leq h \leq 8$  (изображения графов представлены в приложении 1) найдены значения их метрических характеристик, формулы для вычисления которых приведены в табл. 1 и 2\* [19]. В тексте и в приложении 2 приведены таблицы классов  $h$ -КК[6]-графов с одинаковыми значениями различных характеристик для  $3 \leq h \leq 7$ . Во всех таблицах под чертой для каждого класса приведены списки номеров графов (соответствующие нумерации в приложении 1) с данным значением характеристики.

Метрические характеристики  $h$ -КК[6]-графов с числом циклов  $h = 8$ , а также полный перечень всех метрических характеристик для  $h \leq 7$  не представляется возможным опубликовать ввиду их большого объема.

#### §1. Использование метрических характеристик для идентификации и упорядочения графов

Рассмотрим возможность применения метрических характеристик  $K$ -графов как топологических индексов для идентификации и упорядочения графов.

В качестве топологического индекса, позволяющего идентифицировать  $h$ -КК[6]-графы с числом циклов  $h = 3, 4, 5$ , можно рассматривать среднее дистанционное отклонение графа  $\Delta D(G)$ . Как видно из табл. 10, 11, 12 (приложение 2), значение этой характеристики для всех графов различно и графы образуют единичные классы.

Во всех таблицах классы графов упорядочены в соответствии с убыванием значений характеристик, что позволяет легко проводить при необходимости изучение зависимостей между значением характеристик и свойствами соединений.

---

\*) Используемые в таблицах обозначения:  $V(G)$  - множество вершин графа  $G$ ;  $p = |V(G)|$  - порядок графа  $G$ ;  $d(u, v)$  - длина кратчайшей цепи между вершинами  $u$  и  $v$  в графе.

Для идентификации 6-КК[6]-графов характеристики  $\Delta D(G)$  оказывается недостаточно: графы № 14 и 15 этой характеристикой не различаются и попадают в один класс (табл. 13, приложение 2). Введение дополнительной характеристики, например дистанции графа  $D(G)$ , позволяет идентифицировать все 6-КК[6]-графы. Значение дистанций графов № 14 и 15 соответственно равны  $D(14) = 1557$  и  $D(15) = 1565$  (табл. 13, приложение 2).

Однако использование двух метрических характеристик  $\Delta D(G)$  и  $D(G)$  для 7-КК[6]-графов не позволяет идентифицировать их однозначно. В один класс попадают графы № 75 и 103, для которых  $\Delta D(G) = 24.284$ ,  $D(G) = 2239$ , и графы № 58 и 100, для которых значения характеристик равны  $\Delta D(G) = 22.133$ ,  $D(G) = 2055$  (табл. 14, приложение 2). Для идентификации этих структур необходима еще одна характеристика. Такой характеристикой может служить, например, эксцентриситет графа  $e(G)$ . Значения эксцентриситета для рассматриваемых графов следующие:

№ графа	75	103	58	100
$e(G)$	302	300	261	269

Таким образом, три метрические характеристики  $\Delta D(G)$ ,  $D(G)$ ,  $e(G)$  идентифицируют 7-КК[6]-графы и упорядочивают их в соответствии с лексикографическим убыванием вектора  $(\Delta D(G), D(G), e(G))$ .

Для 8-КК[6]-графов трех характеристик оказывается недостаточно. Имеются примеры графов, для которых все три характеристики одинаковы. Эти графы идентифицируются четвертой характеристикой-дисперсией  $\sigma_2^*(G)$ . Однако для идентификации 8-КК[6]-графов № 129, 157, 233 и этой характеристики оказывается недостаточно. Более того, указанные графы не идентифицируются всей совокупностью метрических характеристик, представленных в табл. 1 и 2.

Следует ожидать, что для  $h$ -КК[5]-графов с числом циклов  $h \leq 9$  рассматриваемый набор метрических характеристик также окажется недостаточным для их однозначного распознавания. Поэтому имеет смысл найти характеристику, которой данные графы распознавались бы однозначно. Для  $h$ -КК[6]-графов такой характеристикой является матрица слоев и ее параметры [21], возможность применения которых для идентификации молекулярных графов полициклических бензоидных углеводородов рассматривается в следующем параграфе.

Таким образом, для всех  $h$ -КК[6]-графов,  $3 \leq h \leq 8$ , известны идентифицирующие их метрические характеристики. В табл. 3 для  $h$ -КК[6]-графов,  $3 \leq h \leq 8$ , сведены данные о характеристиках, которыми рассматриваемые классы графов идентифицируются; указаны номера графов, не различаемые данной характеристикой, и приводится характеристика, идентифицирующая весь класс графов.

На основе этих данных легко построить алгоритм идентификации  $h$ -КК[6]-графов,  $3 \leq h \leq 8$ .

Имеются также необходимые средства для дальнейшего изучения метрических свойств и метрических характеристик  $h$ -КК[6]-графов с достаточно большими значениями  $h$  с целью создания практического идентифицирующего алгоритма. Известны алгоритмы генерации  $h$ -КК[6]-графов [17,22], а также методика нахождения и исследования метрических характеристик, реализованная в виде комплекса программ МЕТрического Анализа Молекулярных Графов (МЕТАН-МГ) [23].

Заметим, что метрические характеристики, идентифицирующие  $h$ -КК[6]-графы, позволяют также проводить упорядочение соответствующих им химических структур в порядке убывания (возрастания) значений характеристик. Это может оказаться полезным при изучении зависимостей типа структура-свойство.

Метрические характеристики, идентифицирующие  
 $h$ - $KK[6]$ -графы,  $3 \leq h \leq 8$

$h$	Характеристики	Номера графов, не идентифицируемых характеристиками	Дополнительная характеристика
3	$\Delta D(G)$	-	-
4	$\Delta D(G)$	-	-
5	$\Delta D(G)$	-	-
6	$\Delta D(G)$	14, 15	$D(G)$
7	$\Delta D(G), D(G)$	75, 103; 58, 100	$e(G)$
8	$\Delta D(G), D(G), e(G)$	6, 214, 246, 287, 245, 284, 322, 356; 50, 326, 388	$m_2^*(G)$
	$\Delta D(G), D(G), e(G), m_2^*(G)$	129, 157, 233	матрица слоев $\lambda(G)$

§2. Идентификация и упорядочение  $h$ - $KK[6]$ -графов  
на основе матрицы слоев

Приведем некоторые определения из [21].

Относительным разбиением  $\hat{V}(v)$  множества вершин графа  $G(V, E)$  по отношению к  $v \in V$  называется упорядоченное множество классов  $V_j(v)$  такое, что  $\hat{V}(v) = \{V_j(v) \mid j = \overline{0, e(v)}, u \in V_j \leftrightarrow d(v, u) = j\}$ . Класс  $V_j(v)$  называется  $j$ -слоем графа по отношению к  $v$ ,  $V_0 = \{v\}$ .

В разбиении графа  $G$ , приведенном на рис.1, по отношению к вершине 5 выделяются слои  $V_0(5) = \{5\}$ ,  $V_1(5) = \{4, 6, 10\}$ ,  $V_2(5) = \{1, 3, 7, 9\}$ ,  $V_3(5) = \{2, 8\}$ .

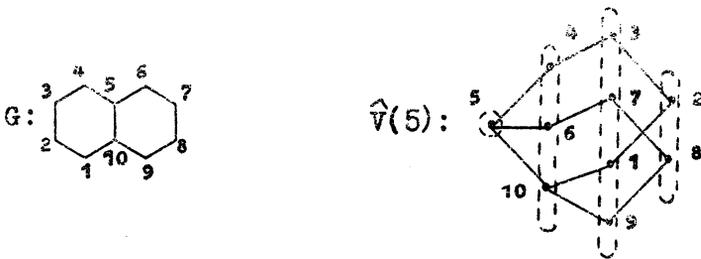


Рис. 1

Множеству относительных разбиений поставим в соответствие матрицу слоев  $\lambda^n(G) = \|\lambda_{ij}\|$ ,  $i = \overline{1, C_p^n}$ ,  $j = \overline{1, d(G)}$ , где  $d(G)$  - диаметр графа  $G$ , таким образом, что  $\lambda_{ij}$  равно числу вершин в  $j$ -слое разбиения по отношению к  $i$ -му множеству  $V_i^0$ ,  $|V_i^0| = n$ , т.е. разбиение  $\hat{G}(V_i^0)$ . Если  $V_j(V_i^0) = \emptyset$ , то  $\lambda_{ij} = \emptyset$ .

Число ненулевых элементов в строке  $\lambda^n(G)$  называется длиной строки. При  $n = 1$  матрица  $\lambda^1(G)$ , или просто  $\lambda(G)$ , называется одновершинной.

Если упорядочить строки  $\lambda(G)$  по уменьшению их длин, а затем упорядочить строки одинаковой длины лексикографически, то получим каноническую  $\lambda(G)$ -матрицу.

Одновершинная матрица слоев обладает следующими свойствами.

Длина строки  $\lambda_G(v)$  канонической матрицы слоев  $\lambda(G)$  равна эксцентриситету вершины  $e(v)$ . Длина последней строки равна радиусу. Первый столбец в одновершинной матрице слоев образует степенную последовательность.

В [21] показано, что  $G \simeq H \Rightarrow \lambda(G) = \lambda(H)$ ;  $\lambda(G) = \lambda(H) \not\Rightarrow G \simeq H$ , т.е. матрицы слоев не характеризуют графы с точностью до изоморфизма.

В матрице слоев могут содержаться одинаковые строки. Часть матрицы слоев, состоящую из всех попарно различных строк, называют  $l$ -спектром графа.

Очевидно, что граф, у которого  $l$ -спектр совпадает с матрицей слоев  $l(G) = \lambda(G)$ , не содержит симметрий.

В [25] вводится понятие изометричности графов. Говорят, что  $H$  изометричен из  $G : G \sim H$  тогда и только тогда, когда для любой вершины  $v \in V(G)$  существует однозначное отображение  $\varphi : V(G) \xrightarrow{\text{на}} V(H)$  такое, что для любых вершин  $v, u \in V(G)$  сохраняются расстояния:  $d(u, v) = d(\varphi_u, \varphi_v)$ ;  $\varphi_u, \varphi_v \in V(H)$ . Если  $G \sim H$  и  $H \sim G$ , то  $G \sim H$ , т.е. графы изометричны.

Критерием [20] изометричности графов является совпадение их  $l$ -спектров:  $G \sim H \Leftrightarrow l(G) = l(H)$ . Графы, у которых совпадают матрицы слоев, являются более похожими, чем изометричные графы. Они имеют одинаковыми все метрические характеристики.

