

УДК 519.1

ГЕНЕРАЦИЯ ГРАФОВ НЕРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПЕНТАГОНАЛЬНЫХ И
ПЕНТАГЕКСАГОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ

А.А.Добрынин

В в е д е н и е

Конструктивное перечисление графов является удобным и часто единственным средством исчерпывающего изучения их свойств, классификации и нахождения графов с заданными параметрами, построения контрпримеров [1]. Графы полициклических систем состоят из соединенных друг с другом по ребрам n -угольных граней на плоскости. С такими классами графов связаны интересные математические задачи роста клеток или n -угольных "животных", комбинаторные задачи перечисления полимино и замощения плоскости наборами полимино [2,3]. С другой стороны, изучение графов этих классов важно для приложений, так как они моделируют структурные объекты в естественных науках - химии, физике, биологии и т.п. [4-11]. Так, в органической химии большое внимание уделяется графам гексагональных систем (шестиугольных "монстров"), так как они соответствуют структуре бензоидных (ароматических) углеводородов. Литература, посвященная задачам перечисления и изучения свойств различных подклассов графов гексагональных систем, насчитывает сотни наименований. Менее изучены графы, содержащие пятиугольные кольца и также соответствующие молекулярным графам химических соединений [12]. Количество гра-

фов указанных классов с ростом числа колец возрастает экспоненциально, следовательно, алгоритмы перечисления должны быть достаточно эффективны. В настоящей работе рассматриваются методы конструктивного перечисления графов неразветвленных пентагональных и пентагексагональных систем, состоящих из пяти- и шестиугольных колец на плоскости. Для построения алгоритмов генерации используется подход, предложенный для порождения графов гексагональных систем [13,14].

§1. Графы пентагональных систем

Рассматриваются конечные графы без петель и кратных ребер, $V(G)$ - множество вершин графа G , $|V(G)| = P_G$ - порядок графа. Определим класс графов, в которых все внутренние грани являются пятиугольными и две произвольные грани либо являются смежными, т.е. имеют единственное общее ребро, либо не имеют общих вершин, и никакие три грани не имеют общих вершин. Поставив в соответствие каждой пятиугольной грани новую вершину и соединив такие вершины, если существующие грани являются смежными, получим характеристический граф исходного графа. Обозначим K_5 класс графов, для которых их характеристический граф изоморфен простой цепи. Графы класса K_5 моделируют молекулярные структуры неразветвленных (характеристический граф не имеет вершин степени более двух), ката-конденсированных (характеристический граф не содержит циклов) химических соединений. На рис.1 классу K_5 принадлежат только графы G_1 и G_2 . Порядок любого такого графа из h колец равен, очевидно, $3h + 2$, и все вершины графа имеют степень 2 или 3. Все графы из K_5 являются планарными. Пятиугольную грань вместе с ее границей будем называть кольцом графа. Концевым кольцам соответствуют вершины характеристического графа степени один. Пусть каждое кольцо графа является правильным пятиугольником, тогда все графы класса K_5 можно разбить на два непересекающихся подмножеств-

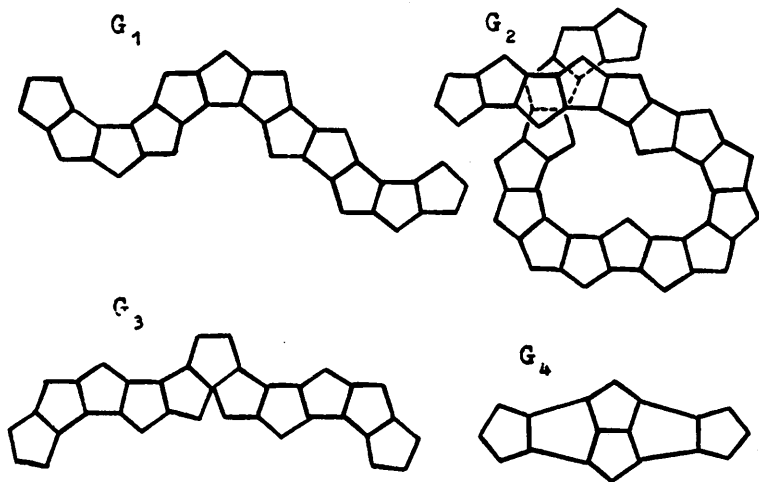


Рис. 1

ва, одно из которых содержит графы, изображаемые на плоскости без самопересечений (граф G_1 на рис.1), а другое содержит графы, при изображении которых не обойтись без пересечений ребер (граф G_2). Определим границу графа как подграф, содержащий все ребра, каждое из которых принадлежит единственному кольцу. Если при расположении графа на плоскости все внутренние грани являются пятиугольными, то ребра границы графа будут смежны с бесконечной гранью. Рассматриваемая как граф или как частичный подграф граница графа изоморфна простому циклу порядка $3h + 2$, содержащему все вершины графа. Полуграница графа есть связный подграф границы, содержащий по одному ребру каждого концевых колец (рис.2а). Термины и обозначения, не определяемые здесь и далее, соответствуют [15].

§2. Представление графов полуграниц

Рассматривая полуграницу графа как простую цепь, определим обход полуграницы как последовательный просмотр ее вершин, начиная с некоторой концевой вершины. При обходе полуграницы будем наблюдать, каким кольцам принадлежат ее ребра. Кольцо графа вносит в полуграницу либо ребро, либо пару инцидентных ребер. Кольца графа, смежные с кольцом, порождающим на полугранице единственное ребро, назовем парными на этой полугранице. Другими словами, два кольца являются парными, если они не смежны в графе, но имеют смежные вершины на соответствующей полугранице. В графе на рис. 2а кольца 1 и 3 будут парными на полугранице G_1 , а кольца 4 и 6 - на полугранице G_2 .

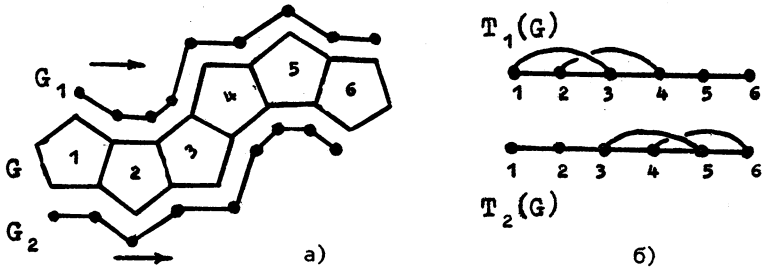


Рис. 2

Поставим в соответствие графу G два новых графа, структура которых отражает парность колец при обходе полуграниц. Соединив для этого в характеристическом графе ребром каждую пару вершин, отвечающих парным кольцам на полугранице, получим граф полуграницы. На рис. 2б приводятся графы полуграниц $T_1(G)$ и $T_2(G)$ графа G . В графе полуграницы ребра характеристического графа будем изображать отрезками прямых, а криволинейными ребрами (или дугами) соединим вершины, соответствующие парным кольцам. Так как любое кольцо графа может быть парным не

более чем с двумя другими кольцами на полугранице, то степень концевой вершины в графе полуграницы $1 \leq \deg(v) \leq 2$, степень смежной с ней вершины $2 \leq \deg(v) \leq 3$ и степень остальных вершин $2 \leq \deg(v) \leq 4$. На рис.3 изображены все неизоморфные графы с числом колец 6 и их графы полуграниц.

Особенности графов пентагональных систем налагают ограничения на структуру графов полуграниц. Следующее свойство является определяющим для графов полуграниц T_1 и T_2 .

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. *Две произвольные вершины на расстоянии 2 в характеристическом графе соединены дугой либо в T_1 , либо в T_2 .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО следует из того, что графы образованы из пятиугольных колец. Если кольцо графа не является концевым, то два его ребра являются общими со смежными кольцами и не могут принадлежать полуграницам. Между двумя полуграницами графа необходимо распределить оставшиеся три ребра кольца, т.е. любая пара колец (на расстоянии 2 в характеристическом графе) будет парной на какой-либо из полуграниц.

Определим для графа полуграницы T операцию дополнения, результатом которой является граф T' . Граф T' имеет структуру графа полуграниц и строится из T следующим образом. Все дуги в графе T удаляются, и пара вершин соединяется новой дугой, если они не были соединены ранее дугой в T . Ясно, что $(T')' \cong T$ и T' является графом второй полуграницы.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. *Произвольный граф T , представленный в форме графа полуграницы, определяет единственный граф из класса пентагональных систем.*

Для доказательства заметим, что по графу T однозначно восстанавливается последовательность присоединения колец к на-

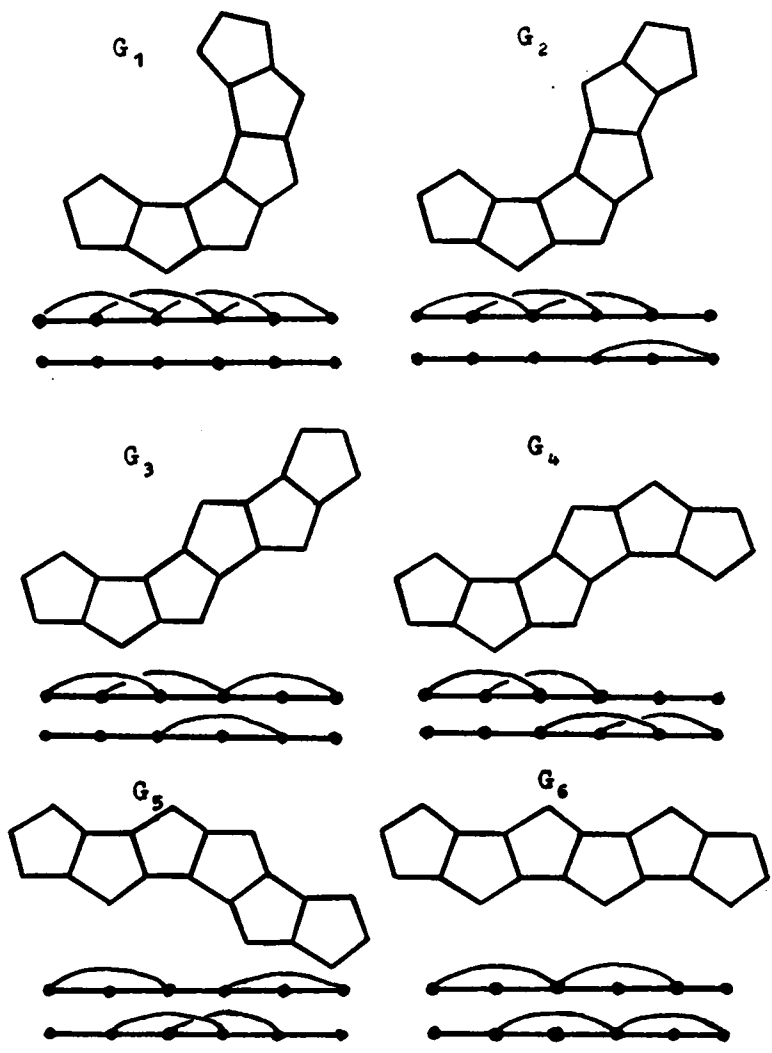


Рис. 3. Графы полуграниц систем из 6 колец

чальному графу, состоящему из пары пятиугольных колец, что однозначно определяет и смежность вершин графа.

