

СТРУКТУРНЫЕ И ЧИСЛЕННЫЕ ИНВАРИАНТЫ ОБЫКНОВЕННЫХ
И МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ

Е. В. Константинова, В. А. Скоробогатов

В в е д е н и е

В теории обыкновенных графов понятие "инвариант графа" вводится в связи с решением одной из важных проблем распознавания изоморфизма двух графов [6,26]. Численные инвариантные характеристики используются в методах и алгоритмах распознавания изоморфизма в качестве фильтров, сокращающих перебор. Широкое применение находят графовые инварианты в химических исследованиях [3,7,17,29,50]. Принято инварианты молекулярных графов (графов, представляющих структурную формулу химического соединения) называть топологическими индексами. Число публикаций, посвященных применению топологических индексов в различных областях химических исследований так велико, что даже в обзорных работах, посвященных этой теме, обсуждаются только отдельные области их применения [5,19,20,24,25].

В последнее время появились работы, в которых делается попытка дать классификацию описанных в химической литературе топологических индексов и изложить общие принципы их построения [5,24]. Для того чтобы иметь представление об основах классификации топологических индексов, необходимы общие представления об инвариантах обыкновенных графов, поскольку топологичес-

кие индексы строятся, как правило, путем преобразования графа или некоторого выделенного множества его элементов в число.

На сегодняшний день не существует единого общепринятого определения инварианта графа. В разных источниках инвариант графа определяется по-разному. Например, в [24,25,27] под инвариантом понимается число, характеризующее строение графа, не зависящее от способа нумерации и принимающее одно и то же значение на изоморфных графах. В [5] инвариант графа определен как вектор-функция, значение которой не зависит от способа нумерации, а в [6] под инвариантом понимается функция, соотносящая каждому графу некоторый элемент из множества произвольной природы (числа, системы чисел, векторы, многочлены, матрицы), значения которой на изоморфных графах совпадают. Во всех приведенных определениях понятие инварианта сведено к некоторой количественной характеристике, соответствующей либо всему графу, либо какому-либо выделенному множеству его элементов. В связи с этим различают следующие классы инвариантов: вершинные, интегральные инварианты и инварианты подграфов [6], что является сильным сужением множества инвариантов.

В частности, никем не рассматриваются и не изучаются структурные инварианты, выражающие в множественной форме структурные особенности графов. Однако именно они являются основой построения всех численных инвариантов, в частности, топологических индексов. Как известно, не всегда можно дать удовлетворительную физическую интерпретацию топологического индекса. Знание структурного инварианта, используемого для построения топологического индекса, может облегчить эту задачу.

В предлагаемой работе показана роль структурных инвариантов при создании численных инвариантов обыкновенных графов и при построении топологических индексов молекулярных графов. В прилагаемых к статье приложениях на многочисленных примерах демонстрируется связь между конкретными структурными и численными

ми инвариантами графов. Авторы сочли также необходимым дать обобщенное определение инварианта графа и рассмотреть кратко основные типы инвариантов.

1. Основные понятия теории обыкновенных графов

Граф $G = (V, E)$ состоит из конечного непустого множества $V(G)$, содержащего p вершин, и заданного множества $E(G)$, содержащего q неупорядоченных пар различных вершин из $V(G)$. Такой граф называют (p, q) -графом [27]. Пару вершин $e = (u, v)$ множества $E(G)$ называют ребром графа G . Вершины, определяющие ребро, являются смежными друг с другом и инцидентными ребру. Если два ребра инцидентны одной и той же вершине, то говорят, что они смежны. Мощность $p = |V(G)|$ множества вершин графа называют порядком графа.

Граф G называют молекулярным, если его вершины соответствуют атомам, а ребра - связям молекулярной структуры [50]. Молекулярные графы являются конечными, неориентированными, без петель и кратных ребер.

Графы G и H являются изоморфными, $G \cong H$, если существует взаимно-однозначное соответствие вершин графов друг на друга, сохраняющее смежность вершин, а также метки вершин и ребер.

Граф $G' = (V', E')$ называется подграфом графа $G = (V, E)$, если $V' \subseteq V$ и $E' \subseteq E$, т.е. все вершины и ребра G' принадлежат графу G . Кликой графа называют любой максимальный полный подграф (в полном графе каждая пара его вершин смежна). Порожденным подграфом $G' = \langle V' \rangle$, где $V' \subseteq V$, является максимальный подграф с множеством вершин V' . Удаление вершин v_i из графа G приводит к подграфу $G - v_i$, содержащему все вершины, за исключением v_i , и все ребра, не инцидентные v_i , т.е. $G - v_i$ есть максимальный подграф графа G , не содержащий v_i .

Граф G называется связным, если любая пара его вершин соединена простой цепью. Простой (u, v) -цепью в графе G называется последовательность смежных попарно различных между собой ребер графа, соединяющих вершины u и v . Замкнутая простая цепь называется циклом. Число ребер простой цепи называется ее длиной. Расстоянием $d(u, v)$ между двумя вершинами называется длина кратчайшей простой цепи, соединяющей их. В связном графе расстояние является метрикой, т.е. удовлетворяет аксиомам метрики [27]. Эта метрика называется естественной метрикой. Имеются и другие подходы к определению расстояний в графе. В [4, 49] рассматривается цепное расстояние $p(u, v)$, равное сумме длин всевозможных цепей, соединяющих вершины u и v .

Матрицей смежности $A = \|a_{ij}\|$ графа G называется $(p \times p)$ -матрица, в которой $a_{ij} = 1$, если вершины i и j смежны, и $a_{ij} = 0$ - в противном случае. Сумма элементов i -строки матрицы смежности совпадает со степенью s_i вершины i .

Матрицей расстояний $D = \|d_{ij}\|$ графа G называется $(p \times p)$ -матрица, элементом d_{ij} которой является расстояние между вершинами i и j .

2. Понятие инварианта графа. Основные типы инвариантов

Пусть F есть некоторая функция, определенная набором правил $X \rightarrow Y$, ставящих каждому объекту x множества X в соответствие некоторые объекты из множества Y , т.е. F есть функция $F(x) = y(x) = y$ аргумента x с областью определения X и множеством значений, содержащихся в Y .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Инвариантом $F(G, X)$ графа G на множестве его элементов $X = X(G)$ будем называть функцию F , значения которой на X для изоморфных графов совпадают, т.е.

для любых G и H

$$G \cong H \Rightarrow F(G, X(G)) = F(H, X(H)). \quad (1)$$

В зависимости от определения функции F , а также от выбора множеств X и Y будем различать следующие типы инвариантов:

F	простой	составной
X	локальный	интегральный
Y	численный	структурный

Приведенное выше определение 1 соответствует понятию простого инварианта.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Составным инвариантом $\mathcal{F}(G, F_1(X))$ графа G на множестве его элементов $X = X(G)$ будем называть удовлетворяющую (1) функцию \mathcal{F} с областью определения $F_1(X)$, $i = 1, \dots, n$, где $F_1(X) = F_1(G, X)$ является простым инвариантом графа.

Таким образом, составной инвариант является некоторой функцией от простых инвариантов. К составным инвариантам относятся, например, супериндексы [32], представляющие собой последовательность простых инвариантов.

Множество $X = X(G)$ функции F может быть определено различными элементами графа G . Будем называть функцию F вершинным (реберным) инвариантом, если $X = \{v \mid v \in V(G)\}$ или $X = \{v' \mid v' \in V(G)\}$ ($X = \{e \mid e \in E(G)\}$, $X = \{e' \mid e' \in E(G)\}$). Функция F является инвариантом подграфа $G' = (V', E')$, если $X = \{G'\}$. Вершинные, реберные инварианты и инварианты подграфа относятся к локальным инвариантам. Функцию F называют интегральным инвариантом графа G , если $X = \{G\}$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. Численным инвариантом $P(G, X)$ графа G на множестве X будем называть удовлетворяющую (1) функцию F правила соответствия которой соотносят каждому объекту X мно-

жества X некоторое число $y \in Y$ или совокупность чисел $\{y_i \in Y \mid i = 1, \dots, n\}$.