Введем следующие обозначения:

- $l$  - число строк в  $l$ -спектре графа  $G$  ;
- $l_j$  - число строк одинаковой длины  $e(i)$  в группе  $L_j$   $l$ -спектра,  $|L_j| = l_j$ ,  $j = \overline{1, n}$ ;
- $n$  - число групп  $L_j$ ;  $n = d - r + 1$  ;
- $L = (l_1, \dots, l_n)$  -  $L$ -вектор значений  $l_j$  ;
- $a_{ij}$  - число вершин, имеющих одну и ту же  $j$ -строку длины  $e(i)$ ,  $i = \overline{1, l}$ ,  $j = \overline{1, n}$  ;
- $b_j$  - число вершин в группе  $L_j$ , имеющих строку одной и той же длины,  $b_j = \sum_i a_{ij} \cdot l_j = l_j \cdot \sum_i a_{ij}$  ;
- $B = (b_1, \dots, b_n)$  -  $B$ -вектор значений  $b_j$  .

На рис. 2 приведено схематическое изображение  $\lambda$ -матрицы с учетом введенных обозначений.

Вектор  $Z(G) = \{d; r; l; L; B\}$  будем называть  $Z$ -вектором графа  $G$  или  $Z$ -характеристикой. Например, граф  $G$ ,

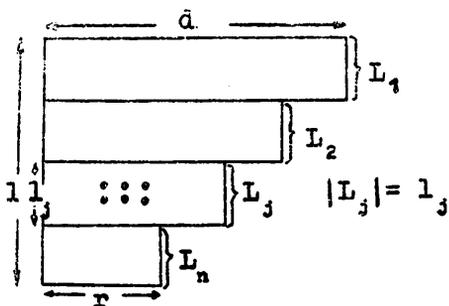
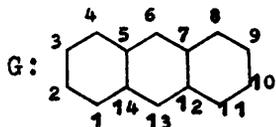
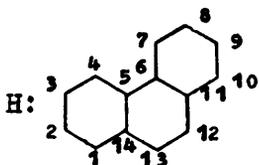


Рис. 2

изображенный на рис. 3, имеет  $Z$ -вектор, равный  $Z(G) = \{ 7; 4; 4; (1,1,1,1); (4,4,4,2) \}$ ;  $Z$ -вектор графа  $H$  равен  $Z(H) = \{ 7; 4; 6; (1,2,2,1); (2,4,6,2) \}$ . Два графа  $G$  и  $H$  будем называть  $Z$ -эквивалентными, если их  $Z$ -векторы совпадают:  $Z(G) = Z(H) \Rightarrow G \stackrel{Z}{\sim} H$ .



$$\lambda(G) = \left\| \begin{array}{cccccccc} 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & 2 & 2 & 1 \\ 3 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 5 & 2 \end{array} \right\| \begin{array}{l} 2,3,9,10 \\ 1,4,8,11 \\ 5,7,12,14 \\ 6,13 \end{array}$$



$$\lambda(H) = \left\| \begin{array}{cccccccc} 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 3 & 3 & 1 \\ 3 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 4 & 3 & 1 \\ 3 & 5 & 4 & 1 \end{array} \right\| \begin{array}{l} 2,9 \\ 1,10 \\ 3,8 \\ 11,14 \\ 4,7,12,13 \\ 5,6 \end{array}$$

Рис. 3

Для класса ката-конденсированных бензоидных графов, или  $h$ - $KK[6]$ -графов, с числом циклов  $h$ ,  $3 \leq h \leq 8$ , были найдены матрицы слоев и их  $Z$ -характеристики. Установлено, что в этом классе графов не содержится изометричных графов. Матрица слоев, как инвариант на данном множестве графов, не вырождается и служит для них однозначной характеристикой.

Не известно, существуют ли изометричные  $h$ - $KK[6]$ -графы для  $h = 9, 11$ . Для  $h = 10$  и  $h = 14$  А.А.Добрынин построил при-

меры графов с совпадающими матрицами слоев. На рис. 4 приведены такие графы для  $h = 10$ .

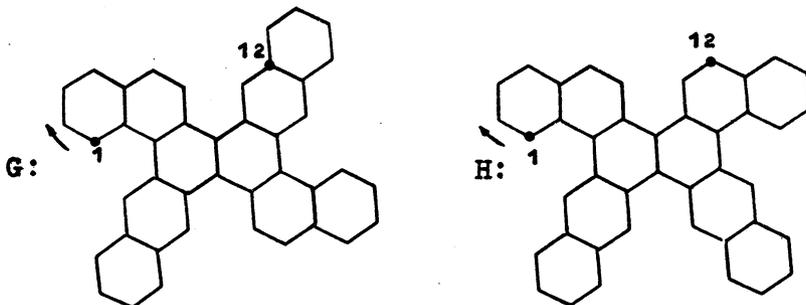


Рис. 4

Таким образом, если для  $h = 9, 11$  не существует изометричных графов, то матрица слоев может применяться для их идентификации.

Заметим, что в случае равенства матриц слоев однозначность идентификации может быть достигнута применением дополнительной канонизации матриц по их степенным последовательностям.

Матрицу слоев  $\lambda(G)$   $h$ -КК[6]-графа  $G$  будем называть  $\mathbb{B}$ -канонической и обозначать через  $\lambda_{\mathbb{B}}(G)$ , если ее строки переупорядочены таким образом, что первый столбец является лексикографически минимальным. По определению  $\lambda$ -матрицы нумерация ее строк совпадает с канонической нумерацией вершин в графе, а первый столбец образует каноническую последовательность, единственным образом представляющую  $h$ -КК[6]-граф [18]. Для графов  $G$  и  $H$ , изображенных на рис. 4, нумерация вершин соответствует канонической (стрелкой указано направление обхода), и первые столбцы в  $\lambda_{\mathbb{B}}$ -матрице различаются, начиная с двенадцатой строки.

Для характеристики различающих свойств  $\mathbb{Z}$ -спектра  $\lambda$ -матрицы в более общем случае приведем данные из [26] по ис- следованию  $p$ -кубов. Средняя чувствительность  $\mathbb{Z}$ -спектра по  $p$ -кубам,  $8 \leq p \leq 18$ , будет  $s = 0.6078$ .

Т а б л и ц а 4

Таблица  $\mathbb{Z}$ -характеристик  $h$ -КК[6]-графов  
и их  $\mathbb{Z}$ -порядки,  $3 \leq h \leq 5$

$h$	№ гра- фа	$\mathbb{Z}$ -характеристика	$\mathbb{Z}$ -по- рядок
3	1	(7;4; 4;(1,1,1,1); (4,4,4,2))	2
	2	(7;4;6; (1,2,2,1); (2,4,6,2))	1
4	1	(7,5,3,(1,1,1), (6,6,6))	5
	2	(9,5,5,(1,1,1,1) (4,4,4,4,4))	3
	3	(9,5,9,(1,2,2,2) (2,4,4,4,4))	2
	4	(9,5,14,(1,3,3,4,3), (2,4,5,4,3))	1
	5	(8,4,9,(1,3,2,2,1), (2,6,6,3,1))	4
5	1	(9,5,11,(2,3,3,2,1), (4,6,6,4,2))	11
	2	(11,6,6,(1,1,1,1,1,1), (4,4,4,4,4,2))	6
	3	(11,6,11,(1,2,2,2,3,1), (2,4,4,4,6,2))	3
	4	(11,6,17,(1,3,3,4,4,2), (2,4,4,4,5,3))	1
	5	(11,6,11,(1,2,2,2,2,2), (2,4,4,4,4,4))	4
	6	(9,5,14,(2,3,4,3,2), (2,5,7,5,3))	10
	7	(11,6,11,(1,2,2,2,2,2), (2,4,4,4,4,4))	5
	8	(11,6,17,(1,3,3,4,3,3), (2,4,5,4,4,3))	2
	9	(10,5,12,(1,3,3,2,2,1), (2,6,6,4,3,1))	9
	10	(10,5,21,(2,4,4,5,4,1), (2,5,5,5,4,1))	7
	11	(10,5,20,(2,5,4,5,3,1), (2,5,5,6,3,1))	8
	12	(9,5,9,(1,3,2,2,1), (2,6,8,4,2))	12

Множества  $Z$ -векторов и матриц слоев позволяют установить на множестве  $h$ -КК[6]-графов так называемый  $Z$ -порядок. Для такого упорядочения можно принять следующий принцип. Меньший номер в списке соответствует графу, имеющему лексикографически больший  $Z$ -вектор. Если графы являются  $Z$ -эквивалентными, то меньший номер будет у графа с лексикографически большей первой несопадающей строкой в  $\lambda$ -матрице.

Как видно из табл. 4, впервые  $Z$ -эквивалентные графы появляются среди 5-КК[6]-графов, это №7 и 5. На рис. 5 приведены их матрицы слоев. Первая пара несопадающих строк отмечена чертой. Номера графов в таблице соответствуют их нумерации в приложении 1. В последнем столбце таблицы приведен  $Z$ -порядок графов в соответствии с описанными выше принципами упорядочения.

$$\lambda(5) = \begin{array}{|c|} \hline 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 2 & 2 & 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 4 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 4 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 5 & 4 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 4 & 4 & 3 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 5 & 5 & 3 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 5 & 5 & 3 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 5 & 5 & 4 & 3 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 5 & 6 & 4 & 1 \\ \hline \end{array} \quad \lambda(7) = \begin{array}{|c|} \hline 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 2 & 2 & 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 4 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 4 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 5 & 4 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 4 & 3 & 2 & 3 & 3 & 1 \\ \hline 3 & 5 & 5 & 3 & 2 & 2 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 4 & 4 & 4 & 3 & 1 \\ \hline 3 & 4 & 4 & 5 & 4 & 1 \\ \hline 2 & 4 & 6 & 5 & 3 & 1 \\ \hline \end{array}$$

Рис. 5

В табл. 5 приведены списки  $h$ -КК[6]-графов,  $h = 6, 7$ , в соответствии с их  $Z$ -порядком. Для  $h = 6$  номера графов выписаны в строчку (десять номеров в строке); для  $h = 7$  номера графов выписаны в столбец (по десять номеров). Номера  $Z$ -эквивалентных графов отмечены чертой.