Так как в простой цепи с числом вершин h существуют $h-2$ пар вершин на расстоянии 2 друг от друга, то сразу можно сделать оценку числа графов пентагональных систем $|K_5| \leq 2^{h-2}$. Равенство при $h \geq 3$ никогда не будет достигаться, поскольку при подсчете графов не учитывались их симметрии. Для $h = 6$ имеем $|K_5| \leq 16$, в то время как точное значение числа графов $|K_5| = 6$.

§3. Свойства графов полуграниц

Сформулируем условия изоморфности пары графов пентагональных систем и условия симметричности графов в терминах их графов полуграниц. Если графы являются изоморфными, то при отображении друг на друга их графы полуграниц должны также переходить друг в друга. Так как каждую полуграницу можно обходить в двух встречных направлениях и граф имеет две полуграницы, то для определения изоморфности графов необходимо и достаточно проверить совпадение графов их полуграниц. Зафиксируем какое-либо кольцо графа, с которого будет обходиться его полуграница. Для графа полуграницы T определим операцию инверсии, результатом которой является граф T^* той же полуграницы, полученный при ее обходе с противоположного конца (рис. 4). Очевидно, что $(T^*)^* \simeq T$ и полуграницы T и T^* определяют один и тот же граф. Операции инверсии и дополнения графа полуграницы перестановочны друг с другом $(T^*)' \simeq (T')^*$. В следующем утверждении учитываются возможные способы совпадения полуграниц графов.

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Графы G и H изоморфны, если и только если выполняется одно из условий:

а) $T(G) \simeq T(H)$;

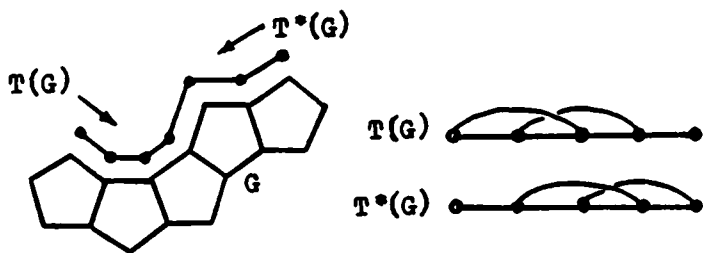


Рис. 4.

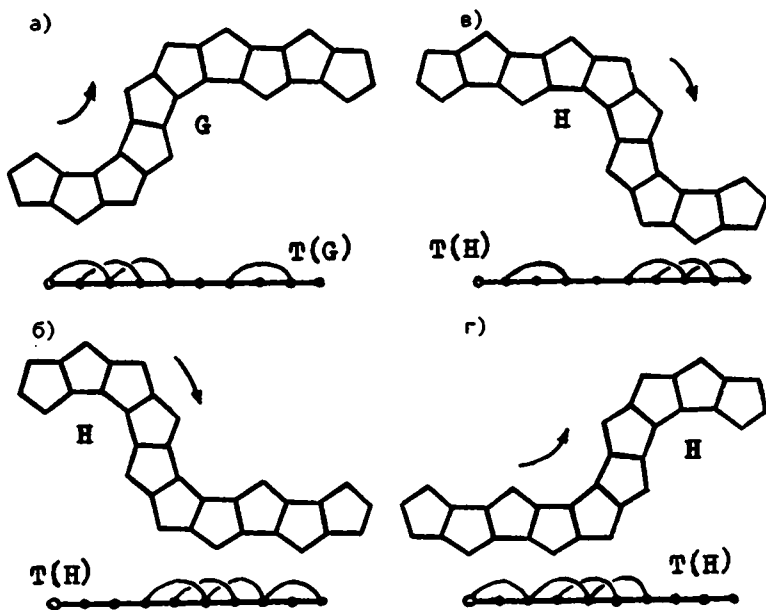


Рис. 5.

- б) $T(G) \simeq T'(H)$;
- в) $T(G) \simeq T^*(H)$;
- г) $T(G) \simeq (T')^*(H)$.

Различные случаи совпадения графов полуграниц для пары графов показаны на рис.5. Граф называется симметричным, если его группа автоморфизмов не является тождественной. При некотором автоморфизме графа (изоморфизме на себя) полуграницы графа переходят друг в друга. Поэтому предыдущее утверждение можно использовать для распознавания типа симметрии графа.

УТВЕРЖДЕНИЕ 4. Граф G с числом колец h является симметричным, если и только если выполняется одно из условий:

1) $T(G) \simeq T^*(G)$. Граф G является зеркально-симметричным; при отображении графа на себя вершины i -го кольца отображаются на вершины $(h-i+1)$ -го кольца одной и той же полуграницы, и обратно;

2) $T(G) \simeq (T')^*(G)$. Граф G является центрально-симметричным; при отображении графа на себя вершины i -го кольца одной полуграницы отображаются на вершины $(h-i+1)$ -го кольца другой, и обратно.

Все виды симметрии и графы полуграниц можно увидеть на рис.3 для графов из K_5 с шестью кольцами. Графы G_1 и G_5 являются зеркально-симметричными, а G_4 и G_6 - центрально-симметричными.

СЛЕДСТВИЕ. Среди графов класса K_5 с нечетным числом колец центрально-симметричных графов не существует.

Действительно, операция инверсии не изменяет числа дуг графов полуграницы, поэтому сумма числа дуг в графах $T(G)$ и $(T')^*(G)$ равна $h-2$ и является нечетной. Следовательно, гра-

фы $T(G)$ и $(T')^*(G)$ имеют различное число дуг и не могут быть изоморфными.

§4. Представление графов полуграниц

Замена графа из класса K_5 графами его полуграниц обусловлена тем, что последние можно удобно представить двоичными наборами с переносом на них всех свойств графов полуграниц. Пусть граф G состоит из h колец и вершины графа полуграницы $T(G)$ последовательно пронумерованы по направлению обхода полуграницы. Графу $T(G)$ поставим в соответствие двоичный набор Π из h элементов (разрядов), в котором i -й элемент Π_i , $i = 1, 2, \dots, h$, задается как

$$\Pi_i = \begin{cases} 1, & \text{если вершины } v_i \text{ и } v_{i+2} \text{ соединены в } T(G) \\ & \text{дугой;} \\ 0 & \text{- в противном случае.} \end{cases}$$

По построению двоичного набора два его последних элемента будут равны нулю для любых графов полуграниц, поэтому их можно отбросить. Нетрудно показать, что соответствие графов полуграниц и их двоичных представлений является взаимно-однозначным. Следовательно, граф класса K_5 из h колец представляется в виде двоичного набора разрядности $h-2$. Такой двоичный набор будем называть кодом полуграницы, или кодом графа. Графы пентагональных систем с числом колец $h = 6$ на рис. 3 для верхней полуграницы имеют коды $G_1 = (1111)$, $G_2 = (1110)$, $G_3 = (1101)$, $G_4 = (1100)$, $G_5 = (1001)$ и $G_6 = (1010)$. Для кодов графов выполняются свойства, аналогичные свойствам графов полуграниц.

УТВЕРЖДЕНИЕ 5. Произвольный двоичный набор разрядности $h-2$ определяет единственный граф класса неразветвленных пентагональных систем.

Операция дополнения для двоичного набора Π , как легко заметить, совпадает с операцией его поразрядного логического отрицания $\bar{\Pi}$. Распространим операцию инверсии графа полуграницы на его двоичный код. Так как отношение парности колец графа G является симметричным, то инверсия набора $\Pi(G)$ разрядности $h-2$ порождает двоичный набор $\Pi^*(G)$ той же разрядности, в котором i -й разряд совпадает с $(h-i+1)$ -м разрядом набора $\Pi(G)$ для всех $i = 1, 2, \dots, h$. Таким образом, набор $\Pi^*(G)$ получается обратной перенумерацией или обратным просмотром разрядов $\Pi(G)$. Поэтому утверждения об установлении изоморфности графов и определении типа симметрии графа без изменений переносятся на двоичные коды графов. В частности, при нечетных значениях h в случае существования центрально-симметричных графов должно было бы выполняться $\Pi = \bar{\Pi}^*$, т.е. центральный разряд двоичного набора должен одновременно равняться 0 и 1, что невозможно.

Коды всех графов класса K_5 с числом колец h содержатся в множестве положительных чисел $\mathbb{Z}_{h-2} = \{0, 1, 2, \dots, 2^{h-2}-1\}$, состоящих из $h-2$ разрядов (нулевой разряд учитывается). Если для записи числа необходимо менее $h-2$ разрядов, то они дополняются нулями до количества $h-2$. Отображение $f: K_5 \rightarrow \mathbb{Z}_{h-2}$ не является однозначным, так как одному и тому же графу могут соответствовать различные коды, например, коды Π и Π^* определяют один и тот же граф.

§5. Алгоритмы генерации графов

Коды графов удобно рассматривать как целые числа с естественным порядком. Будем последовательно перебирать коды графов, начиная с наименьшего. Так как коды Π и $\bar{\Pi}$ определяют один и тот же граф, то рассмотрение только таких Π , для которых выполняется $\Pi < \bar{\Pi}$, отсекает часть кодов, графы которых уже были просмотрены ранее. Алгоритм порождения графов класса K_5

состоит в просмотре всех чисел соответствующей разрядности и проверке полученного на некотором шаге графа (его кода) на новизну. Обозначения в алгоритме: N - потенциально возможное количество кодов графов, n - число-кандидат на код графа.

Алгоритм 1. Генерация графов класса K_3

Вход: h - число колец в порождаемых графах.

Выход: Count - количество всех неизоморфных графов из h колец.

Метод: 1. $N \leftarrow 2^{h-2} - 1$;

2. Count $\leftarrow 0$;

3. для $n \leftarrow 0$ до N шаг 1 цикл;

если $n < \bar{n}$ то

если { ранее не было получено
графа, определяемого кодом n }

то Count \leftarrow Count+1 ;

Конец.

Модифицировать алгоритм 1 позволяет следующее

УТВЕРЖДЕНИЕ 6. Если число n состоит из m разрядов (считая нулевой разряд), то при $n < 2^{m-1}$ выполняется $n < \bar{n}$, иначе при $n \geq 2^{m-1}$ выполняется $n > \bar{n}$.

Действительно, при $n \leq 2^{m-1} - 1$ старший $(m-1)$ -й разряд числа n равен 0, следовательно, в \bar{n} старший разряд равен 1, а при $n \geq 2^{m-1}$ выполняется обратное.

Таким образом, в алгоритме 1 значения кодов n в интервале $2^{h-3} \leq n \leq 2^{h-2} - 1$ можно не рассматривать, а для оставшихся значений кодов не проверять неравенства $n < \bar{n}$. Алгоритм 1 преобразуется к более простому виду.

Алгоритм 2. Генерация графов класса K_5

Вход: h - число колец в порождаемых графах.

Выход: $Count$ - количество всех неизоморфных графов из h колец.

Метод: 1. $N \leftarrow 2^{h-3} - 1$;

2. $Count \leftarrow 0$;

3. для $n \leftarrow 0$ до N шаг 1 цикл;

если $\left\{ \begin{array}{l} \text{ранее не было получено} \\ \text{графа, определяемого кодом } n \end{array} \right\}$

то $Count \leftarrow Count + 1$;

Конец.