К численным инвариантам графа относятся топологические индексы молекулярных графов.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 4. Структурным инвариантом $S(G, X)$ графа G на множестве X будем называть удовлетворяющую (1) функцию F , правила соответствия которой соотносят каждому объекту X множества X некоторое множество или граф или совокупность множеств или графов.

Примером структурного инварианта графа G является семейство подграфов $\{G \setminus v_i \mid i = 1, \dots, p\}$. Известна гипотеза Улама [26] о том, что любые два графа с одним и тем же семейством таких подграфов являются изоморфными.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 5. Инвариант F называется полным, если для любых двух G и H справедливо равенство

$$F(G, X(G)) = F(H, X(H)) \Leftrightarrow G \cong H.$$

В настоящее время для всех графов не известно ни одного полного простого или составного инварианта. Однако для отдельных классов графов такие инварианты найдены. Например, числа p и q образуют полный составной инвариант для всех графов с $p < 4$. Выше приведен пример структурного инварианта, характеризующего с точностью до изоморфизма все графы с числом вершин $3 \leq p \leq 9$ [6].

Не все численные или структурные характеристики графа в явном виде являются инвариантами. Например, матрица смежности не инвариант графа, поскольку при изменении нумерации в графе матрица смежности также изменяется, а значит, для нее не выполняется условие (1). Однако известно [1], что матрица смежности может быть приведена к некоторому каноническому виду, для которого будет выполняться это условие. Канонической матрицей смежности называется максимальная из всех возможных матриц,

где максимальность определяется лексикографически в первой паре неравных строк.

В общем случае элементы любого вектора, матрицы, семейства множеств могут быть упорядочены в соответствии с правилами упорядочения так, что полученный вид характеристики будет являться единственным. Такой вид называют каноническим, а саму графовую характеристику - каноническим инвариантом.

Среди канонических инвариантов имеются полные для всех графов инварианты (матрица смежности, матрица инцидентий [27]), которые используются в алгоритмах установления изоморфизма графов [1,40]. К полным каноническим инвариантам подграфов правильных шестиугольной R^6 и четырехугольной R^4 решеток относится граничная степенная последовательность [12,13]. В общем случае каноническая степенная последовательность (упорядоченная в порядке неубывания степеней вершин) не удовлетворяет условию полноты инварианта [6].

Рассмотренные типы инвариантов могут быть представлены в любой комбинации. В табл.1 приведены примеры для 8 возможных комбинаций.

3. Классификация структурных и численных инвариантов

Параметром, различающим внутри структурные и численные инварианты, является размерность объектов множества $Y(X)$. В случае структурных инвариантов множество значений функции F может быть представлено неупорядоченным множеством или графом (массив размерности 0), множеством подмножеств или графов (массив размерности 1), семейством подмножеств или графов (массив размерности 2) и т.д. В случае численных инвариантов - числом (массив размерности 0), вектором (массив размерности 1), матрицей (массив размерности 2), набором, матриц (массив размерности 3) и т.д.

Примеры инвариантов

Инвариант	П р и м е р
Простой, локальный, численный	S_i - степень i -вершины [6]
Простой, локальный, структурный	множество S_i вершин, смежных с данной [6]
Простой, интегральный, численный	порядок графа P [6]
Простой, интегральный, структурный	множество $V(G)$ всех вершин графа G [6]
Составной, локальный, численный	вектор $(s_i, c_i, e(i))$, где s_i - степень i -вершины, c_i - число циклов, в которые входит i -вершина, $e(i)$ - эксцентриситет вершины [47]
Составной, локальный, структурный	семейство $\{S_i, G \setminus i\}$, где S_i - множество вершин, смежных с данной вершиной, $G \setminus i$ - максимальный подграф графа G , не содержащий i [6,26]
Составной, интегральный, численный	супериндексы [31]
Составной, интегральный, структурный	семейство $\{G \setminus i \mid i = 1, \dots, P\}$ подграфов графа G [6]

Размерность объектов множества Y (или размерность инварианта) положена в основу предлагаемой классификации структурных $S(G, X)$ и численных $P(G, X)$ инвариантов (табл. 2 и 3 соответственно). Вторым параметром в данной классификации является вид множества $X(G)$. В качестве основных выделены упоминаемые ранее множества: $\{V, V', e, E', G', G\} \in X(G)$.

Таблица 2

Классификация структурных инвариантов

Мощность	Множество элементов						Граф G
	Вершинные		Реберные			Подграф G'	
	V	V'	e	E'	E'		
Множество, граф (0-массив)	$S_0(G, V)$	$S_0(G, V')$	$S_0(G, e)$	$S_0(G, E')$	$S_0(G, E')$	$S_0(G, G')$	$S_0(G, G)$
Множество множеств, графов (1-массив)	$S_1(G, V)$	$S_1(G, V')$	$S_1(G, e)$	$S_1(G, E')$	$S_1(G, E')$	$S_1(G, G')$	$S_1(G, G)$
Семейство множеств, графов (2-массив)	$S_2(G, V)$	$S_2(G, V')$	$S_2(G, e)$	$S_2(G, E')$	$S_2(G, E')$	$S_2(G, G')$	$S_2(G, G)$
...
π -семейство множеств, графов (π -массив)	$S_\pi(G, V)$	$S_\pi(G, V')$	$S_\pi(G, e)$	$S_\pi(G, E')$	$S_\pi(G, E')$	$S_\pi(G, G')$	$S_\pi(G, G)$

Классификация численных инвариантов

Таблица 3

Мощность	Множество элементов					
	Вершинные		Рёберные		Подграф	Граф G
	V	V'	e	E'		
Число (0-массив)	$P_0(G, V)$	$P_0(G, V')$	$P_0(G, e)$	$P_0(G, E')$	$P_0(G, G')$	$P_0(G, G)$
Вектор (1-массив)	$P_1(G, V)$	$P_1(G, V')$	$P_1(G, e)$	$P_1(G, E')$	$P_1(G, G')$	$P_1(G, G)$
Матрица (2-массив)	$P_2(G, V)$	$P_2(G, V')$	$P_2(G, e)$	$P_2(G, E')$	$P_2(G, G')$	$P_2(G, G)$
...
n-мерный массив	$P_n(G, V)$	$P_n(G, V')$	$P_n(G, e)$	$P_n(G, E')$	$P_n(G, G')$	$P_n(G, G)$

Нижний индекс, используемый в табл.2 и 3 для обозначения функций $P_i(G, X)$, $i = 0, \dots, n$, и $S_j(G, X)$, $j = 0, \dots, n$, соответствует размерности инварианта. В дальнейшем будем различать структурные инварианты, множество значений которых представлено совокупностью множеств, и структурные инварианты, множество значений которых представлено совокупностью графов. Для последних будем использовать обозначение $S^H(G, X)$, чтобы подчеркнуть отличие от первых.

4. Структурные инварианты как основа построения численных инвариантов

Численные инварианты обыкновенных графов и топологические индексы молекулярных графов строятся путем преобразования молекулярного графа или выделенных его подмножеств в число и тем самым в численной форме выражают структурные инварианты графа. Покажем функциональную связь структурных и численных инвариантов и рассмотрим примеры такой связи.

Будем говорить, что структурный инвариант $S_j(G, X)$, $j = 0, \dots, n$, является основой построения численного инварианта $P_i(G, X^S)$, $i = 0, \dots, n$, если $P_i(G, X^S)$ есть функция с областью определения $X^S = S_j(G, X)$ и при этом $i \leq j$.

Последнее неравенство говорит о том, что размерность численного инварианта может как совпадать с размерностью структурного инварианта, так и быть меньше, что зависит от функции $P(G, X)$. Продемонстрируем это на примере.

Пусть $X^S = S_1(G, X) = \{M_k \subset X^S, k = 1, \dots, n\}$. Предположим, что

$$P_i(G, X^S): M_k \rightarrow |M_k|.$$

т.е. каждому подмножеству M_k множества X^S функцией $P_i(G, X^S)$ ставится в соответствие его мощность. Тогда

$P_1(G, X^S)$ есть вектор длины m и $i = 1$. Теперь предположим, что

$$P_1(G, X^S): X^S \rightarrow \max_i |M_x|,$$

т.е. множеству X^S подмножеств $\{M_x\}$ поставлена в соответствие максимальная мощность его подмножеств. В этом случае $P_1(G, X^S)$ есть число и $i = 0$.