Упорядочение  $h$ -КК[6]-графов на основе  
матрицы слоев,  $h = 6, 7$

$h$	№ графов											
6	20, 12, 15, 7, 24, 21, <u>14, 23, 5</u> , 4 <u>26, 27</u> , 29, 30, 33, 32, 9, 25, 10, 8 22, 35, 34, 36, 6, 11, 13, 3, 2, 28 16, 31, 17, 18, 19, 1.											
7	73	74	79	85	108	75	115	10	70	113	3	101
	48	67	80	94	107	87	66	47	14	57	58	42
	68	9	82	97	34	110	116	12	54	96	59	43
	37	45	84	105	78	111	114	23	55	83	16	52
	64	39	81	95	35	90	109	6	28	100	72	2
	17	65	50	98	18	89	8	86	71	20	4	1
	44	76	61	104	16	69	46	24	118	25	41	
	40	13	51	26	38	31	62	22	30	106	32	56
	77	15	29	21	5	88	49	103	27	91	102	33
	11	7	19	60	36	117	93	99	63	112	92	

§3. Структурное подобие графов  
на основе вектора-инварианта,  
определяемого из матрицы слоев

Рассмотрим вектор

$$A(G) = \{ a_j \mid a_j = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d \lambda_{1j} \}.$$

Очевидно, что  $a_1 = q(G) = |E(G)|$ .

Пусть  $a_j(G)$  и  $a_j(H)$  суть  $j$ -координаты графов  $G$  и  $H$  в  $d_{\max}$ -мерном евклидовом пространстве, где  $d_{\max} = \max\{d(G), d(H)\}$ . Тогда евклидово расстояние между графами  $G$  и  $H$  в этом пространстве определяется по формуле:

$$\Delta_\lambda(G, H) = \sqrt{\sum_{j=1}^{d_{\max}} [a_j(G) - a_j(H)]^2} \quad (1)$$

Похожая на  $A(G)$  характеристика графов рассматривалась Рандичем с соавторами в [26] с целью исследования свойств активности химических соединений. Характеристика Рандича, обозначим ее  $R(G)$ , основана на цепных свойствах графа и может быть получена суммированием столбцов цепной матрицы слоев графа -  $\tau$ -матрицы [27]. Тогда расстояние  $\Delta_\tau(G, H)$  между графами определяется по формуле, аналогичной (1).

Содержательно характеристики  $A(G)$  и  $R(G)$  близки:  $R(G)$  характеризует множество всех цепей всех длин между всеми парами вершин молекулярного графа;  $A(G)$  характеризует множество мощностей всех относительных слоев в графе или, другими словами, описывает количественное распределение вершин в графе, находящихся на всех возможных расстояниях от всех вершин. Как видно,  $A(G)$  является некоторым приближением  $R(G)$ .

Существенным является то, что сложность вычисления этих характеристик значительно различается. Так, для  $h$ -КК[6]-графов характеристика  $R(G)$  имеет экспоненциальную сложность [27]. Сложность вычисления характеристики  $A(G)$  растет как квадратичная функция с ростом  $h$ , так как можно считать, что сложность получения  $A(G)$  определяется сложностью вычисления  $\lambda(G)$ , которая требует  $p \cdot q$  операций. Для  $h$ -КК[6]-графов  $p = 4h + 2$ ,  $q = 5h + 1$  (см. [18]), и, следовательно, сложность вычисления  $A(G)$  будет расти пропорционально  $h^2$ .

Экспериментальные средние времена вычисления  $A(G)$  и  $R(G)$  на ЭВМ с быстродействием 100 тыс.оп/сек (с учетом времени вывода результатов на внешние устройства) приведены в табл. 6.

Т а б л и ц а 6

Экспериментальные средние времена вычисления  
 $A(G)$  и  $R(G)$

Классы графов	$R(G)$	$A(G)$
3-КК[6]	12"	4"
4-КК[6]	32"	9"
5-КК[6]	102"	12"
6-КК[6]	282"	19"

Для  $h$ -КК[6]-графов,  $3 \leq h \leq 7$ , были построены все  $A(G)$  -характеристики и матрицы расстояний между всеми парами графов. Применяя методы таксономии [28] к этим матрицам, можно получить множество структурно-подобных графов, причем количественные критерии подобия будут определяться параметрами применяемых алгоритмов.

Приведем один способ нахождения таксонов на основе использования графов сравнения и нахождения в них клик.

Пусть  $M_\lambda(\Gamma)$  - матрица расстояний для множества графов  $\Gamma$  на основе  $A(G)$ -характеристики. Выберем некоторый порог  $\gamma$  значения  $\Delta_\lambda(G, H)$  расстояния между графами и построим граф (назовем его  $\lambda_\gamma$ -граф) следующим образом. Вершинам  $\lambda_\gamma$ -графа соответствуют графы  $\Gamma$ , и две вершины  $G$  и  $H$  смежны, если в  $M_\lambda(\Gamma)$  имеет место  $\Delta(G, H) \leq \gamma$ . Подобными графами будем считать такие, для которых в  $\lambda_\gamma$ -графе все соответствующие вершины попарно смежны, т.е. образуют клику. Таким образом, нахождение структурно-подобных графов сводится к нахождению клик в  $\lambda_\gamma$ -графе,

который также называется графом сравнения или сравнимости. Этот метод имеет особенности. Некоторые вершины  $\lambda_\gamma$ -графа могут принадлежать более чем одной клике. Если это обстоятельство является нежелательным, то такие вершины можно исключить из всех клик, кроме одной, учитывая, например, веса клик как средние веса их ребер и упорядочивая клики по этим весам. Вершину можно оставлять в той клике, в которой такой вес меньше, что говорит о большей степени подобия между соответствующими графами.

Такие вычисления были сделаны для h-KK[6]-графов,  $h \leq 7$ , при этом порог  $\gamma$  выбирался из соображений  $\gamma \approx \frac{\Delta_{\max}(G, H)}{2}$ ,

где  $\Delta_{\max}(G, H)$  - максимальное значение расстояний между графами  $G$  и  $H$  по всем парам графов. Полученные результаты для 5-KK[6]-графов приведены в табл. 7. Отмеченные структуры исключены из таксонов в соответствии с описанным выше принципом.

Из табл. 7 можно сделать вывод, что структуры 4, 5, 7 об-ладают наиболее сильным сходством.

Аналогичную процедуру таксономии можно рассматривать для матрицы расстояний  $M_\tau(\Gamma)$ , полученной на основе  $R(G)$ -характеристик графов, а также таксономию для матриц  $M_\lambda(\Gamma)$  и  $M_\tau(\Gamma)$  одновременно. В табл. 8 и 9 приведен состав соответствующих таксонов, полученных для 5-KK[6]-графов.

Матрицы расстояний  $M_\lambda(\Gamma)$  и  $M_\tau(\Gamma)$  можно использовать для упорядочения графов по отношению к некоторому фиксированному. Граф № 4 по  $M_\lambda(\Gamma)$  порождает следующий порядок: 4, 7, 3, 5, 8, 9, 2, 10, 11, 1, 12, 6; графы №3 и 5, 10 и 11 по матрице расстояний неразличимы.

Сравнивая этот порядок с  $Z$ -порядком, можно увидеть, что последовательность номеров вершин делится на три группы: 4, 7, 3, 5, 8; 9, 2, 10, 11; 1, 12, 6. Порядок этих групп сохраняется в обоих случаях.

Т а б л и ц а 7

Таксономия 5-КК[6]-графов по  $A(G)$ 

№ таксона	№ графов	Вес клики
1	4,5,7	2.11
2	3,4*,7*,8	2.73
3	1,12	3,16
4	10,11	3.16
5	2,3*,8*	3.91
6	3*,7*,9	4.58
7	3*,8*,9*	4.64
8	7*,8*,9*	4.74
9	6,12*	5.29
10	9,11*	5.29

Т а б л и ц а 8

Таксономия 5-КК[6]-графов по  $R(G)$ 

№ таксона	№ графов	Вес клики
1	7,9,4	7.74
2	7*,9*,3	9,21
3	8,9*,3*	9.61
4	1,6	10.68
5	7*,9*,11	11,85
6	5,10	12,33
7	5*,4*	12.37
8	11*,12	13.23

Таксономия 5-КК[6]-графов по  $A(G)$  и  $R(G)$ 

№ таксона	№ графов	Вес клики
1	4,7	7.28
2	3,8	10.84
3	7*,9	13.31
4	3*,7*,9*	13.79
5	3*,8*,9*	14.25

Матрица  $M_{\Gamma}$  порождает для графа №4 следующий порядок:  
4,7,9,5,3,10,11,8,12,2,1,6.

## З а к л ю ч е н и е

В настоящей работе рассматривались метрические характеристики молекулярных графов ката-конденсированных полициклических углеводородов. Найдены характеристики, идентифицирующие  $h$ -КК[6]-графы для  $3 \leq h \leq 8$ , и показана возможность их применения для идентификации полициклических ката-конденсированных углеводородов на практике.

Рассмотрены также возможные способы идентификации, упорядочения и определения структурного сходства  $h$ -КК[6]-графов на основе матриц слоев. Эта характеристика достаточно просто вычислима и учитывает различные "оттенки" топологических свойств графов. Для  $h$ -КК[6]-графов,  $3 \leq h \leq 7$ , получены матрицы расстояний на основе характеристик  $A(G)$  и  $R(G)$ , которые позволяют делать структурную классификацию этих графов. Авторы надеются, что характеристика  $A(G)$  и ей подобные могут оказаться полезными при предсказании свойств химических соединений.

Созданы каталоги метрических свойств и характеристик указанных классов графов, которые из-за большого объема не могут быть опубликованы.

#### Л и т е р а т у р а

1. РУВРЭ Д. Следует ли заниматься разработкой топологических индексов? //Химические приложения топологии и теории графов. -М., 1987. -С. 183-205.

2. TRINAJSTIĆ N. Chemical Graph Theory. - Florida: CRC Press, Boca Raton, 1983. -Т. 1-2.

3. ДРОБГЛАВ В.В. Инварианты графов и их использование для обработки структурной информации: Автореф. дис.канд.техн.наук. -Новосибирск, 1987. - 16 с.

4. GUTMAN I., MARKOVIĆ S., LUKOVIĆ U., RADIVOJEVIĆ V., RANŽIĆ S. On Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons //Zbornik Radova Prirodno-matematičkog fakulteta u Kragujevcu.-1987. - N8. - P. 15-34.

5. БОНЧЕВ Д.Г. Характеризация химических структур с помощью теории информации и теории графов: Автореф. дис. докт. хим. наук. -Бурнас, 1983. - 48 с.

6. МОТОС I., BALABAN A.T., MEKENYAN O., BONCHEV D. Topological indices. Inter-Relations and composition //Math. Chem. - 1982. - Vol. 13. -P. 369-404.

7. SABLJIĆ F., TRINAJSTIĆ N. Quantitative structure-activity relationships: the role of topological indices //Acta Pharm. Yugosl.- 1981. -Vol. 31, N 4. -P.189-214.