Рассмотрим условия для неповторной генерации кодов графов. В [13] были установлены условия неповторности генерации кодов полуграниц графов гексагональных систем, представленных числами n_1 и n_2 . Коды графов перебираются в двух циклах, как показано ниже:

для $n_1 \leftarrow 0$ до N шаг 1 цикл;

для $n_2 \leftarrow n_1 + 1$ до N шаг 1 цикл.

Отметим, что отношение порядка на числах n_1^* и n_2^* заранее не известно.

УТВЕРЖДЕНИЕ 7 [13]. Пусть $n_1^* < n_2^*$, тогда если выполняется неравенство $n_1 > n_1^*$, то граф с кодами n_1 и n_2 уже был получен ранее, иначе при $n_1 < n_1^*$ граф появляется в первый раз. В случае равенства $n_1 = n_1^*$ при $n_2 > n_2^*$ граф был получен ранее, а при $n_2 < n_2^*$ граф является новым. При выполнении $n_1^* > n_2^*$ значения n_1^* и n_2^* во всех вышеприведенных условиях необходимо поменять местами.

Пусть на текущем шаге алгоритма 2 получен граф с кодом n , $n < \bar{n}$. Какие другие коды могут порождать такой же граф? Это, очевидно, коды n^* и \bar{n}^* . Отношения порядка на числах n^* и \bar{n}^* зависят от четности кода n .

УТВЕРЖДЕНИЕ 8. Для пары чисел n и \bar{n} выполняются неравенства: $n^* < \bar{n}^*$ для четных значений n и $n^* > \bar{n}^*$ для нечетных значений n .

Пусть число n является четным, тогда его нулевой разряд равен 0 и в двоичной записи $n = (0, \alpha)$, где α есть строка остальных разрядов n . Имеем $n^* = (0, \alpha)^* = (\alpha^*, 0) < (\alpha^*, 1) = (\alpha^*, \bar{0}) = (\bar{0}, \alpha^*) = (\bar{0}, \alpha)^* = \bar{n}^*$. Для нечетных значений n аналогично $n^* = (\alpha^*, 1) > (\alpha^*, 0) = \bar{n}^*$.

Рассмотрим четные и нечетные значения n по отдельности. При четных значениях, если $n = n^*$, то $\bar{n} = \bar{n}^*$. В числах n и \bar{n} их разряды расположены симметрично относительно центра, т.е. пара таких чисел будет порождаться только одним раз. Обратясь к утверждению 7, получим, что при выполнении неравенства $n \leq n^*$ граф с кодом n будет сгенерирован первый раз. Пусть теперь n является нечетным (в утверждении 7 все вхождения n^* необходимо заменить на \bar{n}^*). Условие $n < \bar{n}^*$, гарантирующее получение нового графа, не выполняется, если в n старший разряд равен 1, т.е. при $n \geq 2^{h-3}$ вследствие неравенства $n = (1, \alpha) > (\bar{\alpha}^*, 0) = \bar{n}^*$. Суммируем все условия неповторной генерации кодов графов класса K_5 .

УТВЕРЖДЕНИЕ 9. При четных значениях n и выполнении неравенства $n \leq n^*$, а также при нечетных значениях $n \leq 2^{h-3} - 1$ и выполнении неравенства $n \leq \bar{n}^*$ граф с кодом n порождается впервые.

Окончательно алгоритм генерации графов неразветвленных пентагональных систем принимает следующий вид.

Алгоритм 3. Генерация графов класса K_5

Вход: h - число колец в порождаемых графах.

Выход: Count - количество всех неизоморфных графов из h колец.

- Метод:
1. $Count \leftarrow 0$;
 2. $N \leftarrow 2^{h-3} - 2$;
 3. для $n \leftarrow 0$ до N шаг 2 цикл;
если $n \leq n^*$ то $Count \leftarrow Count+1$;
 4. $N \leftarrow 2^{h-3} - 1$;
 5. для $n \leftarrow 1$ до N шаг 2 цикл;
если $n \leq \bar{n}^*$ то $Count \leftarrow Count+1$;

Конец.

В алгоритме 3 перечисляется множество значений взаимно-однозначного отображения $f: K_5 \rightarrow M_1 \cup M_2$, где

$$M_1 \subseteq \{0, 2, 4, \dots, 2^{h-3} - 2\}, \quad M_2 \subseteq \{1, 3, 5, \dots, 2^{h-3} - 1\} \text{ и } M_1 = \{n | n \leq n^*\}, M_2 = \{n | n \leq \bar{n}^*\}.$$

По утверждению 4, граф будет зеркально-симметричным, если $n = n^*$, и центрально-симметричным при $n = \bar{n}^*$. Граф с четным значением кода Π (при любой четности числа колец h) не может быть центрально-симметричным. Действительно, из условия допустимости кода $n = (0, \alpha) \leq n^* = (\alpha^*, 0)$ следует, что последний разряд в α не равен 1, отсюда $n = (0, \alpha) \neq (\bar{\alpha}^*, 1) = \bar{n}^*$. Граф с нечетным значением кода Π не может быть зеркально-симметричным. В этом случае из условия допустимости кода $n = (1, \alpha) \leq \bar{n}^* = (\bar{\alpha}^*, 0)$ также вытекает, что последний разряд α не равен 1, т.е. $n = (1, \alpha) \neq (\alpha^*, 1) = n^*$. Преобразуем алгоритм 3 для выделения симметричных графов.

Алгоритм 4. Генерация с подсчетом симметричных графов

Вход: h - число колец в порождаемых графах.

- Выход:
1. $Count$ - число всех неизоморфных графов из h колец;
 2. $Mirror$ - число зеркально-симметричных графов;

3. **Center** - число центрально-симметричных графов.

Метод: 1. **Count**, **Mirror**, **Center** $\leftarrow 0$;

2. $N \leftarrow 2^{h-3} - 2$;

3. для $n \leftarrow 0$ до N шаг 2 цикла;

3.1. если $n \leq n^*$ то **Count** \leftarrow **Count**+1;

3.2. если $n = n^*$ то **Mirror** \leftarrow **Mirror**+1;

4. $N \leftarrow 2^{h-3} - 1$;

5. для $n \leftarrow 1$ до N шаг 2 цикла;

5.1. если $n \leq \bar{n}^*$ то **Count** \leftarrow **Count**+1;

5.2. если $n = \bar{n}^*$ то **Center** \leftarrow **Center**+1;

Конец.

Из простого анализа алгоритма 3 сразу следует оценка трудоемкости генерации графов класса K_5 . При определении трудоемкости алгоритма считалось, что каждое из действий сложения, сравнения и поразрядных логических действий над парой целых чисел фиксированной разрядности составляет одну операцию. Самой трудоемкой частью алгоритма 3 является вычисление инверсных чисел n^* для целых чисел n . В числе n просматривается все его разряды, начиная со старшего, и формируется число n^* . Инверсные числа можно вычислять до выполнения циклов алгоритма 3 и расположить их в массиве **INV** таким, что $INV[n] = n^*$. Интересно было бы выяснить возможность построения для n его инверсного числа за меньшее, чем $O(h)$ число операций.

УТВЕРЖДЕНИЕ 10. Временная трудоемкость алгоритма 3 генерации графов, состоящих из h пятиугольных колец, составляет $O(h2^{h-3})$ операций.

Рассмотрим затраты памяти в алгоритме 3. Единицей измерения памяти будем рассматривать байт, содержащий 8 двоичных разрядов. Для хранения инверсных чисел разрядности до $h-3$ включительно (максимальное число колец в графах равно h) массив **INV** занимает память в $\left\lceil \frac{h-3}{8} \right\rceil 2^{h-3}$ байт и его размер

с ростом h возрастает очень быстро. Так, для графов с числом колец $h \leq 19$ (код занимает 2 байта) массив инверсных чисел имеет объем $2^{17} \approx 130$ К байт. Покажем, как можно получить инверсные числа для графов с числом колец до 38, используя массив INV для графов с числом колец 19.

Пусть число n требует для своей записи h разрядов и $17 \leq h \leq 32$. Определим число m_1 , содержащее 4 байта, все разряды которого в двух младших байтах равны 1, а в двух старших байтах равны 0. Число m_2 образуем из m_1 перестановкой пар младших и старших байтов. Массив INV содержит все инверсные числа, для записи которых требуется 16 разрядов, т.е. для одного элемента INV достаточно двух байт. Положим $INV[0] = 0$. В приведенном ниже фрагменте алгоритма поразрядные логические операции И и ИЛИ обозначены как \wedge и \vee , а функции $shl(n, k)$ и $shr(n, k)$ осуществляют сдвиг всех разрядов числа n на k позиций влево и вправо соответственно.

Пусть исходный код

$$n = (a, b, \dots, d | e, f, \dots, g, 0, 0, \dots, 0),$$

тогда его инверсный код n^* получается следующими операциями:

1. $A_1 \leftarrow n \wedge m_1$; $A_1 = (a, b, c, \dots, d | 0, 0, \dots, 0)$;
2. $A_2 \leftarrow shl(n \wedge m_2, 16)$; $A_2 = (e, f, \dots, g, 0 | 0, 0, \dots, 0)$;
3. $A_1 \leftarrow Inv[A_1]$; $A_1 = (d, \dots, c, b, a | 0, 0, \dots, 0)$;
4. $A_2 \leftarrow Inv[A_2]$; $A_2 = (g, \dots, f, e, 0 | 0, 0, \dots, 0)$;
5. $A_1 \leftarrow shr(A_1, h-16)$; $A_1 = (0, \dots, 0, d, \dots | b, a, 0, \dots, 0)$;
6. $n^* \leftarrow A_1 \vee A_2$; $n^* = (g, \dots, f, e, d, \dots | b, a, 0, 0, \dots, 0)$.

Отсюда следует, что при сформированном массиве инверсных чисел из h разрядов, для любого числа n разрядности h' , $h \leq h' \leq 2h$, его инверсный набор вычисляется за констант-

ное число операций. Для графов с числом колец h' таким способом существенно сокращаются затраты памяти и снижается временная трудоемкость алгоритма до $O(2^{h-3})$ операций.

Алгоритм 3 реализован на языке Фортран в среде MS-DOS для персонального компьютера. Программа генерирует коды графов пентагональных систем с числом колец $3 \leq h \leq 30$, массив ДПВ имеет размер 2^{15} байт. Коды графов представлялись целыми числами, при формировании чисел Π^* использовались поразрядные логические операции. В таблице приводится время генерации графов неразветвленных пентагональных систем с различным числом колец и разным типом симметрии. В этой и далее в других таблицах \mathbb{N} обозначает количество зеркально-симметричных графов, \mathbb{C} - число центрально-симметричных графов и \mathbb{A} - количество асимметричных графов. Для генерации графов использовался компьютер типа IBM PC AT/286 (12 МГц). Инверсные наборы для кодов графов с числом колец $3 \leq h \leq 18$ вычислялись каждый раз заново, а для графов с $19 \leq h \leq 27$ по указанному выше способу использовались уже построенные инверсные наборы кодов. Поэтому для $h = 19$ наблюдается снижение времени генерации графов.

Определим точное число графов пентагональных неразветвленных систем из h колец, порождаемое алгоритмом генерации.