В следующих разделах представлены известные в литературе численные инварианты обыкновенных графов и топологические индексы молекулярных графов и показана их связь со структурными инвариантами.

5. Связь структурных и численных инвариантов обыкновенных графов

Рассматриваемые в теории обыкновенных графов численные инварианты, как правило, являются инвариантами графа в целом. Реже изучаются локальные инварианты.

К наиболее распространенным инвариантам $P_0(G, G)$ относятся число вершин p и число ребер q . Основой их построения служат два основных структурных инварианта графа $S_0(G, G)$: множество вершин $V(G)$ и множество ребер $E(G)$. При построении численных инвариантов используются также такие графовые понятия, как простой цикл, простая цепь, свойство вершин быть смежными и др. (см. приложение 1).

Примером вершинного инварианта $P_0(G, V)$ является степень S_V вершины V , равная числу вершин, смежных с V . Соответствующим структурным инвариантом $S_0(G, G)$ является множество смежных с V вершин.

Пусть $M = \{M_i \mid i = 1, \dots, p\}$ есть совокупность множеств смежных вершин для всех p вершин графа. Тогда $M = S_1(G, G)$ является основой построения численного инварианта $P_1(G, G)$ $P_1: M_i \rightarrow |M_i|$ для всех $i = 1, \dots, p$,

где $|M_i| = s_i$ — есть степень i -вершины. Данный инвариант называют степенной последовательностью графа G и обозначают $S(G) = (s_1, \dots, s_p)$ [6].

В теории степенных последовательностей [45] рассматриваются не только вершинные, но и реберные последовательности, элементами которых являются степени всех ребер графа. Степень $s(e)$ ребра $e(u, v)$ определяется как сумма степеней инцидентных вершин, т.е. $s(e) = s_v + s_u - 2$. Существует другое определение степени ребра [27] как неупорядоченной пары (s_v, s_u) степеней инцидентных вершин ребра.

Таким образом, один и тот же структурный реберный инвариант — множество инцидентных вершин ребра — дает два различных численных инварианта (см. табл. 3 приложения 1).

6. Связь структурных инвариантов и топологических индексов молекулярных графов

Основой построения большого числа топологических индексов молекулярных графов является такой структурный инвариант, как относительное разбиение графа [21].

Пусть $V_0 \subseteq V(G)$ и пусть $V_i(V_0)$ — есть множество вершин, находящихся на расстоянии i от V_0 . Расстояние между вершиной $v \in V(G)$ и множеством V_0 есть кратчайшее расстояние между v и вершинами V_0 в графе G . Относительным разбиением графа G по отношению к $V_0 \subseteq V(G)$ называется упорядоченное разбиение $\hat{G}(V_0) = \{V_i(V_0) \mid i = 0, \dots,$

$$\dots, k\}, \quad \bigcup_{i=0}^k V_i(V_0) = V(G), \quad V_i(V_0) \cap V_j(V_0) = \emptyset$$

для всех $i \neq j$. Множество вершин $V_i(V_0)$ называют i -слоем разбиения $\hat{G}(V_0)$. Если $V_0 = \{v\}$, то относительное разбиение называется одновершинным и $\hat{G}(v) = \{V_i(v) \mid i = 0, \dots, e(v)\}$, $u \in V_i(v) \Leftrightarrow d(v, u) = i$, где $e(v)$ — есть эксцентриситет вершины, равный величине

не самой длинной из кратчайших цепей, исходящих из V .

Относительные разбиения графа G по отношению к подмножеству $V(G)$ порядка n используются для определения матрицы слоев. Матрицей слоев порядка n графа G называется матрица $\lambda^n(G) = \|\lambda_{ij}\|$, $i = 1, \dots, C_p^n$, $j = 1, \dots, d(G)$, где λ_{ij} равно числу вершин в j -м слое относительного разбиения по отношению к i -му множеству порядка n , $d(G)$ - диаметр графа G , равный максимальному значению эксцентриситета вершин. При $n = 1$ имеем матрицу слоев одновершинных разбиений графа G .

Упорядоченное разбиение множества вершин графа по расстоянию до некоторой выделенной вершины или множества вершин используется при создании локальных и интегральных индексов молекулярных графов.

Локальные топологические индексы. Множество вершин, смежных с данной вершиной (i -слой одновершинного разбиения) является основой построения рассмотренного ранее вершинного индекса - степень вершины. Множество всех слоев всех одновершинных разбиений используется в индексе $d(i)$ суммы расстояний (см. табл. 2 приложения 2). На основе множества всех слоев по отношению к множеству центральных вершин (вершин с минимальным значением эксцентриситета) в $[3i]$ построены центрические топологические индексы. Частичный индекс Рандича (см. табл. 3 приложения 2) построен на основе структурного реберного инварианта, представляющего собой 1-слой однореберного разбиения (множество V_0 содержит две вершины, инцидентные одному и тому же ребру).

Множество всех слоев по отношению к выделенному множеству вершин V' подграфа служит основой построения топологических индексов подграфов. Предложенный в [49] подход основан на метрической характеристике подграфов в графе.

Пусть $H = (V', E') \subseteq G$ и пусть $F_G(H)$ есть некоторый топологический индекс подграфа H в графе G , по-

лученный с учетом всех расстояний от вершин подграфа H до всех вершин $V(G)$ графа G . Тогда относительный топологический индекс $F(H, G)$ подграфа H в графе G определяется формулой

$$F(H, G) = \frac{F_G(H)}{F(G)},$$

где $F(G)$ есть тот же индекс графа G . Например, дистанция подграфа H в G определяется по формуле

$$D_G(H) = \sum_{\substack{u \in V' \\ v \in V(G)}} d(u, v),$$

а относительная дистанция H в G по формуле

$$D(H, G) = \frac{D_G(H)}{W(G)},$$

где $W(G)$ - индекс Винера (см. табл. 1 приложения 2).

Известен также другой подход в построении топологических индексов подграфов [38], учитывающий лишь сам факт вхождения подграфа в граф. Вводятся внутренние $IFTI(H)$ и внешние $EFTI(H)$ топологические индексы подграфа $H \subset G$. Внутренним топологическим индексом фрагмента H считается индекс, при расчете которого подграф H рассматривается как самостоятельный граф без учета связей с $G \setminus H$. Внешний топологический индекс фрагмента H рассчитывается по формуле

$$EFTI(H) = TI(G) - [IFTI(H) + \sum_k IFTI(G \setminus H)],$$

где $TI(G)$ - соответствующий топологический индекс графа G , а k - число компонент графа $G \setminus H$.

На основе этого подхода предложены формулы для расчета фрагментных топологических индексов, являющихся аналогами таких интегральных индексов, как индекс Винера, Рандича, Гор-

дона-Скантлбери, Хосойи, Балабана (см. табл.1 приложения 2).

Интегральные топологические индексы. Структурными инвариантами, используемыми при построении интегральных топологических индексов, являются практически все слои относительных одновершинных разбиений. Множество 1-слоев лежит в основе построения таких индексов, как индекс молекулярной связности Рандича [42], индексов загребской группы [34], индексов полной смежности [цит.20]. На основе 2-слоев всех одновершинных разбиений графа построен индекс Гордона-Скантлбери [цит.20], а на основе 3-слоев - число полярности [53]. Индексы Винера, Балабана, среднеквадратичных расстояний, расширенной связности Рандича (см. табл.1 приложения 2) построены на основе семейства всех слоев всех одновершинных разбиений графа.

При построении интегральных топологических индексов используются также такие структурные инварианты, как множество порожденных подграфов, семейство всех простых цепей всевозможных длин, множество 1-слоев всех однореберных разбиений графа, множество k -слоев всех одновершинных разбиений графа (см. табл.1 приложения 2).

Перечисленные выше структурные инварианты используются также при создании топологических индексов, основанных на информационном подходе [33].

Теоретико-информационные индексы. Общим при построении информационных индексов является следующий известный принцип.