8. WIENER H. Structural determination of paraffin boiling points //J. Am. Chem. Soc. - 1947. - Vol. 69. -P. 17-20.

9. MEKENYAN O., BONCHEV D., TRINAJSTIĆ N. Topological rules for spurocompounds //Math. Chem. (MATCH). - 1979.-N 6. -P. 93-115.

10. MEKENYAN O., BONCHEV D., TRINAJSTIĆ N. A topological characterization of cyclic structures with acyclic branches //Math. Chem. (MATCH), - 1981. -N 11. -P. 145-168.

11. MEKENYAN O., BONCHEV D. Structural complexity and molecular properties of cyclic systems with acyclic branches //Groat. Chem. Acta. - 1983. -Vol 56. - P. 237-261.

12. GUTMAN I., POLANSKY O.E. Wiener numbers of polyarenes and related benzenoid molecules //Communication in mathematical Chemistry (MATCH). - 1986.-N 20. -P. 115-123.

13. СКОРОБОГАТОВ В.А., ДОБРЫНИН А.А. Влияние структурных преобразований графов на значение его дистанции //Анализ данных в экспертных системах. -Новосибирск, 1986. -Вып. 117: Вычислительные системы. -С. 103-113.

14. ДОБРЫНИН А.А. Дистанция молекулярных графов полициклических соединений //Там же. -С. 114-122.

15. POLANSKY O.E., BONCHEV D. The Wiener number of graphs. I. General theory and changes due to graph operations //Math. Chem. (MATCH). - 1986. -Vol. 21. -P. 133-186.

16. GUTMAN I. Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons:two theorems //Chemical Physics Letters. - 1987. -Vol. 136, N 2. - P. 134-136.

17. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В., СКОРОБОГАТОВ В.А. Исследование молекулярных графов полициклических соединений //Тезисы доклада на УП Всесоюзной конференции по использованию вычислительных машин в химических исследованиях и спектроскопии молекул. - Рига, 1986. - С. 205-206.

18. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В. Графы полициклических соединений //Вопросы алгоритмического анализа структурной информации. -Новосибирск, 1987. -Вып. 119: Вычислительные системы. -С. 71-90.

19. СКОРОБОГАТОВ В.А., ХВОРОСТОВ П.В. Анализ метрических свойств графов //Методы обнаружения закономерностей с помощью ЭВМ. - Новосибирск, 1981. - Вып. 91: Вычислительные системы. - С. 3-20.

20. СКОРОБОГАТОВ В.А. Матрицы слоев и изометричность графов //Автоматизация проектирования в микроэлектронике. Теория. Методы. Алгоритмы. -Новосибирск, 1976. -Вып. 77: Вычислительные системы. -С. 20-24.

21. СКОРОБОГАТОВ В.А. Относительные разбиения и слои графов //Вопросы обработки информации для проектирования систем. -Новосибирск, 1977. -Вып. 69: Вычислительные системы. -С. 6-9.

22. KNOP J.V., MULLER W.R., SZYMANSKI K., TRINAJSTIĆ N. Computer generation of certain classes of molecules. -Zagreb: SKTH /Kemij u industriji, 1985. - 166 p.

23. ДОБРЫНИН А.А., МЕЙРМАНОВА Н.М., СКОРОБОГАТОВ В.А. Метрический анализ молекулярных графов и программный комплекс МЕТАН-МГ //Тезисы доклада на УП Всесоюзной конференции по использованию вычислительных машин в химических исследованиях и спектроскопии молекул. -Рига, 1986. -С. 203.

24. CHARTRAND G., STEWART M. Isometric graphs // Lect. Notes Math. - 1971. - N 186. - P. 63-67.

25. МЕЙРМАНОВА Н.М., СКОРОБОГАТОВ В.А. Исследование изометричности кубических графов // Вопросы алгоритмического анализа структурной информации. - Новосибирск, 1987. - Вып. 119: Вычислительные системы. - С. 49-61.

26. РАНДИН М., КРАУС Дж., ДЗОНОВА-ДЖЕРМАН-БЛАЗИЧ Б. Упорядочивание графов как подход к исследованию корреляций структура-активность // Химические приложения топологии и теории графов. - М., 1987. - С. 222-235.

27. ДОБРЫНИН А.А., СКОРОБОГАТОВ В.А. Свойства цепей, графов и изотопичность // Алгоритмический анализ структурной информации. - Новосибирск, 1985. - Вып. 112: Вычислительные системы. - С. 33-45.

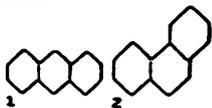
28. Пакет прикладных программ ОТЭКС / Загоруйко Н.Г., Елкина В.Н., Емельянов С.В., Лбов Г.С. - М.: Финансы и статистика, 1986. - 160 с.

Поступила в ред.-изд.отд.