УТВЕРЖДЕНИЕ 11. Число графов класса K_5 дается выражением

$$|K_5| = \begin{cases} 2^{h-4} + 2^{(h-4)/2} & \text{при } h \text{ четном,} \\ 2^{h-4} + 2^{(h-5)/2} & \text{при } h \text{ нечетном.} \end{cases}$$

Получение количества графов основывается на следующих соображениях. Дуги, соединяющие вершины на расстоянии 2 друг от друга в цепочке из h вершин, можно расположить 2^{h-2} способами. При подсчете из пары кодов Π и Π^* , $\Pi \neq \Pi^*$, код

Т а б л и ц а

Генерация графов класса K_5

h	ш	о	а	Всего	Время, с
1	1	0	0	1	-
2	1	0	0	1	-
3	1	0	0	1	-
4	1	1	0	2	-
5	2	0	1	3	-
6	2	2	2	6	-
7	4	0	6	10	-
8	4	4	12	20	-
9	8	0	28	36	-
10	8	8	56	72	-
11	16	0	120	136	-
12	16	16	240	272	-
13	32	0	496	528	1
14	32	32	992	1056	2
15	64	0	2016	2080	5
16	64	64	4032	4160	8
17	128	0	8128	8256	18
18	128	128	16256	16512	21
19	256	0	32640	32896	11
20	256	256	65280	65792	21
21	512	0	130816	131328	43
22	512	512	261632	262656	85
23	1024	0	523776	524800	169
24	1024	1024	1047552	1049600	339
25	2048	0	2096128	2098176	679
26	2048	2048	4192256	4196352	1355
27	4096	0	8386560	8390656	2713

Π^* отбрасывается, так как он не порождает нового графа. Для зеркально-симметричных графов с четным числом колец, число которых равно $2^{(h-2)/2}$, коды совпадают $\Pi = \Pi^*$. Отсюда имеем оценку $|K_5| \leq \frac{1}{2} 2^{h-2} + 2^{(h-2)/2}$. Далее остается заметить, что с каждым кодом Π связан код $\bar{\Pi}$ того же графа и т.д. Следовательно, $|K_5| = \frac{1}{2} \left[2^{h-2} + 2^{(h-2)/2} \right]$.

Для нечетного числа колец количество зеркально-симметричных графов составляет $2^{(h-3)/2}$. Подробный вывод числа такого типа конфигураций можно найти в других работах, например, в [16] используются методы теории перечисления графов.

§6. Вычисление дистанции графов (индекса Винера)

Дистанция графа G является его метрическим инвариантом, определяемым выражением

$$D(G) = \frac{1}{2} \sum_{u, v \in V(G)} d(u, v),$$

где $d(u, v)$ - расстояние между вершинами u и v в графе G . Дистанция вершины $v \in V(G)$ есть сумма расстояний от v до всех других вершин графа $D_G(v) = \sum_{u \in V(G)} d(u, v)$.

Для молекулярных графов химических соединений в органической химии дистанция графа известна под названием "число Винера" или "индекс Винера" и широко используется как топологический индекс в задачах установления взаимосвязи между структурой и свойствами соединений [17-19]. В частности, установлены корреляции между значениями индекса Винера и физико-химическими свойствами полициклических структур. В работах [20-21] вычисление индекса Винера проводилось с целью полного описания распределений его значений для графов неразветвленных гексагональных систем. Для графов пентагональных систем свойства индекса Винера менее изучены. Вследствие экспоненциального роста числа графов

при увеличении числа колец h снижение трудоемкости получения индекса Винера расширяет возможности исследователя.

Для построения эффективного алгоритма вычисления индекса Винера необходимы некоторые предварительные результаты. Пусть пятиугольное кольцо присоединяется к графу G_{h-1} , состоящему из $h-1$ колец, как показано на рис. 6.

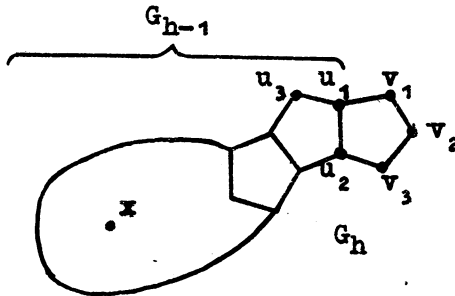


Рис. 6

Представление дистанции получаемого графа G_h через дистанцию графа G_{h-1} и дистанции вершин, к которым присоединяется новое кольцо, дает следующая

ТЕОРЕМА. Дистанции графов G_h и G_{h-1} связаны соотношением

$$D(G_h) = D(G_{h-1}) + D_{G_{h-1}}(u_1) + 2D_{G_{h-1}}(u_2) + 2(6h-1).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для графа G_h на рис. 6 его дистанцию можно записать как

$$2D(G_h) = \sum_{x \in V(G_{h-1})} D_{G_h}(x) + D_{G_h}(v_1) + D_{G_h}(v_2) + D_{G_h}(v_3). \quad (1)$$

Вычислим все слагаемые полученного выражения по отдельности, представляя дистанции всех вершин графа G_h через дис-

танции вершин u_1 и u_2 в графе G_{h-1} :

$$\begin{aligned}
 1) D_{G_h}(v_1) &= \sum_{x \in V(G_{h-1})} d(v_1, x) + d(v_1, v_2) + d(v_1, v_3) = \\
 &= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_1} (d(v_1, u_1) + d(u_1, x)) + d(v_1, u_1) + \\
 &+ d(v_1, v_2) + d(v_1, v_3) = \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_1} d(u_1, x) + \\
 &+ (|V(G_{h-1})| - 1) + 4 = D_{G_{h-1}}(u_1) + (3(h-1) + 2 - 1) + 4 = \\
 &= D_{G_{h-1}}(u_1) + 3h + 2;
 \end{aligned}$$

2) дистанция вершины v_3 выражается через дистанцию вершины u_2 аналогично:

$$\begin{aligned}
 D_{G_h}(v_3) &= \sum_{x \in V(G_{h-1})} d(v_3, x) + d(v_3, v_2) + d(v_3, v_1) = \\
 &= D_{G_{h-1}}(u_2) + 3h + 2;
 \end{aligned}$$

3) дистанцию вершины v_2 представим через дистанцию вершины u_2 , учитывая, что кратчайшие расстояния от v_2 до трех вершин v_1 , u_1 и u_3 не проходят через вершину u_2 . В графе G_h имеем

$$\begin{aligned}
 D_{G_h}(v_2) &= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - \{u_1, u_2, u_3\}} d(v_2, x) + d(v_2, u_3) + \\
 &+ d(v_2, u_1) + d(v_2, u_2) + d(v_2, v_1) + d(v_2, v_3).
 \end{aligned}$$

Так как $d(v_2, u_3) = d(v_2, u_2) + d(u_2, u_3) - 1$ и $d(v_2, u_1) = d(v_2, u_2) + d(u_2, u_1) - 1$, то

$$D_{G_h}(v_2) = \sum_{x \in V(G_{h-1}) - \{u_1, u_2, u_3\}} (d(v_2, u_2) + d(u_2, x)) +$$

$$\begin{aligned}
& + (d(v_2, u_2) + d(u_2, u_3)) + (d(v_2, u_2) + d(u_2, u_1)) + 2 = \\
= & \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_2} (d(v_2, u_2) + d(u_2, x)) + 2 = D_{G_{h-1}}(u_2) + \\
& + 2(|V(G_{h-1})| - 1) + 2 = D_{G_{h-1}}(u_2) + 2(3h-1);
\end{aligned}$$

4) для вершины $x \in V(G_{h-1})$ ее дистанция в графе G_h запишется как

$$D_{G_h}(x) = D_{G_{h-1}}(x) + d(x, v_1) + d(x, v_2) + d(x, v_3).$$

Суммируя последнее равенство по всем вершинам $x \in V(G_{h-1})$, имеем

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in V(G_{h-1})} D_{G_h}(x) &= \sum_{x \in V(G_{h-1})} D_{G_{h-1}}(x) + \\
&+ \sum_{x \in V(G_{h-1})} (d(x, v_1) + d(x, v_2) + d(x, v_3)).
\end{aligned}$$

Вычислим каждое слагаемое во второй сумме правой части последнего равенства по отдельности:

$$\begin{aligned}
\text{а) } \sum_{x \in V(G_{h-1})} d(x, v_1) &= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_1} (d(v_1, u_1) + \\
&+ d(u_1, x)) + d(v_1, u_1) = \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_1} d(u_1, x) + \\
&+ (|V(G_{h-1})| - 1) + 1 = D_{G_{h-1}}(u_1) + 3h - 1;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{б) } \sum_{x \in V(G_{h-1})} d(x, v_3) &= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_2} (d(v_3, u_2) + \\
&+ d(u_2, x)) + d(v_3, u_2) = \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_2} d(u_2, x) + \\
&+ (|V(G_{h-1})| - 1) + 1 = D_{G_{h-1}}(u_2) + 3h - 1;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{в) } \sum_{x \in V(G_{h-1})} d(x, v_2) &= \\
&= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - \{u_1, u_2, u_3\}} (d(v_2, u_2) + d(u_2, x)) + \\
&\quad + (d(v_2, u_1) + d(v_2, u_3)) + d(v_2, u_2) = \\
&= \sum_{x \in V(G_{h-1}) - u_2} (d(u_2, x) + d(u_2, v_2)) - 2 + d(v_2, u_2) = \\
&= D_{G_{h-1}}(u_2) + 2(|V(G_{h-1})| - 1) = D_{G_{h-1}}(u_2) + 2(3h - 2).
\end{aligned}$$

Подставляя в равенство (1) все полученные выше значения, в итоге получим

$$D(G_h) = D(G_{h-1}) + D_{G_{h-1}}(u_1) + 2D_{G_{h-1}}(u_2) + 12h - 2,$$

что и требовалось. \square

В приложении 1 для иллюстрации приводятся значения дистанций вершин графов пентагональных систем с числом колец $1 \leq h \leq 5$.