Пусть X есть некоторое множество, состоящее из n элементов. Предположим, что по некоторому критерию эквивалентности элементы множества разбиваются на N классов эквивалентности X_i так, что $n = \sum_{i=1}^N n_i$, где n_i - число элементов подмножества X_i . Тогда величина $p_i = n_i/n$ есть вероятность одного элемента попасть в i -е подмножество и для

количественной оценки информации, приходящейся на один элемент множества, можно использовать энтропию распределения вероятностей элементов этого множества, которая определяется формулой Шеннона [47]:

$$H = - \sum_{i=1}^N p_i \log_2 p_i .$$

Заметим, что в данном подходе заложено использование структурных свойств множества X (молекулярного графа G): классы эквивалентности есть не что иное, как структурные инварианты этого множества (графа).

Первые топологические индексы, основанные на теории информации, были введены в 1955-1956 г.г. с учетом симметрий молекулярных графов [46,51]. В [30] построены теоретико-информационные индексы на основе индекса Винера. Информационный индекс для распределения расстояний по их эквивалентности определяется формулой:

$$I_D^E = - \sum_{i=1}^N \frac{2n_i}{n(n-1)} \cdot \log_2 \frac{2n_i}{n(n-1)},$$

где n_i - число пар вершин, находящихся на расстоянии i друг от друга. Представив индекс Винера в виде $W =$

$$= \sum_{i=1}^N i n_i, \quad \text{можно определить информационный индекс для}$$

распределения расстояний в зависимости от их величин:

$$I_D^W = - \sum_{i=1}^N \frac{i n_i}{W} \cdot \log_2 \frac{i n_i}{W} .$$

Аналогичные выражения построены и для других индексов [33]. Там же определены информационные индексы для реберной матрицы смежности, матрицы циклов, матрицы инциденций, матрицы смежности. Например, на основе матрицы смежности $A = \|a_{ij}\|$ порядка p построен следующий индекс. Пусть n_1 и n_2

есть число нулей и единиц в матрице смежности, тогда величина

$$I_A = - \sum_{i=1}^2 \frac{n_i}{p^2} \cdot \log_2 \frac{n_i}{p^2}$$

характеризует неоднородность состава множества элементов матрицы A .

В [9] построено 5 информационных индексов симметрии окрестностей молекулярного графа, основанных на распределении вершин в k -слоях всех одновершинных разбиений. Критерием эквивалентности, разбивающим множество всех вершин на классы, является совпадение мощности k -слоя вершин (см. табл. 1 приложения 2). Информация о распределении вершин во всех слоях всех одновершинных разбиений использовалась при построении информационного индекса автометричности [16].

7. Составные инварианты графов

В теории обыкновенных графов Зыковым [6] рассмотрены составные численные инварианты в виде векторов и многочленов. Под вектором-инвариантом понимается совокупность любых численных инвариантов $P_0(G, G)$. Многочлен-инвариант

$$P = P(x) = \sum_{i \geq 0} f_i x^i = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + \dots$$

от формальной переменной x , где суммирование ведется до последнего отличного от нуля слагаемого, определяется на основе численного инварианта $P_1(G, x) = (f_0, f_1, f_2, \dots)$.

Введено несколько инвариантов графа, имеющих такой вид. Например, инвариант для подсчета всех возможных клик графа G :

$$P(G) = \sum_{i \geq 0} f_i(G) x^i = f_0(G) + f_1(G)x + \dots + f_\varphi(G)x^\varphi,$$

где $\varphi = \varphi(G)$ - наибольшее число попарно смежных вершин, а $f_1(G)$ - число 1 -вершинных клик. Под 0 -вершинным под -

графом понимается пустое множество, т.е. $f_0(G) = 1$. Множество всех l -клик графа выступает в качестве структурного инварианта $S_1^H(G, G)$, являющегося основой построения численного инварианта $F(G)$.

В [6] рассматриваются также многочлены от нескольких формальных переменных для представления численных инвариантов, зависящих от двух или более параметров. Примером такого инварианта является следующий многочлен:

$$L(G) = \sum_{i, j \geq 0} l_{ij}(G) x^i y^j,$$

где l_{ij} - число подграфов графа G , имеющих i вершин и j ребер. Семейство всех (i, j) -подграфов является соответствующим $L(G)$ структурным инвариантом $S_2^H(G, G)$. Аналогичный подход в построении инвариантов графов используется в [10].

Предложенный в [11, 39] индекс построен на основе некоторых выделенных множеств $\mathcal{B} = \{B_i \mid i = 1, \dots, n\}$ графа, представляющих собой простые непересекающиеся по ребрам цепи, покрывающие весь граф. Если множества $\{B_i \mid i = 1, \dots, n\}$ состоят только из одной простой цепи, то определяется значение индекса на каждой цепи по формуле $\sigma(P_l) = F_{l+1}$, где P_l - простая цепь длины l , F_{l+1} - число Фибоначчи, а затем результаты всех значений суммируются. В случае, когда мно-

жество представляет многокомпонентный граф $\mathcal{B} = \bigcup_{i=1}^k G_i$

(например, совокупность k простых цепей), значение индекса на нем вычисляется как

$$\sigma\left(\bigcup_{i=1}^k G_i\right) = \prod_{i=1}^k \sigma(G_i),$$

а затем результаты вычислений по всем множествам суммируются.

Предполагается, что выбираемые множества \mathcal{B} являются чувствительными к типу структуры.

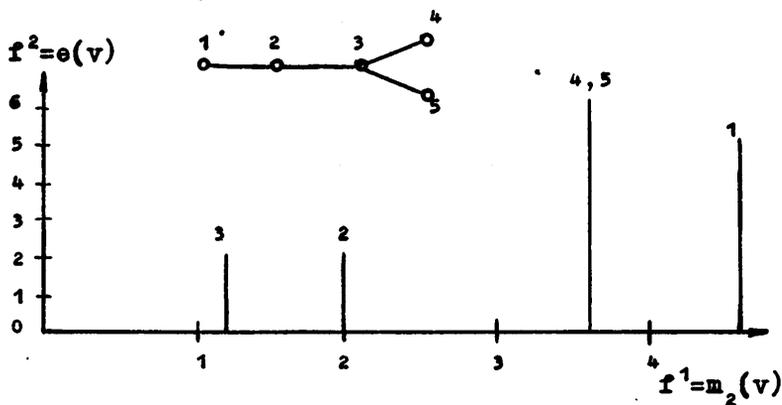
Составной топологический индекс, предложенный в [32] и называемый супериндексом, представляет собой последовательность простых теоретико-информационных индексов молекулярных графов и молекулярных структур. Различные версии супериндекса содержали шесть и десять простых индексов [3]. К составным инвариантам относятся также топологические спектры графов [14].

Пусть $G = (V, E)$ - конечный неориентированный связный непомеченный молекулярный граф без петель и кратных ребер. Обозначим через $\mathcal{H} = \{H_i \mid i = 1, \dots, k\}$ фиксированный набор подграфов молекулярного графа G . Паре $\langle G, \mathcal{H} \rangle$ поставим в соответствие составной топологический индекс, представляющий собой семейство \mathcal{F} наборов топологических индексов $F^j(\mathcal{H}) = \{f^j(H_1), \dots, f^j(H_k)\}$. В дальнейшем будем обозначать $f^j(H_i) = f_i^j$ и $\mathcal{F} = \{f_i^j \mid i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n\}$.

Топологическим n -мерным спектром $S_n(G)$ графа G называют множество значений наборов топологических индексов $F^j(\mathcal{H})$, $j = 1, \dots, n$, при отображении $\mathcal{F} \rightarrow E^n$ семейства топологических индексов в евклидово пространство. Топологический 2-мерный спектр ($n = 2$) называют просто топологическим спектром, а топологический 2-мерный спектр для одновершинных подграфов, т.е. $H_i \cong \langle v_i \rangle$, называют топологическим вершинным спектром. В случае, когда в качестве топологических индексов рассматриваются метрические характеристики [22], спектр называют метрическим. Для изображения спектра рисуют отрезок $[(f^1(v_i), f^2(v_i)); (f^1(v_i), 0)]$ и называют его спектральной линией. В том случае, когда $f^1(v_i) = f^1(v_j)$, считаем, что $f^2(v_i, v_j) = f^2(v_i) + f^2(v_j)$ и соответствующая линия имеет крат-

ность 2. Если имеется k совпадающих значений функции f^1 , то спектральная полоса имеет кратность k .