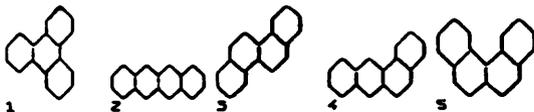
11 апреля 1988 года

Изображение  $h$ -КК [6]-графов,  $3 \leq h \leq 8$

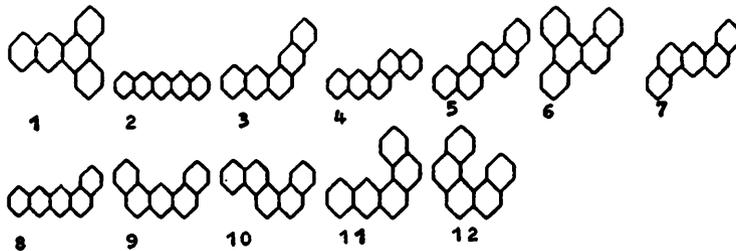
$h = 3$



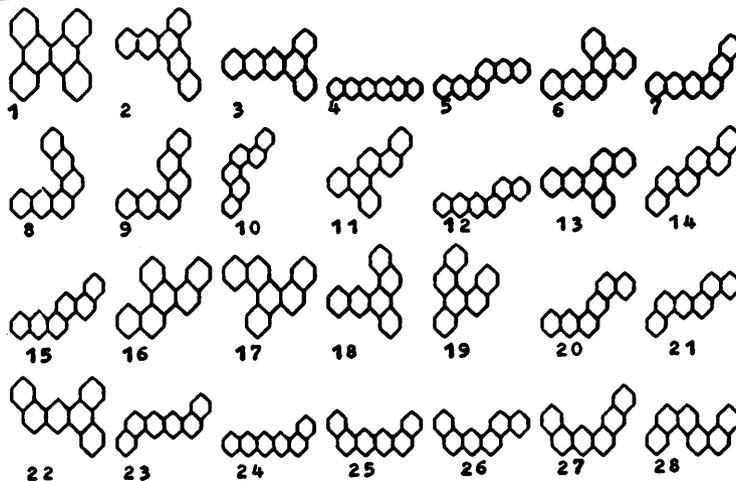
$h = 4$



$h = 5$

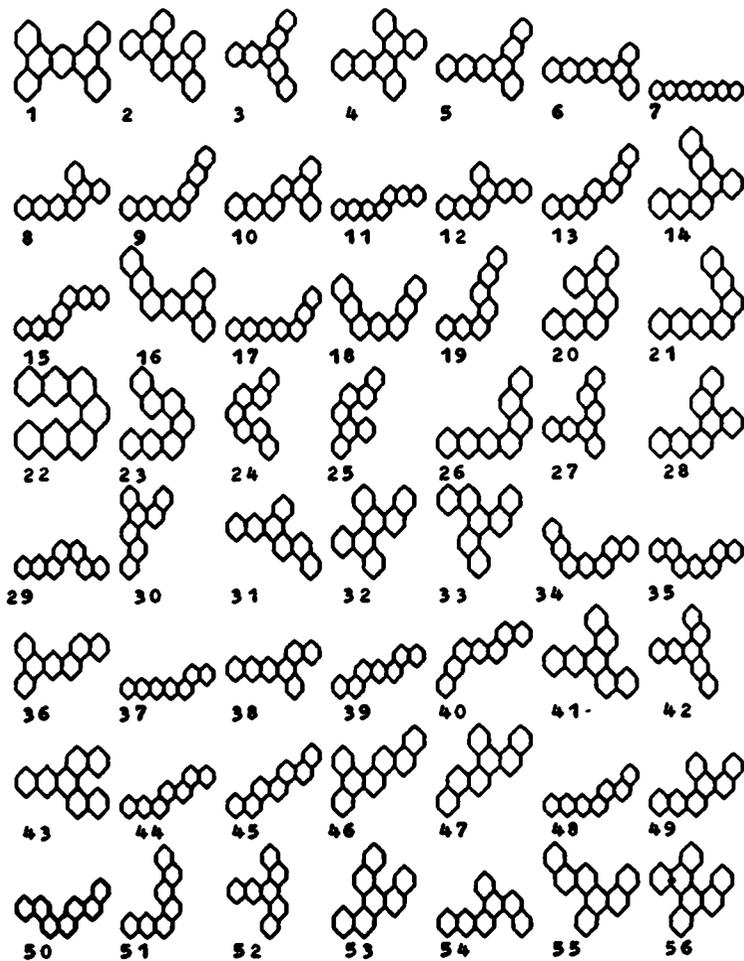


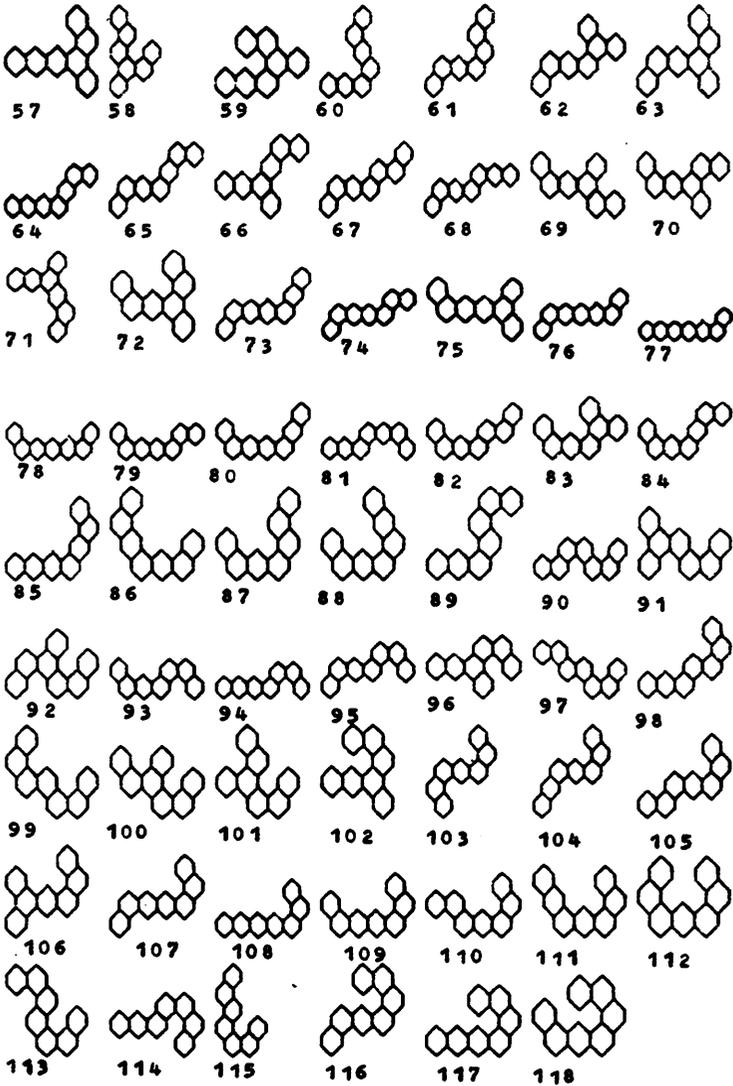
$h = 6$



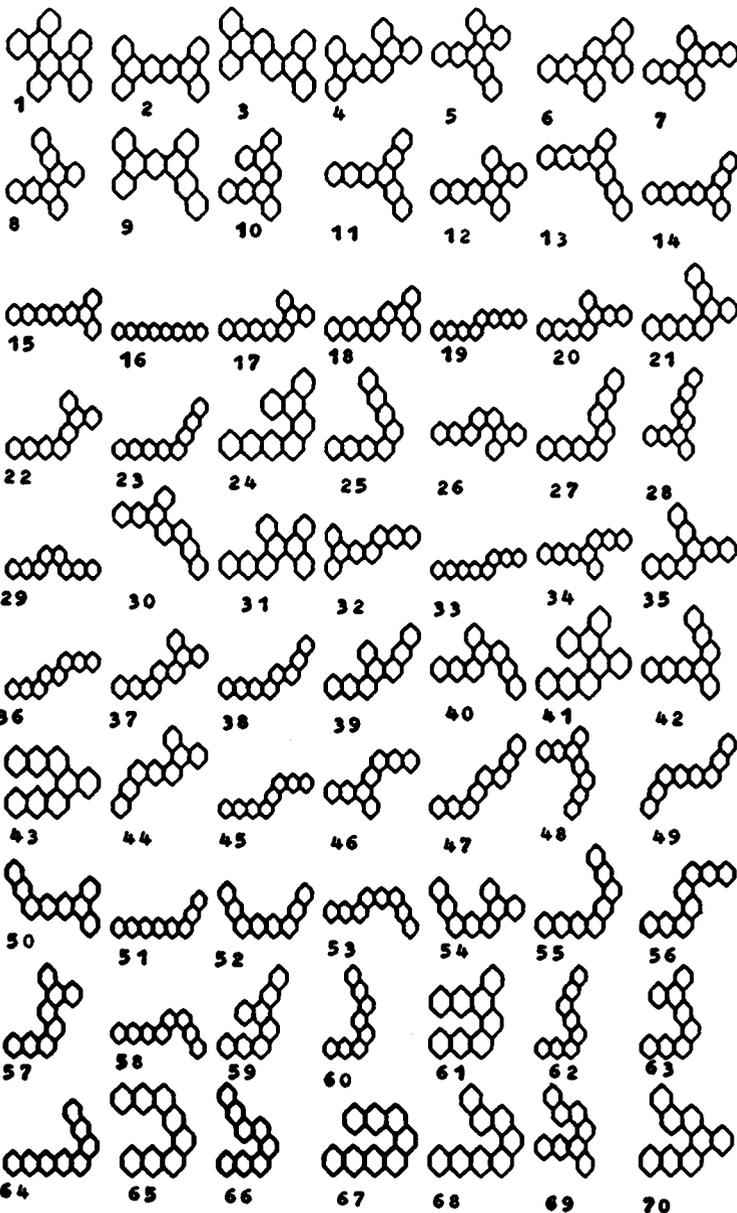


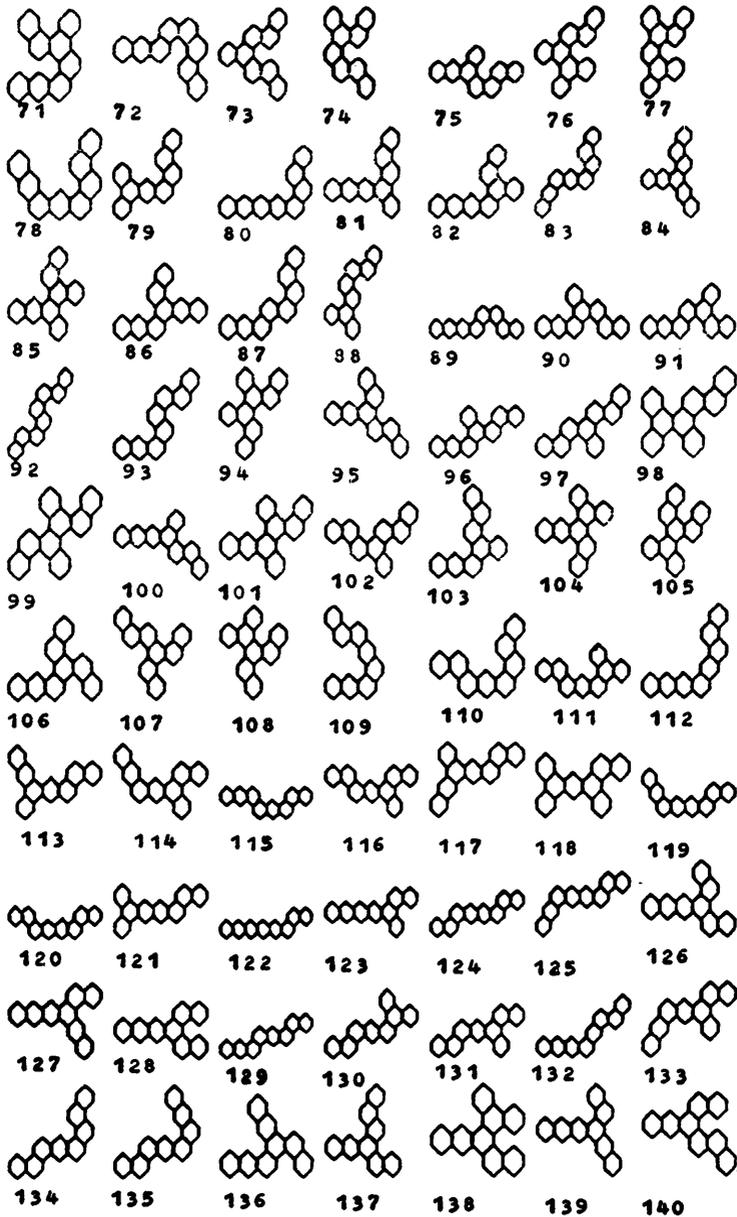
h = 7

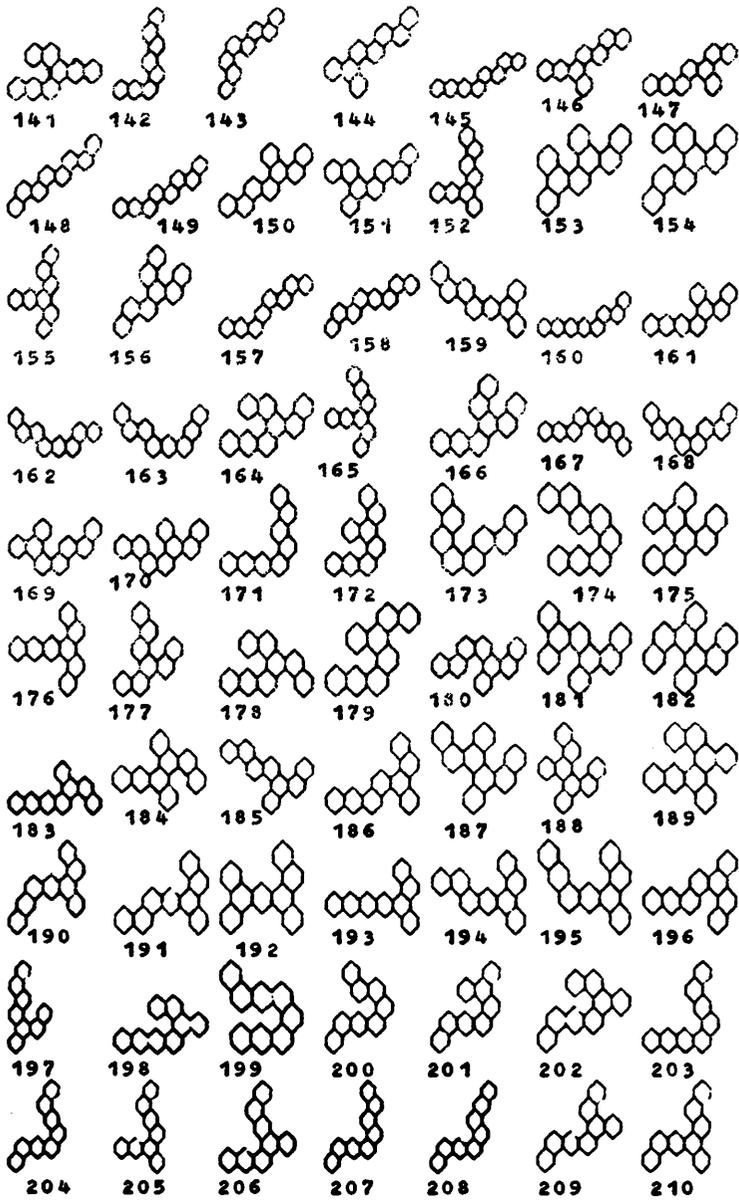


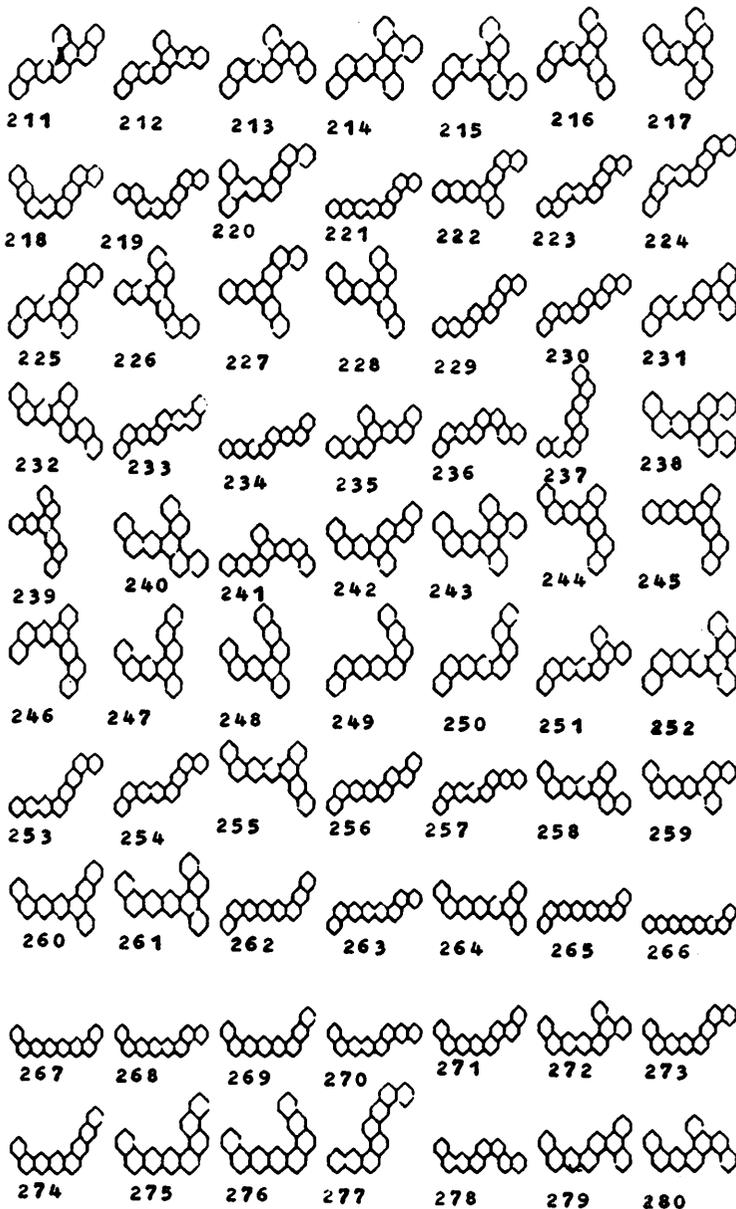


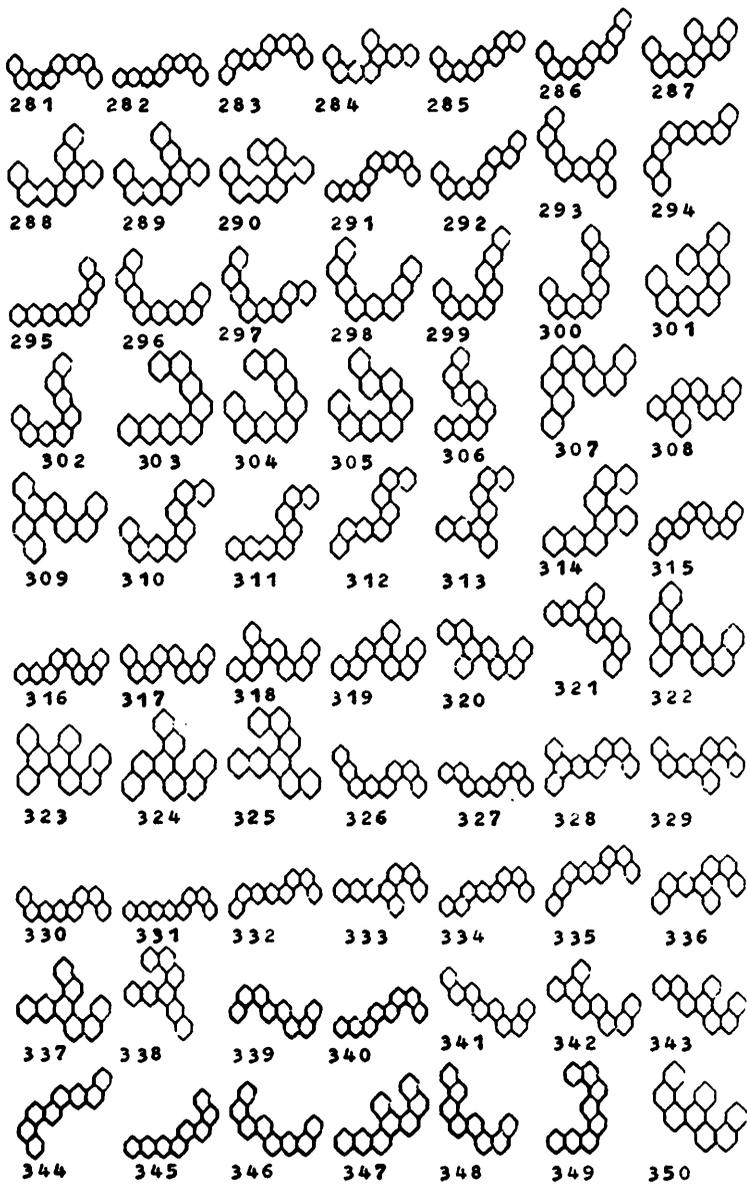
h = 8

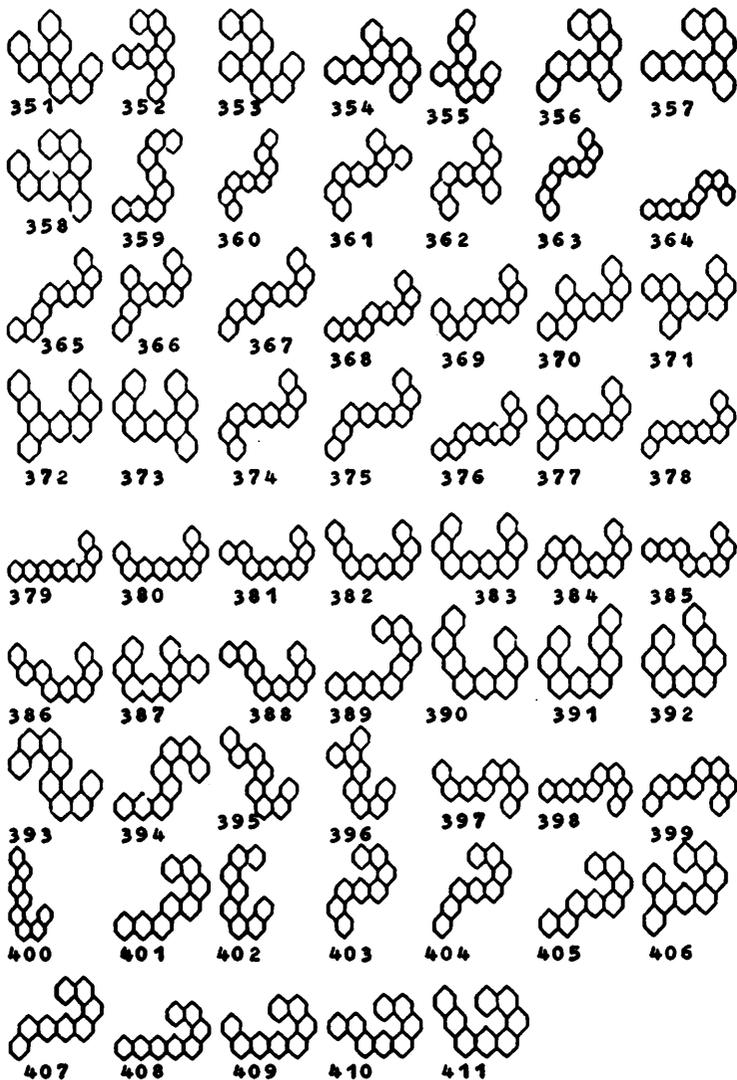












В приложении приведены таблицы классов  $h$ -КК[6]-графов с одинаковыми значениями метрических характеристик. Для данной характеристики и данного числа  $h$  классы  $h$ -КК[6]-графов пронумерованы и упорядочены по убыванию значения характеристики. Во всех таблицах под чертой для каждого класса приведены списки номеров  $h$ -КК[6]-графов с данным значением характеристики. Указанные номера соответствуют нумерации  $h$ -КК[6]-графов в приложении 1.

Т а б л и ц а 10

Классы 3-КК [6]-г-графов с одинаковыми значениями эксцентриситетных и дистанционных характеристик