Используя утверждение теоремы, вычисление индекса Винера можно осуществить по следующему рекуррентному уравнению:

$$\begin{cases} D_h = D_{h-1} + \varphi_{h-1} + 2(6h - 1), \\ D_2 = 55, \quad \varphi_2 = 30, \end{cases}$$

где φ_{i-1} есть сумма дистанций вершин, определяемых по теореме при присоединении i -го кольца, D_2 есть значение дистанции графа G_2 из двух колец, φ_2 - сумма дистанций вершин в G_2 согласно теореме. Отсюда $D_h = D(G_h) =$

$$= \sum_{i=2}^{h-1} \varphi_i + 2(h-2)(3h+8) + 55. \text{ Трудоемкость вычисления } D_h$$

зависит от трудоемкости вычисления дистанций вершин, входящих

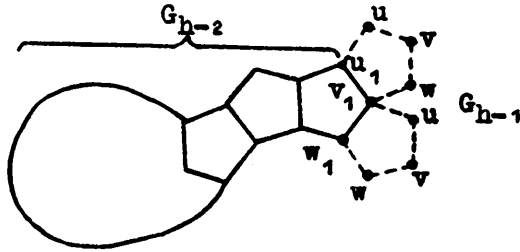


Рис. 7

в φ_i , $i = 2, 3, \dots, h-1$. Рассмотрим граф G_{h-2} на рис. 7, к которому присоединяется новое кольцо, образуя граф G_{h-1} . Присоединяемое кольцо изображено пунктиром. Для вычисления дистанции D_h в графе G_{h-1} необходимо определить дистанции вершин в ребрах (u, v) и (v, w) , к одному из которых будет присоединено новое кольцо, порождая граф G_h . Используя способ вычисления дистанций вершин из доказательства теоремы, нетрудно подсчитать, что если в графе G_{h-2} кольцо присоединяется к ребру (u_1, v_1) , то выполняются соотношения

$$D_{G_{h-1}}(u) = D_{G_{h-2}}(u_1) + [3(h-2) + 2] + 3,$$

$$D_{G_{h-1}}(v) = D_{G_{h-2}}(u_1) + 2[3(h-2) + 2],$$

$$D_{G_{h-1}}(w) = D_{G_{h-2}}(v_1) + [3(h-2) + 2] + 3,$$

а при присоединении кольца к ребру (v_1, w_1) дистанции равняются

$$D_{G_{h-1}}(u) = D_{G_{h-2}}(v_1) + [3(h-2) + 2] + 3,$$

$$D_{G_{h-1}}(v) = D_{G_{h-2}}(w_1) + 2[3(h-2) + 2],$$

$$D_{G_{h-1}}(w) = D_{G_{h-2}}(w_1) + [3(h-2) + 2] + 3.$$

Отсюда следует, что вычисление значений Φ_i для всех $i = 2, 3, \dots, h-2$ можно организовать в виде одного итерационного процесса. Пусть Π есть код графа, при просмотре разрядов которого устанавливается место присоединения очередного кольца к уже построенному графу (рис.7). В следующем алгоритме определяется значение индекса Винера для графов с числом колец $h \geq 3$. Для удобства работа алгоритма начинается с анализа присоединения четвертого кольца графа.

Алгоритм 5. Вычисление дистанции графа (индекса Винера)

Вход: 1. h - число колец графа G_h ;

2. Π - код графа G_h .

Выход: Дистанция графа $D(G_h)$ (индекс Винера).

Метод: 1. $D_{G_2}(u), D_{G_2}(v) \leftarrow 14, D_{G_2}(w) \leftarrow 16$;

2. $\Phi \leftarrow 0$;

3. для $i \leftarrow 0$ до $h-4$ шаг 1 цикл;

3.1. $C_1 \leftarrow 3i+11; C_2 \leftarrow 6i+16$;

3.2. если { i -й разряд в Π есть 1} то

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{G_{i+3}}(w) \leftarrow D_{G_{i+2}}(v) + C_1; \\ D_{G_{i+3}}(v) \leftarrow D_{G_{i+2}}(u) + C_2; \\ D_{G_{i+3}}(u) \leftarrow D_{G_{i+2}}(u) + C_1; \end{array} \right\}$$

иначе

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{G_{i+3}}(u) \leftarrow D_{G_{i+2}}(v) + C_1; \\ D_{G_{i+3}}(v) \leftarrow D_{G_{i+2}}(w) + C_2; \\ D_{G_{i+3}}(w) \leftarrow D_{G_{i+2}}(w) + C_1; \end{array} \right\}$$

3.4. если $\{ (i+1)\text{-й разряд в } \Pi \text{ есть } 1 \}$ то

$$\Phi \leftarrow \Phi + 2D_{G_{i+3}}(u) + D_{G_{i+3}}(v);$$

иначе

$$\Phi \leftarrow \Phi + 2D_{G_{i+3}}(w) + D_{G_{i+3}}(v);$$

$$4. D(G_h) \leftarrow \Phi + 2(h-3)(3h+11) + 133;$$

Конец.

В приложении 1 представлены дистанции графов и их вершин, по которым можно проследить работу алгоритма. Обычный алгоритм вычисления дистанции графа по списку его смежностей имеет трудоемкость $O(h^2)$ операций. Из построения алгоритма 5 следует следующее

УТВЕРЖДЕНИЕ 12. Вычисление индекса Винера для графа неразветвленных пентагональных систем из h колец по его коду осуществляется с трудоемкостью $O(h)$.

Для некоторых семейств графов класса K_5 были вычислены распределения их количества по значениям индекса Винера. Первые неизоморфные графы с совпадающими значениями индекса встречаются среди 36 графов из 9 колец. Все четыре пары графов приведены на рис.8. В приложении 2 содержатся полные данные о распределениях графов с числом колец до 15 включительно по значениям индекса Винера. Для графов с $h = 15$ из максимального класса вырождения индекса (18 графов) построены их диаграммы (приложение 3).

§7. Другие алгоритмы обработки графов класса K_5

Представление графов класса K_5 в виде кода его полу-границы можно использовать для построения различных алгорит-

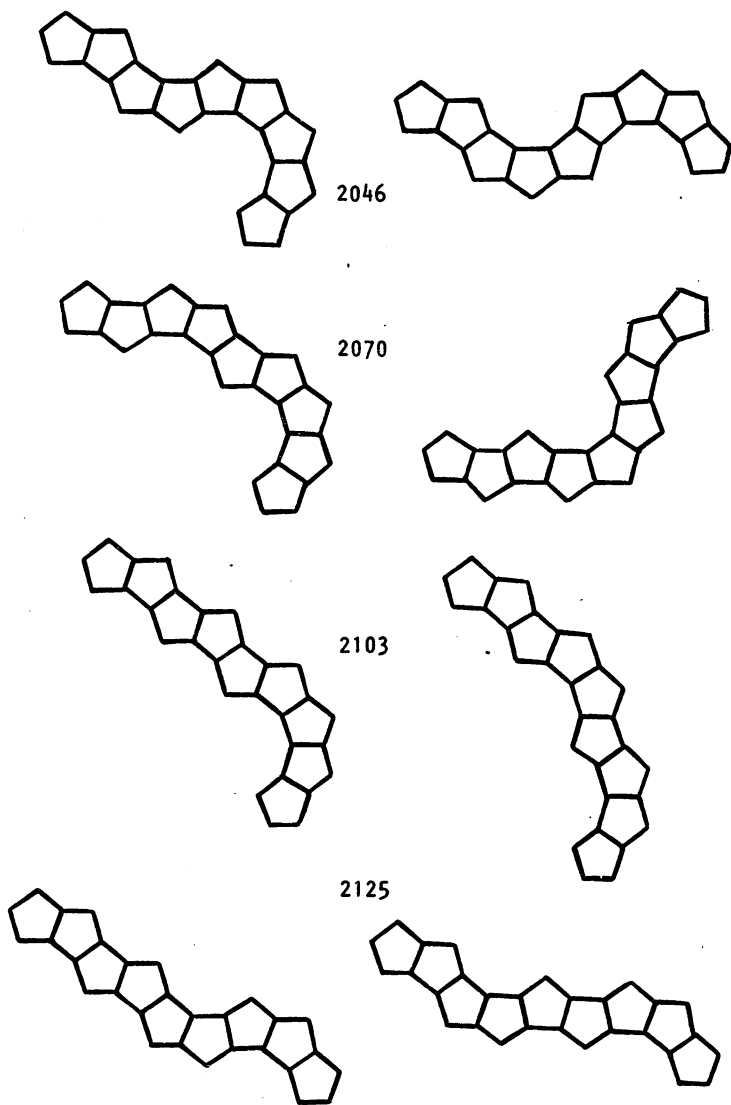


Рис.8. Графы с совпадающим индексом Винера

мов обработки графов. Ниже рассматриваются алгоритмы восстановления матрицы смежности по его коду, определения вложения графов и нахождения максимальной общей части графов.

Восстановление матрицы смежности. Матрица смежности является стандартным представлением графов в алгоритмах их обработки. Алгоритм восстановления матрицы смежности состоит в анализе способа присоединения колец путем последовательного просмотра разрядов кода графа. Пусть для графа G_{i-1} из $i-1$ колец матрица смежности уже построена. Новое кольцо можно при-

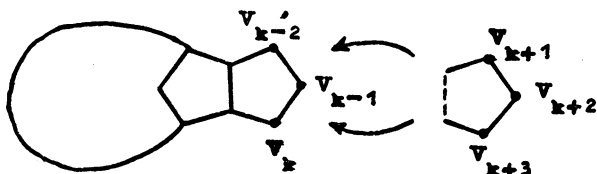


Рис. 9

соединить к одному из двух ребер концевое кольцо в G_{i-1} (рис.9). Матрица смежности G_i включает матрицу смежности графа G_{i-1} и информацию о смежности вершин v_{k+1} , v_{k+2} и v_{k+3} . Работа алгоритма начинается с присоединения кольца к графу G_2 , состоящему из двух пятиугольных колец.

Алгоритм 6. Восстановление матрицы смежности по коду графа

- Вход: 1. n - число колец графа G_n ;
 2. d - код графа G_n ;
 3. нулевая матрица A размерности $(3n+2) \times (3n+2)$.

Выход: A - матрица смежности графа G_n .

- Метод: 1. Отметить в A смежность вершин графа G_2 ;
 2. $k \leftarrow 8$;

3. для $i \leftarrow 0$ до $h-3$ шаг 1 цикл;
 если $\{i\text{-й разряд в } \Pi \text{ есть } 1\}$ то

$$\left[\begin{array}{l} \text{восстановить в матрице } A \text{ смежность} \\ \text{цепочки } v_{k-2}, v_{k+1}, v_{k+2}, v_{k+3}, v_{k-1} \end{array} \right]$$
 иначе

$$\left[\begin{array}{l} \text{восстановить в матрице } A \text{ смежность} \\ \text{цепочки } v_{k-1}, v_{k+1}, v_{k+2}, v_{k+3}, v_k \end{array} \right]$$
4. $k \leftarrow k+3$;

Конец.

Из построения алгоритма следует, что его трудоемкость пропорциональна числу колец графа.

Изображение графов на плоскости. Рассмотрим изображение графов из K_5 на плоскости при условии, что все кольца графа являются правильными пятиугольниками. В отличие от графов гексагональных систем здесь не удастся ввести удобную координатную систему для расположения колец графа. Правильной пентагональной решеткой на плоскости назовем произвольную систему из правильных непересекающихся пятиугольников на плоскости. Будем изображать кольца графа в последовательности, определяемой рядами кода графа, начиная с концевой кольца. Подкласс графов, при изображении которых не происходит пересечения ребер, назовем вложимым в пентагональную решетку, остальные графы из K_5 назовем невложимыми в решетку. Наименьший по числу вершин невложимый в решетку граф состоит из 10 колец, на 11 кольцах существуют два таких графа и т.д. (рис.10). Число графов в обоих подклассах возрастает экспоненциально вместе с ростом числа колец. Для графов класса K_5 разработаны алгоритм и программа их визуализации. Построение изображения осуществляется по кодам графов, все кольца графов являются правильными пятиугольниками.