На рисунке приведен пример метрического вершинного спектра $S_2(G)$ для дерева. Набор $\mathcal{H} = \{v_i \mid i = 1, \dots, 5\}$ представлен вершинами дерева G , а функциями f^1 и f^2 являются метрические характеристики: $m_2(v)$ - среднеквадратичное отклонение вершины и $e(v)$ - эксцентриситет вершины соответственно (см. табл. 2 приложения 2). Спектральная линия, соответствующая вершинам 4 и 5, является кратной и $e(v_4, v_5) = e(v_4) + e(v_5) = 6$.



Рассмотренный пример является топологическим вершинным спектром, в качестве функций которого использовались метрические характеристики вершин. Применение в качестве характеристик f^j относительных метрических характеристик (топологических индексов) фрагментов (подграфов) графа [38, 49] (см. табл. 4 приложения 2) позволяет получить метрические фрагментные спектры.

Вырожденным случаем топологического \mathcal{H} -мерного спектра является 1-мерный спектр для пары $\langle G, \mathcal{H} \rangle$, где $\mathcal{H} = \{G\}$, множество топологических индексов которого представлено одним интегральным индексом графа G .

З а к л ю ч е н и е

Таким образом, любой численный инвариант отражает те или иные структурные особенности графов, учет которых является особенно важным при поиске корреляций между структурой и свойствами химических соединений. Подтверждением этому может служить следующее высказывание Руврэ [19] о том, каким образом была решена задача построения индекса для корреляции между выходом сажи и структурой молекул разных классов. Он пишет, что "эту задачу можно решить, если найти индекс, который обладал бы достаточной избирательностью по отношению к анализируемым молекулам в зависимости от того, имеются или нет в их структуре кольца и двойные связи. Мы нашли решение этой проблемы, скомбинировав два относительно простых топологических индекса. Первый из них, называемый степенью ненасыщенности, служит количественной мерой числа независимых циклов, т.е. кольцевых (фрагментов) в графе данной молекулы. Второй индекс связности служит мерой отдельных вкладов в структуру молекулы таких элементов, как открытые цепи и замкнутые кольца. Полученный нами индекс, представляющий собой математическое произведение двух указанных индексов, позволил вывести линейную корреляцию между выходом сажи и структурой около 100 углеводородов различных классов."

Л и т е р а т у р а

1. АРЛАЗАРОВ В.А., ЗУЕВ И.И., УСКОВ А.В., ФАРАДЖЕВ И.А. Алгоритм приведения конечных неориентированных графов к каноническому виду //Журн.вычисл.математики и мат.физ. - 1974. - Т.14, № 3.- С.737-743.
2. БЕРТИЦ С.Математическая модель молекулярной сложности// Химические приложения топологии и теории графов.-М.:Мир,1987.- С.222-235.
3. БОНЧЕВ Д.Х. Характеризация химических структур с помощью теории информации и теории графов: Автореф. дис...д-ра хим. наук. - Бургас, 1983. - 48 с.

4. ДОБРЫНИН А.А., СКОРОБОГАТОВ В.А. Свойства цепей графов и изотопичность //Алгоритмический анализ структурной информации.- Новосибирск, 1985.- Вып.112: Вычислительные системы. - С.33-45.
5. ДРБОГЛАВ В.В. Инварианты графов и их использование для обработки структурной информации: Автореф.дис... канд. техн. наук: 05.13.16. - Новосибирск, 1987.- 16 с.
6. ЗЫКОВ А.А. Основы теории графов.-М.: Наука,1987.-381 с.
7. Искусственный интеллект: применение в химии: Пер. с англ./Д.Смит, Ч.Риз, Дж.Стюарт и др. Под ред.Т.Пирса, Б.Хони.- М.: Мир, 1988.- 430 с.
8. КОНСТАНТИНОВА Е.В., ПАЛЕЕВ А.А. О чувствительности информационных и топологических индексов полициклических графов // Математические исследования в химической информатике.- Новосибирск, 1991.-*Вып.136: Вычислительные системы.- С.38-48.
9. МАГНУСОН В., ХАРРИС Д., БЕЙСАК С. Топологические индексы, основанные на симметрии окрестностей: химические и биологические приложения// Химические приложения топологии и теории графов.-М.: Мир, 1987.- С.206-221.
10. МАЛОВ К.М., БАРИЕВА Н.А. Об одной системе инвариантов изоморфизма графов // Кибернетика.- 1988.- № 6.-С.116-117.
11. МЕРРИФИЛД Р., СИММОНС Х. Топология точечного множества и молекулярная структура // Химические приложения топологии и теории графов.- М.: Мир, 1987.- С.11-27.
12. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В. Графы полициклических соединений//Вопросы алгоритмического анализа структурной информации. - Новосибирск, 1987.- Вып.119:Вычислительные системы.-С.71-90.
13. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В. Подграфы правильной четырехугольной решетки R^4 //Алгоритмический анализ графов и его применения. - Новосибирск, 1988.-Вып.127:Вычислительные системы.-С.143-151.
14. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В., СКОРОБОГАТОВ В.А. Метрические спектры молекулярных графов// Математические вопросы химической информатики.- Новосибирск, 1990. - Вып.130: Вычислительные системы. - С.68-83.
15. МИЩЕНКО Г.Л. Брутто-формулы связей соединений и их возможная роль при поиске фактографической информации в химии // Информационные проблемы в современной химии. - М.: ВИННИТИ, 1976.- С.25-38.
16. НЕКРАСОВ Ю.С., СУХАРЕВ Ю.Н., МОЛГАЧЕВА Н.С., ТЕП - ФЕР Э.Э., ЗАГОРЕВСКИЙ Д.В., СКОРОБОГАТОВ В.А., МЖЕЛЬСКАЯ Е.В.

Информационные индексы масс-спектров и их корреляция с инвариантами молекулярных графов металлоорганических соединений // Тез. докл. 8 Всесоюз. конф. по использованию вычислительных машин в химических исследованиях и спектроскопии молекул.- Новосибирск, 1989.- С.256-257.

17. Применение теории графов в химии /под ред. Н.С.Зефирова, С.И.Кучанова.- Новосибирск: Наука, 1988.- 305 с.

18. РАНДИЧ М., КРАУС Дж., ДЗОНОВА-ДЖЕРМАН-БЛАЗИЧ Б. Упорядочивание графов как подход к исследованиям корреляций структура-активность// Химические приложения топологии и теории графов.- М.: Мир, 1987.- С.222-235.

19. РУВРЭ Д. Химию прогнозирует топология // В мире науки.- М.: Мир, 1986.- С.14-22.

20. РУВРЭ Д. Следует ли заниматься разработкой топологических индексов? // Химические приложения топологии и теории графов: Пер. с англ., под ред. Р.Кинга. - М.: Мир, 1987.-С.183-205.

21. СКОРОБОГАТОВ В.А. Относительные разбиения и слои графов // Вопросы обработки информации при проектировании систем.- Новосибирск, 1977. - Вып.69: Вычислительные системы.-С.3-10.

22. 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.

23. СКОРОБОГАТОВ В.А., МЖЕЛЬСКАЯ Е.В., МЕЙРМАНОВА Н.М. Изучение метрических характеристик ката-конденсированных полибензолов// Алгоритмический анализ графов и его применения.- Новосибирск, 1988.- Вып.127: Вычислительные системы.- С.40-91.

24. СТАНКЕВИЧ М.И., СТАНКЕВИЧ И.В., ЗЕФИРОВ Н.С. Топологические индексы в органической химии // Успехи химии.- 1988. - Т.57.- С.337-366

25. СТАНКЕВИЧ И.В. Графы в структурной химии // Применение графов в химии /Под ред. Н.С.Зефирова, С.И.Кучанова.- Новосибирск: Наука, 1988.- С.7-69.

26. УЛАМ С. Нерешенные математические задачи.- М.:Мир, 1964.

27. ХАРАРИ Ф. Теория графов.- М.: Мир, 1973.- 300 с.

28. BALABAN A.T. Topological indices based on topological distances in molecular graphs // Pure Appl.Chem.-1983.-Vol.55.- P.109-206.