$r(G)$	$d(G)$	$e(G)$	$D(G)$	$\Delta G^*$	$\Delta D(G)$	$m_2^*(G)$	$\text{var}(G)$
1. $\frac{4}{1}$	1. $\frac{7}{1}$	1. $\frac{80}{1}$	1. $\frac{279}{1}$	1. $\frac{136}{2}$	1. $\frac{5.878}{1}$	1. $\frac{6.786}{1}$	1. $\frac{20}{2}$
2	2	2. $\frac{76}{2}$	2. $\frac{271}{2}$	2. $\frac{96}{1}$	2. $\frac{5.388}{2}$	2. $\frac{5.357}{2}$	2. $\frac{16}{1}$

Т а б л и ц а 11

Классы 4-КК [6]-графов с одинаковыми значениями эксцентриситетных и дистанционных характеристик

$r(G)$	$d(G)$	$e(G)$	$D(G)$	$\Delta G^*$	$\Delta D(G)$	$m_2^*(G)$	$var(G)$
1. $\frac{5}{1}$	1. $\frac{9}{2}$	1. $\frac{130}{2}$	1. $\frac{569}{2}$	1. $\frac{320}{5}$	1. $\frac{10.469}{2}$	1. $\frac{9.389}{2}$	1. $\frac{36}{3}$
2. $\frac{3}{4}$	2. $\frac{124}{4}$	2. $\frac{553}{4}$	2. $\frac{296}{4}$	2. $\frac{296}{4}$	2. $\frac{9.432}{4}$	2. $\frac{7.833}{1}$	2. $\frac{32}{2}$
3. $\frac{8}{5}$	3. $\frac{122}{3}$	3. $\frac{545}{3}$	3. $\frac{280}{3}$	3. $\frac{280}{3}$	3. $\frac{9.284}{4}$	3. $\frac{6.278}{3}$	3. $\frac{24}{1}$
4. $\frac{7}{1}$	4. $\frac{113}{5}$	4. $\frac{529}{5}$	4. $\frac{256}{5}$	4. $\frac{256}{5}$	4. $\frac{8.198}{5}$	4. $\frac{8.000}{1}$	
5. $\frac{4}{5}$	5. $\frac{108}{1}$	5. $\frac{513}{1}$	5. $\frac{216}{1}$	5. $\frac{216}{1}$			