Вложение и пересечение графов. Пусть графы G и H состоят из h и h' колец, $h < h'$. Граф H вкладывается в

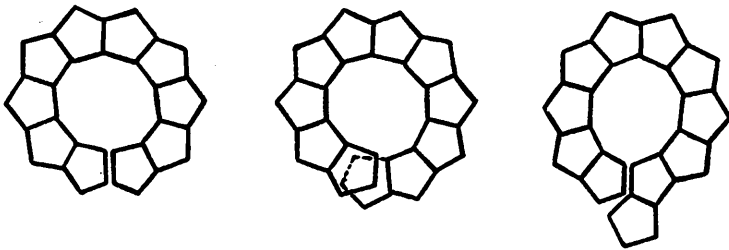


Рис. 10

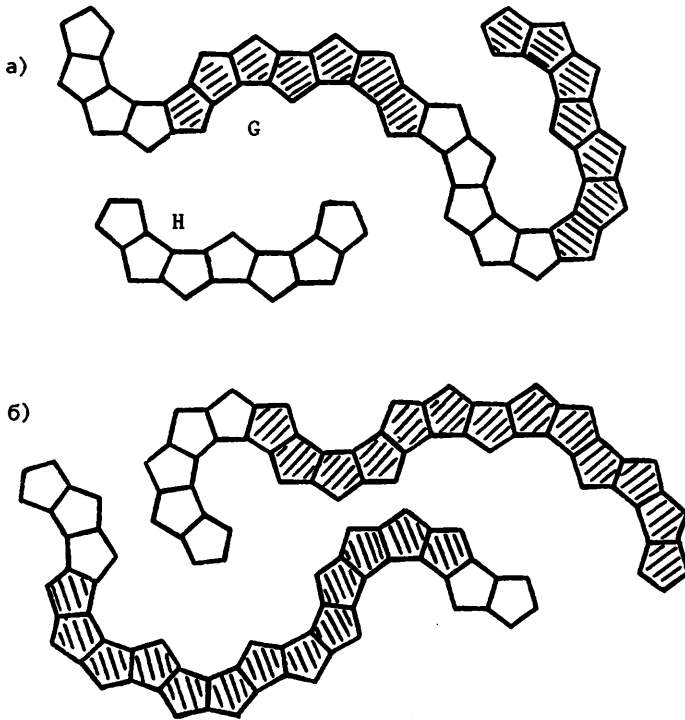


Рис. 11

граф G , если в G существует подграф $H' \subseteq G$ такой, что $H' \cong H$. Если граф H вкладывается в граф G , то полуграницы графов H и H' совпадают, т.е. код графа H должен входить как подпоследовательность в код графа G . В алгоритме определения вложения графа проверяются все возможности вхождения кода графа H .

Алгоритм 7. Установление вложения графа

Вход: 1. h и n - число колец и код графа G ;
 2. h' и m - число колец и код графа H , $h' < h$.

Выход: Номера колец подграфа G , изоморфного H .

Метод: 1. $Code[1] \leftarrow n$; $Code[2] \leftarrow n^*$;

$Code[3] \leftarrow \bar{n}$; $Code[4] \leftarrow \bar{n}^*$;

2. для $k \leftarrow 1$ до 4 шаг 1 цикл;
для $i \leftarrow 0$ до $h-h'$ шаг 1 цикл;

если

{ m является подсловом в $Code[k]$,
 начиная с i -го разряда }

то

{ подграф в G на кольцах $i+1, i+2,$
 $i+3, \dots, i+h'$ изоморфен графу H }

Конец.

На рис.11а показан пример работы алгоритма 7. В графе G выделены два из трех возможных вложений графа H . Трудоемкость алгоритма составляет $O(k(h-h'+1))$ операций, где k есть трудоемкость проверки вхождения кода графа H как подслова в код графа G . При $h = h'$ ($k = 1$) получаем трудоемкость определения изоморфизма графов. Для нахождения всех вложений графа необходимо организовать их накопление. Если допустить несвязность вкладываемого графа (каждая его компо-

нента есть граф из класса K_5), то нужно проверять вложение каждой компоненты в еще свободные подграфы графа G .

Под пересечением графов G и H понимается максимальный по числу колец связный граф G' класса K_5 такой, что G' вкладывается в оба графа G и H . Для нахождения максимальной общей части графов необходимо найти наибольшую общую подцепочку в кодах графов G и H . В приведенном ниже алгоритме $Size$ и $MaxSize$ обозначают порядок найденной к текущему шагу общей части и максимальной общей части. Процедура $MaxString(n, m, Size)$ выделяет в двоичных цепочках (числах) n и m наибольшую совпадающую связную подцепочку разрядов размера $Size$.

Алгоритм 8. Определение максимальной общей части графов

Вход: 1. h и n - число колец и код графа G ;
 2. h' и m - число колец и код графа H , $h' \leq h$.

Выход: Номера колец максимальной общей части в G и H .

Метод: 1. $Code[1] \leftarrow n$; $Code[2] \leftarrow n^*$;
 $Code[3] \leftarrow \bar{n}$; $Code[4] \leftarrow \bar{n}^*$;
 2. $MaxSize \leftarrow 0$;
 3. для $k \leftarrow 1$ до 4 шаг 1 цикл;
 3.1. $MaxString(Code[k], m, Size)$;
 3.2. если $Size > MaxSize$ то
 { запомнить номера разрядов
 общей части $Code[k]$ и
 m ; $MaxSize \leftarrow Size$; }
 }

Конец.

Аналогичная $MaxString$ процедура подробно описана в [13]. В графах на рис.116 общие части выделены штриховкой. Трудоемкость алгоритма 8 составляет $O(kh'(h+h'))$ операций, где k - трудоемкость выделения подслово заданного размера. Ал-

горитм нетрудно модифицировать для нахождения всех максимальных общих частей, общих частей заданных порядков, несвязных общих частей и т.п.

§8. Графы пентагексагональных систем

Рассмотрим новый класс графов неразветвленных пентагексагональных систем $K_{5,6}$, состоящих из пятиугольных и шестиугольных колец. Графы из $K_{5,6}$ определяются аналогично графам из K_5 (см. §1) с тем отличием, что некоторые пятиугольные кольца могут быть шестиугольными. Класс графов гексагональных систем, имеющих только шестиугольные кольца, обозначим K_6 .

Пусть S_m есть подмножество графов из h колец, содержащих m шестиугольных и $h-m$ пятиугольных колец. Тогда

класс $K_{5,6}$ можно представить как $K_{5,6} = \bigcup_{i=0}^h S_i$, где

$S_i \cap S_j = \emptyset$ при $i \neq j$ и $S_0 = K_5$, $S_h = K_6$. В шестиугольном кольце по сравнению с пятиугольным для присоединения нового кольца существует третье ребро, и наибольшее разнообразие при построении графов достигается при равном количестве пятиугольных и шестиугольных колец. При увеличении количества колец одного типа коды графов порождают большее число изоморфных графов в силу увеличения числа симметричных кодов. Поэтому можно предположить, что будет выполняться $|S_k| < |S_{h-k}|$ при $k = 0, 1, 2, \dots, \lfloor (h+1)/2 \rfloor$, откуда следует оценка числа графов $(h+1) |S_0| < |K_{5,6}| < (h+1) |S_{\lfloor (h+1)/2 \rfloor}|$. Как будет видно далее, для четных значений h максимум числа графов достигается на множестве $S_{h/2-1}$, а не на $S_{h/2}$, т.е. для четного числа колец $|K_{5,6}| < (h+1) |S_{h/2-1}|$. Формула для числа графов класса K_5 приведена в § 5, общее число графов гексагональных систем равно

$$|K_6| = \begin{cases} \frac{1}{4} (3^{(h-2)/2} + 1)^2, & h \text{ четно,} \\ \frac{1}{4} (3^{h-2} + 3^{(h-1)/2} + 3^{(h-3)/2} + 1), & h \text{ нечетно,} \end{cases}$$

а количество центрально-симметричных графов (с), зеркально-симметричных графов (ш) и асимметричных графов (а) класса K_6 подсчитывается по формулам [22]

$$\text{ш} = \begin{cases} \frac{1}{2} (3^{(h-2)/2} - 1), & h \text{ четно,} \\ \frac{1}{2} (3^{(h-1)/2} - 1), & h \text{ нечетно,} \end{cases}$$

$$\text{с} = \begin{cases} \frac{1}{2} (3^{(h-2)/2} - 1), & h \text{ четно,} \\ \frac{1}{2} (3^{(h-3)/2} - 1), & h \text{ нечетно,} \end{cases}$$

$$\text{а} = \begin{cases} \frac{1}{4} (3^{(h-2)/2} - 1)^2, & h \text{ четно,} \\ \frac{1}{4} (3^{h-2} - 3^{(h-1)/2} - 3^{(h-3)/2} + 1), & h \text{ нечетно.} \end{cases}$$

При возрастании числа колец h основной вклад в количество графов для классов K_5 и K_6 будут вносить асимметричные графы.

§9. Полуграницы графов класса $K_{5,6}$

Произвольный граф из $K_{5,6}$ можно представить как граф, составленный только из графов классов K_5 и K_6 с меньшим числом колец. Отсюда следует, что для фрагментов полуграниц и их графов должны выполняться соответствующие свойства. Для графов пентагональных систем свойства графов полуграниц изложены выше (§2,3). Приведем необходимые для дальнейшего свойства графов полуграниц гексагональных систем. Структуру графов полуграниц T_1 и T_2 определяет следующее

УТВЕРЖДЕНИЕ 13 [13]. а) Если вершины соединены дугой в графе T_1 (или в T_2), то они не соединены дугой в графе T_1 (или в T_2). В частности, любые две вершины на расстоянии 2 в характеристическом графе могут быть не соединены дугой в T_1 и T_2 . б) Если графы T_1 и T_2 представимы в указанном выше виде, то существует единственный граф класса K_6 , для которого T_1 и T_2 являются его графами полуграниц.

Условия для идентификации и определения симметрий графов из K_6 по их графам полуграниц дает

УТВЕРЖДЕНИЕ 14 [13]. Графы G и H изоморфны, если и только если выполняется одно из условий:

- а) $T_1(G) \cong T_1(H)$ и $T_2(G) \cong T_2(H)$;
- б) $T_1(G) \cong T_2(H)$ и $T_2(G) \cong T_1(H)$;
- в) $T_1(G) \cong T_1^*(H)$ и $T_2(G) \cong T_2^*(H)$;
- г) $T_1(G) \cong T_2^*(H)$ и $T_2(G) \cong T_1^*(H)$.

Граф G является симметричным, если и только если выполняется одно из условий: а) $T_1(G) \cong T_2(G)$ (граф единственный); б) $T_1(G) \cong T_1^*(G)$ и $T_2(G) \cong T_2^*(G)$ (граф зеркально-симметричный); в) $T_1(G) \cong T_2^*(G)$ (граф центрально-симметричный).

Условие для допустимости кодов полуграниц графов гексагональных систем формулируется как

УТВЕРЖДЕНИЕ 15 [13]. Два двоичных набора разрядности $n-2$ определяют некоторый граф класса K_6 из n колец, если и только если поразрядная логическая операция И над наборами равна нулю, т.е. $n_1 \wedge n_2 = 0$.

По сравнению с графами пентагональных систем в кодах n_1 и n_2 допускается наличие нулей в разрядах с одинаковыми номерами (в параллельных разрядах).