29. BALABAN A.T. Applications of graph theory in chemistry //J.Chem.Inf.Comput.Sci.- 1985.- № 25.- P.334-343.

30. BONCHEV D., TRINAJSTIC N. Information Theory, Distance Matrix and Molecular Branching // J.Chem.Phys.- 1977.-Vol.67.- P.4517-4533.
31. BONCHEV D., BALABAN A.T., MEKENYAN O. Generalization of the graph center concept, and derived topological indexes// J.Chem.Inf.Comput.Sci.- 1980.- N 20. - P.106-113.
32. BONCHEV D., MEKENYAN O., TRINAJSTIC N. Isomer discrimination by topological information approach // J.Comp.Chem. - 1981.- Vol.2, N 2.- P.127-148.
33. BONCHEV D. Information theoretic indices for characterization of chemical structures.- Chichester: Research Studies Press, 1983.
34. GUTMAN I., TRINAJSTIC N. Graph theory and molecular orbitals. Total π -electron energy of alternant hydrocarbons // Chem.Phys.Lett.- 1972.- Vol.17.- P.535-538.
35. GUTMAN I., RANDIC M. Algebraic characterization of skeletal branching //Chem.Phys.Lett.- 1977.- Vol.47.- P.15-18.
36. HOSOYA H. Topological index a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons //Bull.Chem.Soc.Japn.- 1971.- Vol.44. - P.2332-2339.
37. KIER L.B., HALL L.H. Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research.- N.-Y.: Academic Press, 1976.- 257 p.
38. MEKENYAN O., BONCHEV D. Topological indices for molecular fragments and new graph invariants //J.Math. Chem. - 1988.- N 3.- P.347-375.
39. MERRIFIELD R.E., SIMONS H.E. Enumeration of Structure-Sensitive graphical Subsets: Theory //Proc. Nat. Acad. Sci. USA. - 1981.- Vol.78.- P.692-695.
40. OVERTON M.L., PROSKUROWSKI A. Canonical incidence matrices of graphs //BIT.- 1979.- Vol.19, № 2.-P.271-273.
41. PLATT J. Influence of neighbour bonds on additive bond properties in paraffins //J.Chem.Phys.- 1947.- Vol.15.- P.419-420.
42. RANDIC M. On characterization of molecular branching //J.Amer.Chem.Soc.- 1975.- Vol.97, N 23.- P.6609-6615.
43. RANDIC M. On molecular identification numbers // J. Chem.Inf.Comput.Sci.- 1984.- Vol.24, N 3.- P.164-175.
44. RANDIC M., WILKINS L. Graph theoretical approach to recognition of structural similarity in molecules //J.Chem.Inf. Comp.Sci.- 1979.- Vol.19, № 1.- P.31-36.

45. RAO S.B. A survey of the theory of potentially P-graphic and forcibly P-graphic degree sequences // Lect. Notes Math.- 1981.- Vol.885.- P.417-440.

46. RASHEVSKY M. Life, information theory and topology // Bull.Math.Biophys.- 1955. Vol.17.- P.229-235.

47. SHANNON C.R., WEAVER W. The mathematical theory of communication.- Urbana: University of Illinois Press, 1949.

48. SHELLEY C.A., MUNK M.T. An approach to the assignment of canonical connection tables and topological symmetry perception // J.Chem.Inf.Comput.Sci.- 1979.- Vol.19, N 4.- P.247-250.

49. SKOROBOGATOV V.A., DOBRYNIN A.A. Metric analysis of graphs // Math.Chem. (MATCH).- 1988.- № 23.- P.105-151.

50. TRINAJSTIC N. Chemical graph theory.- Florida: CRC Press, Boca Raton, 1983.- 313 p.

51. TRUCCO E. A note of the information content of graphs // Bull.Math.Biophys.- 1956.- Vol.17.- P.129-135.

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

53. WIENER H. Vapor pressure-temperature relationship among the branched paraffin hydrocarbons // J.Chem.Phys.- 1948.- Vol.52.- P.425-430.

Поступила в ред.-изд.отд.

5 августа 1991 года

Список принятых обозначений

- $G(V, E)$ - граф G с множеством вершин $V = V(G)$ и мно-
жством ребер $E = E(G)$;
- p - число вершин в графе, $p = |V(G)|$;
- q - число ребер в графе, $q = |E(G)|$;
- s_i - степень вершины i ;
- $s(e)$ - степень ребра e ;
- $d(i, j)$ - расстояние между вершинами i и j ;
- $p(i, j)$ - цепное расстояние между вершинами i и j ;
- $el(i, j)$ - длина самой длинной связывающей (i, j) -цепи;
- g_i - число пар вершин, находящихся на расстоянии i ;
- $d(i)$ - дистанция вершины;
- $d(G)$ - диаметр графа;
- $r(G)$ - радиус графа;
- $e(v)$ - эксцентриситет вершины;
- $e_T(v)$ - цепной эксцентриситет вершины;
- $k(G, v_0)$ - длина относительного разбиения;
- $V_j(v)$ - j -слой одновершинного разбиения;
- P_k - простая цепь длины k ;
- $\lambda = \|\lambda_{ij}\|$ - матрица слоев;
- $D = \|d_{ij}\|$ - матрица расстояний;
- $\tau = \|\tau_{ij}\|$ - цепная матрица слоев, где τ_{ij} равно числу
всех цепей длины j , соединяющих вершину i с
остальными вершинами;
- $A = \|a_{ij}\|$ - матрица смежности;
- μ - цикломатическое число;
- $\lfloor n/2 \rfloor$ - наибольшее целое число, не превышающее действитель-
ного числа $n/2$;
- C_p^k - число сочетаний из p по k .

Соответствия между структурными и численными
инвариантами графа

ТИП функции	структурный инвариант	ТИП функции	численный инвариант
$S_0(G, G)$	1. Множество $V(G)$ всех вершин графа	$P_0(G, G)$ [6, 27]	<p>1.1. Порядок графа: $p = V(G)$</p> <p>.....</p> <p>1.2. Связность графа: $\mathcal{X}(G)$ = наименьшее число вершин, удаление которых приводит к несвязному графу</p> <p>.....</p> <p>1.3. Число вершинного покрытия графа: $\alpha_0(G)$ = наименьшее число вершин, инцидентных всем ребрам графа</p> <p>.....</p> <p>1.4. Вершинное число независимости графа: $\beta_0(G)$ = наибольшее число попарно несмежных вершин</p> <p>.....</p> <p>1.5. Хроматическое число графа: $\gamma(G)$ = наименьшее число цветов, необходимое для раскраски графа так, что цвета всех смежных вершин различны</p> <p>.....</p> <p>1.6. Плотность графа: $\varphi(G)$ = наибольшее число попарно смежных вершин</p>

ТИП функции	структурный инвариант	ТИП функции	численный инвариант
$S_0(G, G)$	1. Множество $V(G)$ всех вершин графа	$P_0(G, G)$ [6, 27]	1.7. Число компонент графа: $k(G)$ = число связанных подграфов несвязного графа 1.8. Число Хадвигера: $\eta(G)$ = число вершин в наибольшей клике, на которую можно стянуть граф
$S_0(G, G)$	2. Множество $E(G)$ всех ребер графа	$P_0(G, G)$ [6, 27]	2.1. Число ребер в графе $q = E(G) $ 2.2. Реберная связность: $\lambda(G)$ = наименьшее число ребер, удаление которых приводит к несвязному графу 2.3. Число реберного покрытия графа: $\alpha_1(G)$ = наименьшее число ребер, инцидентных всем вершинам графа 2.4. Реберное число независимости графа: $\beta_1(G)$ = наибольшее число попарно несмежных ребер 2.5. Хроматический класс графа: $\chi'(G)$