Классы 5-КК [6]-Графов с одинаковыми значениями эксцентриситетных и дистанционных характеристик

$x(G)$	$d(G)$	$e(G)$	$D(G)$	$\Delta G^*$	$\Delta D(G)$	$m_2^*(G)$	$var(G)$
1	2	3	4	5	6	7	8
1. $\frac{6}{2}$	1. $\frac{11}{2}$	1. $\frac{192}{2}$	1. $\frac{1011}{2}$	1. $\frac{544}{12}$	1. $\frac{15.339}{2}$	1. $\frac{13.591}{2}$	1. $\frac{56}{3}$
2. $\frac{3}{4}$	2. $\frac{3}{4}$	2. $\frac{185}{8}$	2. $\frac{987}{8}$	2. $\frac{536}{11}$	2. $\frac{14.545}{3}$	2. $\frac{11.955}{7}$	2. $\frac{4}{5}$
3. $\frac{4}{5}$	3. $\frac{4}{5}$	3. $\frac{184}{8}$	3. $\frac{979}{8}$	3. $\frac{528}{11}$	3. $\frac{14.479}{3}$	3. $\frac{11.045}{8}$	3. $\frac{10}{11}$
4. $\frac{5}{7}$	4. $\frac{5}{7}$	4. $\frac{183}{3}$	4. $\frac{971}{3}$	4. $\frac{520}{3}$	4. $\frac{14.413}{4}$	4. $\frac{10.318}{3}$	4. $\frac{52}{6}$
5. $\frac{7}{8}$	5. $\frac{7}{8}$	5. $\frac{182}{4}$	5. $\frac{963}{4}$	5. $\frac{512}{10}$	5. $\frac{14.314}{5}$	5. $\frac{9.409}{4}$	5. $\frac{6}{7}$
6. $\frac{8}{9}$	6. $\frac{8}{9}$	6. $\frac{173}{5}$	6. $\frac{955}{5}$	6. $\frac{496}{6}$	6. $\frac{13.884}{8}$	6. $\frac{9.409}{9}$	6. $\frac{8}{9}$
7. $\frac{9}{10}$	7. $\frac{9}{10}$	7. $\frac{170}{7}$	7. $\frac{939}{7}$	7. $\frac{480}{9}$	7. $\frac{13.223}{7}$	7. $\frac{9.409}{10}$	7. $\frac{48}{11}$
8. $\frac{10}{11}$	8. $\frac{10}{11}$	8. $\frac{170}{11}$	8. $\frac{939}{11}$	8. $\frac{480}{9}$	8. $\frac{13.223}{1}$	8. $\frac{9.409}{11}$	8. $\frac{2}{2}$

Окончание таблицы 12

1	2	3	4	5	6	7	8
		8. <u>169</u> 10	8. <u>931</u> 10	8. <u>472</u> 1	8. <u>12.893</u> 9	6. <u>8.136</u> 6	
		9. <u>160</u> 1	9. <u>907</u> 1	9. <u>456</u> 8	9. <u>12.826</u> 11	12	
		10. <u>156</u> 12	10. <u>899</u> 12	10. <u>424</u> 7	10. <u>12.727</u> 10		
		11. <u>152</u> 6	11. <u>883</u> 6	11. <u>416</u> 2	11. <u>12.066</u> 6		
					12. <u>11.107</u> 12		

Т а б л и ц а 13

Классы 6-КК [6]-графов с одинаковыми значениями эксцентриситетных и дистанционных характеристик

$r(G)$	$d(G)$	$e(G)$	$D(G)$	$\Delta G^*$	$\Delta D(G)$	$m_2^*(G)$	$var(G)$
1	2	3	4	5	6	7	8
1. 7	1. 13	1. 266	1. 1637	1. 912	1. 21.302	1. 17.731	1. 80
4	4	4	4	8	4	4	5
5	5	5	5	8	5	5	6
7	7	7	7	36	7	7	7
12	12	12	12	36	5	23	8
14	14	14	14	36	5	24	9
15	15	15	15	896	3.	14.962	10
20	20	7	7	7	14	5	11
21	21	12	12	888	15	7	12
23	23	12	12	35	4.	12	14
24	24	23	23	35	4.	14	15
2.	2.	5	5	880	20	15	20
6	6	14	14	10	5.	20	21
2	2.	15	15	10	5.	21	26
3	3	21	21	872	7	21	27
6	6	23	23	6	6.	14.346	29
8	8	25	25	27	6.	25	30
9	9	26	26	27	21	25	32
10	10	27	27	27	21	25	33
11	11	29	29	27	24	25	35
...	...	...	...	...	...	...	36

Продолжение таблицы 13

1	2	3	4	5	6	7	8
13	30	6. <u>241</u>	7. <u>1557</u>	7. <u>864</u>	8. <u>20.450</u>	5. <u>13.577</u>	2. <u>76</u>
16	32	26	14	7	12		22
22	33	27		31			23
25			8. <u>1541</u>	34	9. <u>20.355.</u>		24
26	3. <u>11</u>	7. <u>240</u>	27		23		25
27	2	<u>33</u>		8: <u>856</u>	6. <u>13.269</u>		34
28	3		9. <u>1533</u>	11	10. <u>19.124</u>		
29	6	8. <u>238</u>	26	26	25		3. <u>72</u>
30	11	29	33	33			3
32	13	9. <u>237</u>		848	11. <u>19.077</u>		4
33	16	8	10. <u>1517</u>	9. <u>848</u>	30		28
34	22	9	29	12	12. <u>19.053</u>	7. <u>12.192</u>	31
35	28	10	32	10. <u>832</u>	29		
36	34	30		5	13. <u>18.888</u>		4. <u>68</u>
	35	32	11. <u>1509</u>	19			
3. <u>5</u>	36		8	20			
1	4. <u>10</u>	10. <u>230</u>	30	11. <u>824</u>	14. <u>18.840</u>	8. <u>11.885</u>	2
17	17	3	12. <u>1501</u>	29	26		13
18	18		9	32			16
19	31	11. <u>225</u>		12. <u>816</u>	15. <u>18.769</u>		17
31		34	13. <u>1493</u>	15	32		18
	5. <u>9</u>		10	12. <u>816</u>			19
	1	12. <u>222</u>		15	32		5. <u>56</u>
	19	28		21			1
...							
...							
...							

Продолжение таблицы 13

1	2	3	4	5	6	7	8
		13. <u>221</u>	14. <u>1485</u>	25	16. <u>18.651</u>	9. <u>10.808</u>	
		22	3	28	2	6	
		35	34	13. <u>808</u>	17. <u>18.604</u>	11	
		36	1461	18	33	35	
		14. <u>220</u>	28	30	18. <u>18.556</u>	10. <u>10.500</u>	
		6	1453	14. <u>800</u>	8	17	
		15. <u>219</u>	22	14	19. <u>18.414</u>	18	
		11	36	22	9	11. <u>9.423</u>	
		16. <u>218</u>	1445	15. <u>792</u>	20. <u>18.272</u>	1	
		2	2	24	10	19	
		17. <u>215</u>	35	16. <u>784</u>	21. <u>17.964</u>	31	
		13	1437	2	6		
		18. <u>212</u>	6	17. <u>768</u>	22. <u>17.917</u>		
		16	1429	1	11		
		19. <u>204</u>	11	18. <u>760</u>	23. <u>17.846</u>		
		18	1421	3	22		
		20. <u>202</u>	13	17			
		...	...	...	...	...	...
		31	...	...	...	...	...

Окончание таблицы 13

1	2	3	4	5	6	7	8
		21. <u>201</u> 17	21. <u>1405</u> 18	19. <u>752</u> 4	24. <u>17.609</u> 13		
		22. <u>190</u> 1	22. <u>1397</u> 16	20. <u>744</u> 23	25. <u>17.278</u> 28		
		19	23. <u>1381</u> 17	21. <u>736</u> 13	26. <u>17.231</u> 18		
			17 31	22. <u>688</u> 16	27. <u>17.041</u> 16		
			24. <u>1365</u> 19		28. <u>16.923</u> 34		
			25. <u>1333</u> 1		29. <u>16.521</u> 36		
					30. <u>16.472</u> 35		
					31. <u>16.189</u> 17		
					32. <u>16.000</u> 31		
					33. <u>15.811</u> 1		

Т а б л и ц а 14

Классы 7-КК [6.]-графов с одинаковыми значениями эксцентриситетных и дистанционных характеристик

$r(G)$	$d(G)$	$e(G)$	$D(G)$	$\Delta G^*$	$\Delta D(G)$	$m_2^*(G)$	$var(G)$
1	2	3	4	5	6	7	8
1. <u>8</u>	1. <u>15</u>	1. <u>352</u>	1. <u>2472</u>	1. <u>1326</u>	1. <u>28.587</u>	1. <u>23.167</u>	1. <u>108</u>
7	7	7	7	22	7	7	8
9	9	7	7	59	7	7	9
11	11	7	7	77	7	7	10
13	13	7	7	1328	7	7	11
15	15	7	7	14	7	7	13
17	17	7	7	1320	7	7	19
37	37	7	7	21	7	7	21
39	39	7	7	23	7	7	26
40	40	7	7	58	7	7	29
44	44	7	7	1312	7	7	44
45	45	7	7	27	7	7	45
48	48	7	7	88	7	7	46
64	64	7	7	1304	7	7	48
65	65	7	7	9	7	7	50
67	67	7	7	24	7	7	51
68	68	7	7	26	7	7	60
73	73	7	7	9	7	7	61
74	74	7	7	26	7	7	62
76	76	7	7	26	7	7	64
2.	2.	2.	2.	2.	2.	2.	2.
2. <u>343</u>	2. <u>2439</u>	2. <u>343</u>	2. <u>2439</u>	2. <u>1328</u>	2. <u>28.107</u>	2. <u>21.433</u>	2. <u>21.433</u>
77	77	77	77	14	77	76	76
3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.	3.
3. <u>341</u>	3. <u>2415</u>	3. <u>341</u>	3. <u>2415</u>	3. <u>1320</u>	3. <u>28.089</u>	3. <u>20.233</u>	3. <u>20.233</u>
17	17	17	17	21	17	15	15
37	37	37	37	23	17	17	17
39	39	37	37	58	17	17	17
40	40	37	37	1312	17	17	17
44	44	37	37	27	17	17	17
45	45	37	37	88	17	17	17
48	48	37	37	9	17	17	17
64	64	37	37	24	17	17	17
65	65	37	37	26	17	17	17
67	67	37	37	9	17	17	17
68	68	37	37	26	17	17	17
73	73	37	37	9	17	17	17
74	74	37	37	26	17	17	17
76	76	37	37	26	17	17	17
4.	4.	4.	4.	4.	4.	4.	4.
4. <u>340</u>	4. <u>2407</u>	4. <u>340</u>	4. <u>2407</u>	4. <u>1312</u>	4. <u>28.052</u>	4. <u>12.700</u>	4. <u>12.700</u>
9	9	9	9	27	45	73	73
37	37	9	9	88	45	73	73
40	40	9	9	9	45	73	73
44	44	9	9	24	45	73	73
45	45	9	9	26	45	73	73
48	48	9	9	9	45	73	73
64	64	9	9	24	45	73	73
65	65	9	9	26	45	73	73
67	67	9	9	9	45	73	73
68	68	9	9	24	45	73	73
73	73	9	9	26	45	73	73
74	74	9	9	9	45	73	73
76	76	9	9	24	45	73	73
5.	5.	5.	5.	5.	5.	5.	5.
5. <u>339</u>	5. <u>2391</u>	5. <u>339</u>	5. <u>2391</u>	5. <u>1304</u>	5. <u>27.89335</u>	5. <u>12.700</u>	5. <u>12.700</u>
11	11	11	11	9	11	78	78
48	48	11	11	24	11	78	78
64	64	11	11	26	11	78	78
65	65	11	11	9	11	78	78
67	67	11	11	24	11	78	78
68	68	11	11	26	11	78	78
73	73	11	11	9	11	78	78
74	74	11	11	24	11	78	78
76	76	11	11	26	11	78	78