§10. Алгоритмы генерации графов класса $K_{5,6}$

В алгоритме генерации графов пентагексагональных систем учитываются свойства кодов графов пентагональных и гексагональных систем. Так как рассматривается два типа колец, то все варианты их распределения среди h колец можно задавать двоичными наборами X , в которых пятиугольному кольцу соответствует 1, а шестиугольному отвечает 0. Пусть задан некоторый набор длин колец графов и порядок их следования, например, $X = (5, 6, 6, 5, 6, 5)$. Так как у пятиугольного кольца только два места для присоединения нового цикла, то ситуация равенства нулю соответствующих параллельных разрядов в кодах графа должна быть исключена. Ясно, что наличие концевых пятиугольных колец не вносит никаких ограничений на присоединение по сравнению с гексагональными кольцами. Следовательно, если i -й разряд в кодах n_1 и n_2 равен 0 для некоторого $i = 1, \dots, h-3$, а $(i+1)$ -й разряд в X равен 1 (пятиугольное кольцо), то такие коды n_1 и n_2 не определяют граф и их нужно отбросить. Такие ситуации можно определить по ненулевому значению числа $\overline{n_1 \vee n_2} \wedge Y$, где Y образуется из X обнулением его $(h-1)$ -го разряда и далее сдвигом на 1 позицию в сторону младшего разряда (разряды целых чисел нумеруются с нуля). В наборе $\overline{n_1 \vee n_2}$ единичный разряд является признаком появления нулей в параллельных разрядах кодов.

Алгоритм 9. Генерация графов с заданным набором колец

Вход: 1. h - число колец в порождаемых графах;

2. X - заданный набор длин колец графов.

Выход: $Count$ - число графов класса $K_{5,6}$ с набором X .

Метод: 1. $Count \leftarrow 0$;

2. $N \leftarrow 2^{h-2} - 1$;

3. $Y \leftarrow \{ \text{сдвинуть } X \text{ на 1 к младшему разряду} \}$;

4. {обнулить в y его $(h-2)$ -й разряд}
5. для $n_1 \leftarrow 0$ до N шаг 1 цикл;
для $n_2 \leftarrow n_1 + 1$ до N шаг 1 цикл;
если $(n_1 \wedge n_2 = 0)$ and $(n_1 \vee n_2 \wedge y = 0)$ то
если {граф с кодами n_1 и n_2 новый} то
 $Count \leftarrow Count + 1$.

Конец.

Для указанного выше кода X алгоритм порождает семейство из 27 графов, являющихся подмножеством S_3 . Диаграммы всех графов приводятся в приложении 4.

Очевидно, что набор X и инверсный ему набор X^* задают одно и то же множество графов, так что далее будем использовать такие наборы X , что $X \leq X^*$. Если набор X не является симметричным ($X \neq X^*$), то коды n и n^* определяют пару неизоморфных графов. Условия для неповторной генерации кодов графов в случае симметричного X приводятся в утверждении 7. В алгоритме 10 подсчитывается количество графов в множестве S_k для $k = 0, 1, 2, \dots, h$.

Алгоритм 10. Генерация графов класса $K_{5,6}$

Вход: h - число колец в порождаемых графах.

Выход: Массив $Graphs$, элемент $Graphs[k]$ которого равен числу графов с k пятиугольными кольцами.

Метод: 1. $Graphs \leftarrow 0$;

2. $M \leftarrow 2^h - 1$; { граница кодов типов колец }

3. $N \leftarrow 2^{h-2} - 1$; { граница кодов графов }

4. для $X \leftarrow 0$ до M шаг 1 цикл;

4.1. если $X > X^*$ то {идти на новую итерацию по X } ;

4.2. $Count \leftarrow 0$;

4.3. $k \leftarrow$ {число единичных разрядов в X } ;

- 4.4. $Y \leftarrow \{ \text{сдвинуть } X \text{ на } 1 \text{ к младшему разряду} \};$
 4.5. $\{ \text{обнулить в } Y \text{ его } (h-2)\text{-й разряд} \}$
 4.6. для $n_1 \leftarrow 0$ до N шаг 1 цикл;
 для $n_2 \leftarrow n_1 + 1$ до N шаг 1 цикл;
 если $(n_1 \wedge n_2 = 0)$ and $(n_1 \vee n_2 \wedge Y = 0)$ то
 если $X \neq X^*$ то идти на шаг 4.7 иначе
 если $n_1^* < n_2^*$ то
 { если $n_1 > n_1^*$ то идти на {новый n_2 } };
 { если $n_1 < n_1^*$ то
 Count \leftarrow Count + 1 ;
 { если $n_2 > n_2^*$ то идти на {новый n_2 } };
 иначе
 { если $n_1 > n_2^*$ то идти на {новый n_2 } };
 { если $n_1 < n_2^*$ то
 Count \leftarrow Count + 1 ;
 { если $n_2 > n_1^*$ то идти на {новый n_2 } };
 4.7. Graphs[k] \leftarrow Graphs[k] + 1 .

Конец.

Инверсные наборы кодов вычисляются с трудоемкостью $O(h2^{h-2})$ операций. Вычисление инверсного набора X^* разрядности h и подсчет единичных разрядов в X можно проводить одновременно, что требует $O(h)$ операций. Отметим, что существуют алгоритмы определения количества m единичных разрядов двоичного набора с трудоемкостью $O(\lceil \log_2 m \rceil)$ операций [23].

УТВЕРЖДЕНИЕ 16. Трудоемкость алгоритма 10 генерации графов класса $K_{5,6}$ составляет $O(h2^{3h-5})$ операций.

В алгоритме возможны некоторые сокращения, например, в случае нечетных значений n_1 и n_2 всегда выполняется $n_1 \wedge n_2 = 0$. Алгоритм 10 реализован в виде трех программ на языке Фортран для персонального компьютера. Первая програм-

ма генерирует все графы класса $K_{5,6}$ с распределением их по числу пятиугольных колец и типу симметрии, т.е. подразбивает графы классов S_k по симметриям. В приложении 5 приводятся таблицы распределений для графов с числом колец до 12 включительно. Диаграммы всех графов с числом колец $h = 4$ даны на рис.12. Вторая программа порождает все графы с заданным числом пятиугольных колец, выделяя симметричные (т.е. программа дает соответствующую строку предыдущих таблиц).

Сделаем несколько замечаний относительно числа симметричных графов в подклассах S_k . При четном числе колец h и нечетном количестве $h-k > 0$ пятиугольных колец все графы множества S_k являются асимметричными. При нечетном числе колец h и нечетном числе пятиугольных колец симметричные графы в S_k имеют центральное пятиугольное кольцо и, следовательно, могут быть только зеркально-симметричными. Во всех остальных случаях в множестве S_k содержатся как центрально-, так и зеркально-симметричные графы. Далее, единственный граф в S_h (линия из шестиугольных колец) и в S_{h-2} (пятиугольные кольца концевые) одновременно являются центрально- и зеркально-симметричными и в таблицах приложения 5 учитываются как зеркально-симметричные. Из численных данных можно увидеть, что:

1. В графах класса $K_{5,6}$ с четным числом колец количество центрально- и зеркально-симметричных графов совпадает.

2. Множество графов S_k из h колец обозначим $S_k(h)$. Если h четно, то количество центрально-симметричных графов в $S_k(h)$ и $S_k(h+1)$ для всех k совпадает. К каждому центрально-симметричному графу из h колец с сохранением симметрии добавляется центральное шестиугольное кольцо.

3. Если число колец h нечетно, то для количества зеркально-симметричных графов выполняется

$$|S_k(h+1)| = |S_k(h)| + |S_{k-1}(h)|$$

для четных положительных k , и

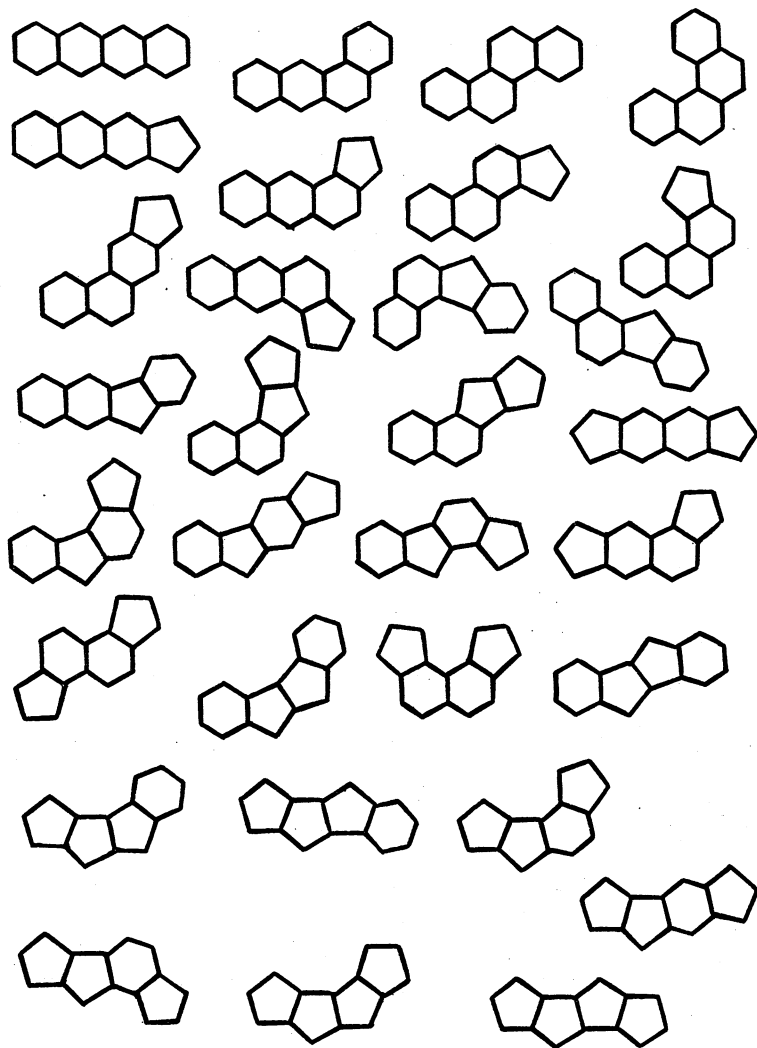


Рис.12. Графы пентагексагональных систем с $h = 4$

$|S_k(h+1)| = 0$ для нечетных k . К зеркально-симметричному графу из $S_{k-1}(h)$ с сохранением симметрии в центр добавляется пятиугольное кольцо, а к графу из $S_k(h)$ - шестиугольное кольцо.

Третья программа перечисляет все графы с заданным набором \mathbf{X} длин колец. Приведем результаты генерации по некоторым конкретным наборам для графов из 12 колец. Обозначим $G_{\mathbf{X}}$ множество графов класса $K_{5,6}$, порожденных набором \mathbf{X} . Напомним, что наличие в \mathbf{X} не концевых пятиугольного кольца запрещает появление нулей в соответствующих параллельных разрядах кодов графов.

1. Пусть набор содержит два концевых пятиугольных кольца $\mathbf{X} = (5,6,6,\dots,6,5)$. Из построения алгоритма следует, что концевые кольца не налагают никаких ограничений на коды графов. Так как расположение концевых колец в \mathbf{X} симметрично, то $|G_{\mathbf{X}}| = |K_6| = 14884$, количество симметричных графов для \mathbf{X} равно $\mathfrak{M} = 122$, $\mathfrak{C} = 121$ и для асимметричных графов $\mathfrak{a} = 14641$.

2. Пусть набор \mathbf{X} содержит единственное пятиугольное концевое кольцо $\mathbf{X} = (5,6,6,\dots,6)$, т.е. все графы в $G_{\mathbf{X}}$ асимметричны. Каждый асимметричный граф из K_6 порождает два графа класса $G_{\mathbf{X}}$ путем замены каждого шестиугольного концевых колец на пятиугольное, симметричный же граф порождает единственный граф из $G_{\mathbf{X}}$. Отсюда $|G_{\mathbf{X}}| = 2\mathfrak{a} + \mathfrak{M} + \mathfrak{C} = 29525$.