ТИП функции	структурный инвариант	ТИП функции	Численный инвариант
$S_0(G, G)$	3. Кратчайший простой цикл C_k	$P_0(G, G)$ [6, 27]	3. Обхват графа: $g(G) = k$
	4. Длиннейший простой цикл C_k		4. Окружение графа: $c(G) = m$
	5. Множество всех кратчайших простых (u, v) -цепей графа		5.1. Диаметр графа: $d(G) = \max (\max_{v \in V(G)} d(u, v))$ 5.2. Радиус графа: $r(G) = \min (\max_{v \in V(G)} d(u, v))$
$S_0(G, G)$	6. Множество независимых простых циклов C	$P_0(G, G)$ [6, 27]	6. Циклический ранг: $m(G) = C $
$S_1(G, G)$	7. Совокупность множеств смежных вершин	$P_0(G, G)$ [6]	7.1. Мини-код: $\mu_0(G)$ = наименьший двоичный код, полученный из матрицы смежности 7.2. Число всех смежных вершин [Py-83]: $A'(G) = \sum_{i, j=1}^p a_{ij}$ 7.3. Определитель матрицы смежности: $\det A(G)$

ТИП функции	структурный инвариант	ТИП функции	Численный инвариант
$S_1(G, G)$	7. Совокупность множеств смежных вершин	$P_1(G, G)$ [6]	7.4. Неупорядоченный набор сумм элементов каждой строки матрицы смежности: $a(G) = (a_1, \dots, a_p),$ где $a_i = \sum_{j=1}^p a_{ij}$
$S_0^H(G, G)$	8. Граф G	$P_0(G, G)$ [6]	8. Цикломатическое число графа: $\mu(G) = q - p + k(G),$ где $k(G)$ - число компонент графа
$S_1^H(G, G)$	9. Множество всех i -клик графа	$P_1(G, G)$ [6]	9. Многочлен для подсчета всех клик: $F(G) = \sum_{i=0}^{\varphi(G)} f_i(G) \cdot x^i,$ где $f_i(G)$ - число i -клик
$S_2^H(G, G)$	10. Семейство всех подграфов с числом вершин i и числом ребер j	$P_1(G, G)$ [6]	10. Многочлен для подсчета всех (i, j) -подграфов $L(G) = \sum_{i, j \geq 0} l_{ij}(G) \cdot x^i \cdot y^j$

Таблица 2

Соответствия между структурными и численными
вершинными инвариантами

ТИП ФУНКЦИИ	структурный инвариант	ТИП ФУНКЦИИ	численный инвариант
$S_0(G, v)$	1. Множество вершин V_i смежных с i -вершиной	$P_0(G, v)$	1. Степень вершины [27] $s_i = V_i $
$S_1(G, v)$	2. Множество всех слоев одновершин ного разбиения	$P_0(G, v)$	2. Эксцентриситет вер- шины [27]: $e(v) = \max d(u, v)$ $u \in V(G)$

Таблица 3

Соответствия между структурными и численными
реберными инвариантами

ТИП ФУНКЦИИ	структурный инвариант	ТИП ФУНКЦИИ	численный инвариант
$S_0(G, e)$	1. Множество вершин, инцидентных $e = (u, v)$	$P_1(G, e)$	1. Степень ребра [27]: $s(e) =$ неупорядоченная пара (s_u, s_v) , где s_u и s_v - степени ин- цидентных вершин ребра
		$P_0(G, e)$	2. Степень ребра [45]: $s(e) = s_u + s_v - 2$

Соответствия между структурными инвариантами графа и его топологическими и информационными индексами

ТИП ФУНКЦИИ	структурный инвариант	ТИП ФУНКЦИИ	топологический или информационный индекс
$S_1(G, G)$	1. Множество 1-слоев всех одно вершинных разбиений графа	$P_0(G, G)$	1.1. Индекс молекулярной связности Рандича [42] $\chi(G) = \sum_{(i,j) \in E(G)} (s_i \cdot s_j)^{\frac{1}{2}} = \sum_{(i,j) \in E(G)} (\lambda_{i1} \cdot \lambda_{j1})^{\frac{1}{2}}$
			1.2. Индексы загребской группы [34] $M_1(G) = \sum_{i=1}^p s_i^2 = \sum_{i=1}^p (\lambda_{i1})^2$ $M_2(G) = \sum_{i,j=1}^p (s_i \cdot s_j)$
			1.3. Индекс сравнимости Гутмана и Рандича [35] $M_3(G) = \sum_{i=1}^p k_i^2$, где k_i - число вершин со степенью i .
			1.4. Индекс полной смежности [цит. 20] $A(G) = \sum_{i=1}^p \lambda_{i1} = 2q = \sum_{i,j=1}^p a_{ij}$
		$P_1(G, G)$	1.5. Степенная последовательность вершин [6] $S(G) = (s_1, \dots, s_p)$

ТИП ФУНКЦИИ	СТРУКТУРНЫЙ ИНВАРИАНТ	ТИП ФУНКЦИИ	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
$S_1(G, G)$	2. Множество 1-слоев всех одно реберных разбиений графа	$P_0(G, G)$	2.1. Индекс Платта [41] $F(G) = \sum_{i=1}^p \lambda_{i1} (\lambda_{i1} - 1) =$ $= \sum_{e \in E(G)} s(e)$
			2.2. Информационный индекс для распределения ребер графа [32] $I_{св.} = - \sum_{i=1}^N \frac{M_i}{M} \cdot \log_2 \frac{M_i}{M},$ где M_i - число ребер с одинаковым индексом χ_i (табл. 3, прил. 2)
$S_1(G, G)$	3. Множество 2-слоев всех одно вершинных разбиений графа	$P_0(G, G)$	3.1. Индекс Гордона-Скантлбери [цит. 20] $Y(G) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \lambda_{i2} = \frac{1}{2} \cdot F(G)$
			3.2. Информационный индекс эквивалентных связей (пар смежных ребер) [2] $C_{\eta} = 2\eta \cdot \log_2 \eta - \sum_{i=1}^N \eta_i \cdot \log_2 \eta_i$ где η_i - число эквивалентных связей, $\eta = \sum_{i=1}^N \eta_i$

ТИП функции	структурный инвариант	ТИП функции	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
$S_1(G, G)$	4. Множество 3-слоев всех одно вершинных разбиений графа	$P_0(G, G)$	4.1. Число полярности [53] $P(G) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^p \lambda_{i3}$
$S_1(G, G)$	5. Множество k-слоев всех одно вершинных разбиений графа	$P_1(G, G)$	5.1. Информационные индексы симметрии окрестностей [9] $IC_k = - \sum_{i=1}^N \frac{k_i}{p} \cdot \log_2 \frac{k_i}{p},$ где k_i - число вершин с совпадающей мощностью k-слоя, равной i. $TIC_k = p \cdot IC_k$ $SIC_k = IC_k / \log_2 p$ $VIC_k = IC_k / \log_2 q$ $CIC_k = \log_2 p - IC_k$
$S_2(G, G)$	6. Семейство всех слоев всех одно вершинных разбиений графа	$P_0(G, G)$	6.1. Индекс Винера [52] (дистанция графа) $W(G) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^p d_{ij} = \sum_{i,j} \lambda_{ij} \cdot j$ 6.2. Информационный аналог индекса Винера [30] $I_D^W = - \sum_{i=1}^N \frac{g_i \cdot i}{W} \cdot \log_2 \frac{g_i \cdot i}{W}$

ТИП функции	структурный индекс	ТИП функции	топологический или информационный индекс
S ₂ (G,G)	6. Семейство всех слоев всех одно вершинных разбиений графа	P ₀ (G,G)	6.3. Экцентриситет графа [22,27] $e(G) = \sum_{v \in V(G)} e(v),$ где e(v) — экцентриситет вершины (табл.2, прил.2)
			6.4. Индекс Балабана [28] $J(G) = \frac{q}{\mu+1} \cdot \sum_{(i,j) \in E(G)} (d(i) \cdot d(j))^{-\frac{1}{2}}$
			6.5. Индекс среднеквадратичных расстояний [28] $D^2(G) = \left[\frac{d(G)}{\sum_{j=1}^d g_j \cdot j^2} / \sum_{j=1}^d g_j \right]^{-\frac{1}{2}}$ $= \left[\frac{1}{p(p-1)} \cdot \sum_{i,j} \lambda_{ij} \cdot i^2 \right]^{-\frac{1}{2}}$
			6.6. Индекс молекулярной связности порядка k [37] $\chi^{(k)} = \sum_{P_k} \left(\prod_{j=1}^k s_j \right)^{-\frac{1}{2}}$
			6.7. Индекс расширенной связности Рандича [43] $ID = \sum_{k=0}^{d(G)} \left(\sum_{(i,j) \in P_k} (s_i \cdot s_j) \right)^{-\frac{1}{2}}$