Продолжение таблицы 14

1	2	3	4	5	6	7	8
77	77	15	6. 2383	102	9. 27.787	5. 19.567	65
1. 7	2. 14	39	15	6. 1296	64	9	67
3	18	40	48	85	27.733	11	68
5	19	44	74	87	65	13	81
6	21	45	7. 2375	117	27.698	44	82
8	26	67	13	7. 1288	9	45	84
10	29	68	40	19	27.680	48	85
12	34	73	65	60	77	64	94
16	35	74	68	86	27.644	65	95
18	50	76	8. 2367	118	40	67	97
19	51	7. 329	39	8. 1280	14. 27.627	68	98
21	60	78	44	20	39	6	114
22	61	8. 325	67	28	15	107	115
23	78	79	9. 2359	54	15	108	116
24	79	80	45	72	16. 27.396	2.	117
26	80	9. 323	80	9. 1272	37	79	104
29	81	108	10. 2351	11	17. 27.307	80	12
31	82	10. 322	79	12	74	104	14
34	84	85	29	29	18. 27.253	105	15
35	85	85	51	51	73	...	16
36	94	...	61	61	...	...	17
38	95	...	...	...	...	...	18
46	97	...	...	...	...	...	18
47	98	...	...	...	...	...	20

1	2	3	4	5	6	7	8
49	104	11. <u>321</u>	11. <u>2343</u>	64	19. <u>27.200</u>	8. <u>17.833</u>	22
50	105	18	85	71	<u>17</u>	81	23
51	107	34	108	10. <u>1264</u>	20. <u>27.164</u>	82	24
60	108	35		8	<u>76</u>	84	25
61	3. <u>13</u>	81	12. <u>2327</u>	25	21. <u>26.560</u>	85	27
62	5	82	81	30	<u>78</u>	94	28
66	6	84	84	55	22. <u>26.436</u>	95	30
69	8	94	13. <u>2319</u>	81	<u>98</u>	97	31
75	10	12. <u>319</u>	18	84	23. <u>26.400</u>	98	34
78	12	95	82	89	<u>97</u>	9. <u>17.300</u>	35
79	16	97	94	114	24. <u>26.347</u>	18	37
80	22	98	107	116	82	34	39
81	23	104	14. <u>2311</u>	11. <u>1256</u>	25. <u>26.276</u>	35	40
82	24	105	34	31	<u>81</u>	10. <u>17.033</u>	47
84	31	107	104	48	26. <u>26.240</u>	75	49
85	36	13. <u>318</u>	15. <u>2303</u>	50	<u>94</u>	103	54
86	38	21	35	57	27. <u>26.204</u>	109	55
87	46	26	95	83	<u>95</u>	11. <u>16.635</u>	58
88	47	49	98	92	28. <u>26.151</u>	19	59
89	49	62	105	101	<u>84</u>	21	74
90	66	14. <u>317</u>				26	79
93	69	29					80
94	75						
95							
97							

1	2	3	4	5	6	7	8
98	86	50	16. <u>2295</u>	12. <u>1246</u>	29. <u>26.080</u>	29	87
99	87	51	21	5	<u>85</u>	50	88
103	88	60	97	18		51	89
104	89	61		82	<u>25.938</u>	60	90
105	90		17. <u>2287</u>	90	<u>104</u>	61	104
107	93	15.. <u>312</u>	26	94	105		105
108	99	6	109	96		12. <u>16.367</u>	107
109	103	16. <u>307</u>		115	31. <u>25.831</u>	86	108
110	109	109	18. <u>2272</u>		<u>79</u>	93	110
111	110	17. <u>304</u>	6	13. <u>1240</u>	<u>80</u>	99	111
114	111		19	13		13. <u>15.833</u>	3. <u>100</u>
115	114		60	65	33. <u>25.54668</u>	16	5
116	115	86	86	68	<u>107</u>	36	38
117	116	18. <u>303</u>		93	34. <u>25.54667</u>	110	57
3. <u>6</u>	117		19. <u>2271</u>	113	<u>108</u>	111	63
1	4. <u>12</u>	93	29				66
2	14	110	51	14. <u>1232</u>	35. <u>25.280</u>	14. <u>15.167</u>	69
4	20	111	61	10	<u>51</u>	3	70
14	25	19. <u>302</u>	20. <u>2263</u>	34		5	71
20	27	75	50	62		8	72
25	28			15. <u>1224</u>	37. <u>25.173</u>	10	75
27	30	20. <u>300</u>	21. <u>2255</u>	2	<u>50</u>	38	76
28	54	8	93			46	77
30	55	16			38. <u>25.120</u>		78
					<u>29</u>		

1	2	3	4	5	6	7	8
32	57	36	22.	44	39.	62	83
33	63	87	111	49	25.119	66	86
41	70	88	111	53	60	69	93
42	71	99	2239	67	25.067	87	109
43	83	103	75	70	21	88	118
52	91	117	103	111	41*. 25.013	89	4. 96
53	96	21.	110	16. 1216	61	90	6
54	100	299	110	35	42*. 25.013	114	7
55	106	89	2231	46	5	115	91
57	112	90	88	56	24.996	116	96
58	113	114	99	95	6	117	99
59	118	115	2223	98	26	15. 14.367	100
63	5. 11	116	2223	17. 1208	44. 24.960	1	113
70	1	22. 298	87	4	3	106	5. 92
71	2	10	117	45	45. 24.782	112	4
72	3	46	2215	47	99	16. 14.233	32
83	4	62	16	80	46. 24.640	12	53
91	4	62	16	91	35	22	92
92	32	23. 296	2207	110	47. 24.622	23	101
96	41	5	8	17	93	24	102
100	42	22	36	18. 1200	17	31	103
101	43	23	89	38	38	47	106
102	52	24	114	116	...	49	112
106	53	24	114	...	...	...	...
112	58	38	116	...	...	...	...



1	2	3	4	5	6	7	8
		29. <u>278</u>	34. <u>2151</u>	23. <u>1152</u>	57. <u>24.267</u>	30	
		91	12	73	38	33	
		30. <u>277</u>	71	78	58. <u>24.01779</u>	41	
		14	35. <u>2143</u>	24. <u>1144</u>	36	54	
		20	31	36	59. <u>24.01778</u>	55	
		25	57	42	47	<u>12.500</u>	
		27	69	25. <u>1136</u>	60. <u>24.000</u>	52	
		28	83	15	109	72	
		30	106	69	61. <u>23.911</u>	<u>11.567</u>	
		31. <u>274</u>	36. <u>2135</u>	74	16	2	
		54	113	106	62. <u>23.858</u>	4	
		32. <u>273</u>	37. <u>2127</u>	26. <u>1128</u>	69	32	
		55	3	77	63. <u>23.840</u>	53	
		33. <u>272</u>	49	107	49	58	
		70	38. <u>2119</u>	27. <u>1120</u>	64. <u>23.733</u>	59	
		96	14	40	71	92	
		34. <u>270</u>	47	28. <u>1112</u>	65. <u>23.573</u>	101	
		3	91	104	115	102	
		35. <u>269</u>			66. <u>23.520</u>	<u>10.367</u>	
		100			14	56	
...	...	...	...	...	...	...	...



Продолжение таблицы 14

1	2	3	4	5	6	7	8
		43. <u>254</u>	44. <u>2055</u>		76. <u>22.987</u>		
		4	58		<u>70</u>		
		41	100		77. <u>22.951</u>		
		63	2047		<u>91</u>		
		44. <u>251</u>	41		110		
		32	43		78. <u>22.809</u>		
		53	52		<u>55</u>		
		45. <u>243</u>	102		79. <u>22.791</u>		
		33	2023		<u>83</u>		
		46. <u>236</u>	92		80. <u>22.773</u>		
		<u>56</u>	101		<u>111</u>		
			47. <u>2007</u>		81. <u>22.756</u>		
			2		<u>54</u>		
			33		82. <u>22.667</u>		
			53		<u>63</u>		
			48. <u>1999</u>		83. <u>22.578</u>		
			4		<u>22</u>		
			49. <u>1975</u>		84. <u>22.542</u>		
			32		<u>30</u>		
		.....	.....	.....	.....	.....	.....



Продолжение таблицы 14

1	2	3	4	5	6	7	8
					94. $\frac{21.902}{43}$		
					95. $\frac{21.867}{113}$		
					96. $\frac{21.760}{1}$		
					97. $\frac{21.689}{20}$		
					98. $\frac{21.618}{25}$		
					99. $\frac{21.600}{118}$		
					100. $\frac{21.36890}{102}$		
					101. $\frac{21.36889}{4}$		
					102. $\frac{21.333}{112}$		
					103. $\frac{21.120}{2}$		
					... 53	...	...

Окончание таблицы 14

1	2	3	4	5	6	7	8
					104. <u>20.800</u> 32		
					33		
					92		
					105. <u>20.533</u> 101		
					106. <u>19.769</u> 56		

\*) Значения  $\Delta D(G)$  для графов №5 и 61 различаются восьмым знаком после запятой.