ТИП функции	структурный индекс	ТИП функции	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
S ₂ (G,G)	6. Семейство всех слоев всех одно вершинных разбиений графа	P ₀ (G,G)	6.8. Индекс расстояний в графе [20] $GDI(G) = \sum_i (g_i)^2$
			6.9. Информационный центрический индекс [3] $I_c = - \sum_{i=1}^{r(G)} \frac{n_i}{p} \cdot \log_2 \frac{n_i}{p},$ где n _i - число вершин с одинаковым значением эксцентриситета i
			6.10. Информационный индекс автотметричности [8] $I_{авт.} = - \sum_{i=1}^N \frac{n_i}{p} \cdot \log_2 \frac{n_i}{p},$ где n _i - число вершин с совпадающими строками матрицы слоев
			6.11. Информационный дистанционный индекс вершин графа [8] $H_d = \sum_{i=1}^p H_d(v_i),$ (H _d (v _i)) - прил. 2, табл. 2)

ТИП функции	структурный индекс	ТИП функции	топологический или информационный индекс
$S_2(G, G)$	6. Семейство всех слоев всех одно вершинных разбиений графа	$P_0(G, G)$	6.12. Информационный слойевой индекс вершин графа [8] $H_\lambda = \sum_{i=1}^p H_\lambda(v_i)$ ($H_\lambda(v_i)$ -прил.2, табл.2)
		$P_1(G, G)$	6.13. Вектор количественного распределения вершин по слоям [23] $A(G) = \{a_j a_j = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \lambda_{i,j}\}$
$S_2(G, G)$	7. Семейство всех простых цепей все возможных длин	$P_0(G, G)$	7.1. Сложность графа [4] $\xi(G) = \frac{p \cdot q}{2(p+q)} \cdot \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q \tau_{i,j}$
			7.2. Цепной эксцентриситет графа [4] $e_\tau(G) = \sum_{v \in V(G)} e_\tau(v)$ ($e_\tau(v)$ -табл.2, прил.2)
			7.3. Цепная дистанция графа [4] $D_\tau(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d_\tau(v)$ ($d_\tau(v)$ -табл.2, прил.2)

ТИП ФУНКЦИИ	структурный индекс	ТИП ФУНКЦИИ	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
$S_2(G, G)$	7. Семейство всех простых цепей все возможных длин	$P_1(G, G)$	7.4. Вектор простых це- пей [18] $P(G) = (P_1, \dots, P_{d(G)})$, где P_i - число всех прост- тых цепей длины i : $P_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{e_\tau(G)} \tau_{ij}$
$S_2(G, G)$	8. Семейство множеств непересе- кающихся по ребрам простых цепей	$P_0(G, G)$	8.1. Индекс $\sigma(G)$ [39] (см. п.7)
$S_1^H(G, G)$	9. Множество порожденных подграфов $G_i, i=1..k$	$P_1(G, G)$	9.1. Вектор изоморфных вхождений подграфов G_i в граф G [15] $N = (n_1, \dots, n_k)$, где n_i - число изоморфных вхождений G_i в G

Таблица 2

Соответствия между структурными вершинными инвариантами
и топологическими, информационными индексами

ТИП функции	структурный инвариант	ТИП функции	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
$S_0(G, v)$	1.1-слой одновер- шинного разбиения	$P_0(G, v)$	1.1. Степень вершины [6] $s_i = V_1(v_i) = \lambda_{i1}$
$S_1(G, v)$	2. Множество всех слоев одно вершинного разбиения	$P_0(G, v)$	2.1. Индекс суммы рас- стояний (дистанция вер- шины) [22,31] $d(i) = \sum_{j=1}^p d_{ij} = \sum_{j=1}^p \lambda_{ij} \cdot j$
			2.2. Эксцентриситет вер- шины [22,27] $e(v) = \max_{u \in V(G)} d(v, u) = k(G, v)$
			2.3. Информационный сло- евой индекс вершины [8] $H_\lambda(i) = - \sum_{j=0}^{e(i)} \frac{\lambda_{ij}}{p} \cdot \log_2 \frac{\lambda_{ij}}{p}$
			2.4. Информационный дис- танционный индекс вер- шины [8] $H_d(i) = - \sum_{j=1}^p \frac{d_{ij}}{d(i)} \cdot \log_2 \frac{d_{ij}}{d(i)}$

ТИП ФУНКЦИИ	СТРУКТУРНЫЙ ИНВАРИАНТ	ТИП ФУНКЦИИ	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
$S_1(G, v)$	3. Множество простых цепей возможных длин, исходящих из данной вершины	$P_0(G, v)$	3.1. Цепная дистанция вершины [4] $d_{\tau}(i) = \sum_{j=1}^p p(i, j) = \sum_{j=1}^p \tau_{ij} \cdot j$ $e_{\tau}(i)$
			3.2. Цепной эксцентриситет вершины [4] $e_{\tau}(v) = \max_{u \in V(G)} el(v, u)$
		$P_0(G, v)$	3.3. Среднеквадратичное отклонение вершины [22] $m_2(v) = \frac{1}{p} \sum_{v \in V(G)} [d(u, v)]^2$
		$P_1(G, v)$	3.4. Вектор простых цепей вершины j [44] $p(j) = (\tau_{j1}, \dots, \tau_{jk(G, j)})$
$S_1(G, V)$	4. Множество всех слоев по отношению к центру графа	$P_0(G, G)$	4. Центрические топологические индексы, например центрический индекс [31] $C(G) = \sum_{i=1}^{k(G, V_c)} \delta_i^2$ <p>где δ_i - число вершин i-слоя относительного разбиения по отношению к V_c, левые степени которых равны 1</p>

Таблица 3

Соответствия между структурными реберными инвариантами
и топологическими, информационными индексами

ТИП ФУНКЦИИ	СТРУКТУРНЫЙ ИНВАРИАНТ	ТИП ФУНКЦИИ	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
$S_0(G, e)$	1.1-слой одно- реберного разбиения	$P_0(G, e)$	1.1. Частичный индекс Рандича [42, 44] $\chi_e = (s_i \cdot s_j)^{\frac{1}{2}} = (\lambda_{i1} \cdot \lambda_{j1})^{\frac{1}{2}}$ где $e = (i, j) \in E(G)$
$S_2(G, E)$	2. Семейство множеств неинциден- тных ребер	$P_0(G, G)$	2.1. Индекс Хосойи [36] $Z(G) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{p}{2} \rfloor} p(G, k)$ где $p(G, k)$ — число спосо- бов, с помощью которых к ребер графа G могут быть выбраны так, что никакие два не будут смежными
			2.2. Средний информаци- онный индекс для разло- жения графа по Хосойи [36] $I_Z = - \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{p}{2} \rfloor} \frac{p(G, k)}{Z(G)} \cdot \log_2 \frac{p(G, k)}{Z(G)}$

Таблица 4

Соответствия между структурными инвариантами подграфов
и топологическими, информационными индексами

ТИП ФУНКЦИИ	СТРУКТУРНЫЙ ИНВАРИАНТ	ТИП ФУНКЦИИ	ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИЛИ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНДЕКС
$S_0(G, H)$	1. Подграф $H=(V', E')$	$P_0(G, H)$	1.1. Число n изоморфных вхождений подграфа H в граф G [15]
			1.2. Внутренние и внеш- ние фрагментные тополю- гические индексы [38] (см. п.6)
$S_1(G, H)$	2. Множество всех слоев по отношению к множеству вершин V' подграфа H	$P_0(G, H)$	2.1. Дистанция подграфа H в G [49] $D_G(H) = \sum_{\substack{u \in V' \\ v \in V(G)}} d(u, v)$
			2.2. Относительная дис- танция H в G [49] $D(H, G) = \frac{D_G(H)}{W(G)}$
			2.3. Эксцентриситет под- графа H в графе G [49] $e_G(H) = \sum_{\substack{u \in V' \\ v \in V(G)}} \max d(u, v)$
			2.4. Относительный экс- центриситет H в G [49] $e(H, G) = \frac{e_G(H)}{e(G)}$