3. Пусть наборы \mathbf{X} и \mathbf{Y} оба асимметричны или симметричны и количество не концевых пятиугольных колец в наборах одинаково, тогда $|G_{\mathbf{X}}| = |G_{\mathbf{Y}}|$.

4. Для наборов $\mathbf{X} = (6,5,6,\dots,6,5,6)$, $\mathbf{X} = (6,6,5,6,\dots,6,5,6,6)$, $\mathbf{X} = (5,5,6,\dots,6,5,5)$ и подобных имеем $|G_{\mathbf{X}}| = 6642$, для $\mathbf{X} = (5,5,5,6,\dots,6)$, $\mathbf{X} = (6,6,6,5,5,6,\dots,6)$, $\mathbf{X} = (5,6,5,5,6,\dots,6)$ количество графов $|G_{\mathbf{X}}| = 13122$. Для $\mathbf{X} = (6,5,5,5,6,\dots,6)$ и $\mathbf{X} = (6,5,5,6,5,6,6,\dots,6)$ выполняется

ся $|G_x| = 8748$. При $x = (6, 5, 5, 5, 5, 6, \dots, 6)$ число графов равно $|G_x| = 5832$, при $x = (6, 6, 5, 5, 6, \dots, 6, 5, 5, 6, 6)$ имеем $|G_x| = 2970$, а для $x = (5, 5, 6, \dots, 6, 5, 5)$ количество графов $|G_x| = 6642$. Для набора с пятью пятиугольными кольцами $x = (6, 5, 5, 5, 5, 5, 6, \dots, 6)$ выполняется $|G_x| = 3888$.

З а к л ю ч е н и е

В работе описаны алгоритмы конструктивного перечисления графов неразветвленных пентагональных и пентагексагональных систем. Построение алгоритмов основывается на представлении графа с помощью пары графов специального вида - графов полуграниц, строящихся при обходе границы (периметра) исходного графа. Граф полуграницы представляется, в свою очередь, двоичным набором (числом). Алгоритмы генерации графов из n колец состоят в переборе целых чисел разрядности $n-2$ с проверкой необходимых условий на их допустимость для представления графов и новизну таких кодов. Алгоритм и программа генерации графов пентагональных систем имеют предельно простой вид. Проверка соответствия двух произвольных чисел некоторому графу данного класса, определение изоморфности очередного сгенерированного графа уже полученным графам осуществляются за константное число операций. Особенностью алгоритмов является возможность прекращения и возобновления процесса генерации в любом заданном интервале перебора чисел-кандидатов на коды графов. Алгоритмы реализованы в виде нескольких программ, позволяющих перечислять все графы пентагональных и пентагексагональных систем, множество графов с заданным числом пятиугольных колец и графы, отвечающие заданному набору длин колец.

Для графов пентагональных систем получены выражения для вычисления индекса Винера при присоединении колец и построен линейный по числу колец алгоритм его вычисления, приведены распределения значения индекса Винера для классов графов с числом

колец до 15. Рассмотрены также алгоритмы восстановления матрицы смежностей для графов по их кодам, определения вложения и пересечения графов пентагональных систем.

Из построения алгоритмов генерации можно заметить, что в них перечисляются определенные способы соединения колец, т.е. длина циклов и характер их смежности могут не иметь принципиального значения, важны лишь конфигурационные особенности соединения колец. Примером этого могут служить недавно синтезированные молекулы спиросочлененных триангуланов, молекулярные графы которых состоят из треугольников, соединенных друг с другом по вершине [24]. Для конструктивного перечисления графов этого класса можно использовать алгоритм генерации графов пентагональных систем.

Л и т е р а т у р а

1. ФАРАДЖЕВ И.А. Конструктивное перечисление комбинаторных объектов //Алгоритмические исследования в комбинаторике. - М.: Наука, 1978. - С. 3-11.
2. ХАРАРИ Ф., ПАЛМЕР Э. Перечисление графов. - М.: Мир, 1977. - 324 с.
3. ГОЛОМБ С.В. Полимино. - М.: Мир, 1975. - 207 с.
4. ДЕЛЕСТ М.-П., ВЬЕННО Ж. Алгебраические языки и перечисление полимино //Кибернетический сборник. Новая серия. - М., 1989. - Вып. 26. - С. 115-156.
5. ВЬЕННО Ж. Комбинаторные задачи статистической физики //Кибернетический сборник. Новая серия. - М., 1990. - Вып. 27. - С. 173-199.
6. ВЬЕННО Ж. Перечислительная комбинаторика и алгебраические языки //Кибернетический сборник. Новая серия. -М., 1989. - Вып. 26. - С. 157-172.
7. BALABAN A.T., BRUNVOLL J., CIOSLOWSKI J. a.o. Enumeration of Benzenoid and Coronoid Hydrocarbons //Z.Naturforsch. - 1987. - Vol. 42a. -P. 863-870.
8. KNOP J.V., MÜLLER W.R., SZYMANSKI K., TRINAJSTIĆ N.Computer Generation of Certain Classes of Molecules. - Zagreb: SKTN/Kemija u industriji, 1985. - 166 p.

9. TOŠIĆ R., KOVAČEVIĆ M. Generation and Counting Unbranched Catacondensed Benzenoids //J.Chem. Inf. Comput. Sci.-1988. - Vol. 28. - P. 29-31.
10. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В., СКОРОБОГАТОВ В.А. Применение теории графов в химии полициклических бензоидных углеводородов. - Новосибирск, 1987. - 34 с. (Препринт/АН СССР, Сиб. отделение, Ин-т математики, № 35).
11. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В. Графы полициклических соединений//Вопросы алгоритмического анализа структурной информации. - Новосибирск, 1987. - Вып.119: Вычислительные системы.-С.71-90.
12. RANĐIĆ M., GIMARC V.M., NIKOLIĆ S., TRINAJSTIĆ N. On the Aromatic Stabilities of Thiophene Analogues of Helicenes// J.Mol. Struct. (THEOCHEM). - 1988. -Vol. 181. -P. 111-140.
13. ДОБРЫНИН А.А.. Эффективный алгоритм генерации графов неразветвленных гексагональных систем // Математические вопросы химической информатики. - Новосибирск, 1989. - Вып. 130: Вычислительные системы. - С. 3-38.
14. ДОБРЫНИН А.А. Перечисление некоторых подклассов графов неразветвленных гексагональных систем //Математические исследования в химической информатике.-Новосибирск,1990. -Вып. 136: Вычислительные системы. -С. 3-21.
15. ХАРАРИ Ф. Теория графов. - М.: Мир, 1973. - 300 с.
16. ТРАЧ С.С., ЗЕФИРОВ Н.С. Методология решения некоторых перечислительных задач органической химии на основе леммы Бернсайда и расширенных цикловых индексов групп подстановок //Молекулярные графы в химических исследованиях.-Тез.междуз.конф., 21-26 мая, Калинин, 1990. - С. 106-107.
17. TRINAJSTIĆ N. Chemical graph theory. - Florida: CRC Press, Boca Raton. - 1983. - Т. 2.
18. СТАНКЕВИЧ М.И., СТАНКЕВИЧ И.В., ЗЕФИРОВ Н.С. Топологические индексы в органической химии // Успехи химии. - 1988. - Т.57. - С. 337-366.
19. РУВЭЗ Д. Следует ли заниматься разработкой топологических индексов?//Химические приложения топологии и теории графов. -М., 1987. - С. 183-205.
20. GUTMAN I., MARKOVIĆ S., LUKOVIĆ U., RADIVOJEVIĆ V., RANĐIĆ S. On Wiener numbers of benzenoid hydrocarbons//Zbornik Radova Prirodno-matematičkog faculteta u Kragujevcu. - 1987. - Vol. 8. -P. 15-34.
21. ДОБРЫНИН А.А. Распределения значений дистанций графов неразветвленных гексагональных систем //Математические иссле -

дования в химической информатике. - Новосибирск, 1990.-Вып.136: Вычислительные системы. -С. 61-141.

22. BALABAN A.T., HARARY F. Chemical Graphs V. Enumeration and Proposed nomenclature of Benzenoid cata-condensed polycyclic aromatic hydrocarbons//Tetrahedron. -1968. - Vol. 24.- P. 2505-2516.

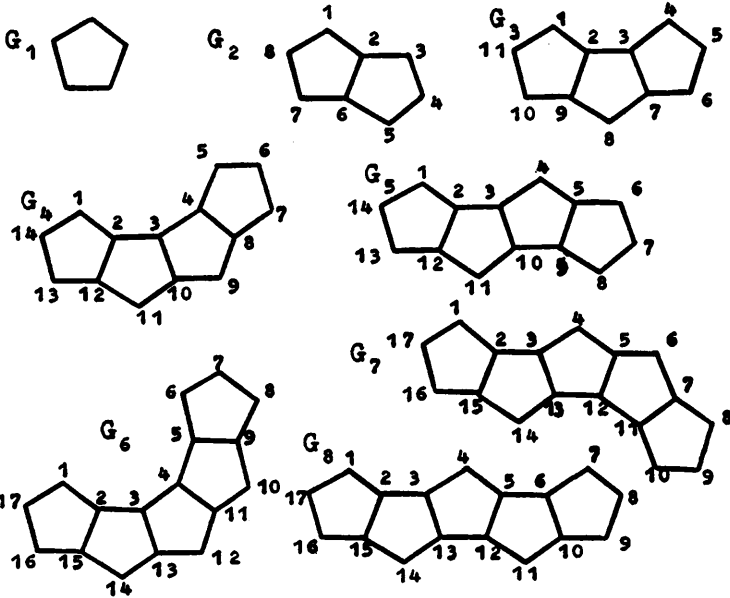
23. РЕЙНГОЛЬД Э., НИВЕРГЕЛЬТ Ю., ДЕО Н. Комбинаторные алгоритмы. Теория и практика. -М.: Мир, 1980. - 476 с.

24. ZEFIROV N.S., KOZHUSHKOV S.I., KUZNETSOVA T.S., KOKOREVA O.V., LUKIN K.A., UGRAK B.I., TRATCH S.S. Triangulanes: Stereoisomerism and General Method of Synthesis// J.Am. Chem. Soc.-1990.- Vol.112, № 21.- P.7702-7707.

Поступила в ред.-изд.отд.

26 июля 1991 года

Дистанции вершин графов класса K_5



v	G_1	G_2	G_3	G_4	G_5	G_6	G_7	G_8
		15	55	133	259	263	442	452
1	6	14	25	39	41	56	61	61
2	6	11	19	30	32	44	49	49
3	6	14	19	27	29	38	43	43
4	6	16	25	30	33	38	46	44
5	6	14	30	39	35	44	45	43
6		11	27	47	44	56	52	49
7		14	21	44	49	67	54	61
8		16	22	35	41	64	66	72
9			21	35	32	52	69	66
10			27	31	29	52	58	54
11			30	35	33	45	46	49
12				35	35	48	40	42
13				44	44	45	40	42
14				47	49	52	47	49
15						52	52	54
16						64	64	66
17						67	72	72

Значения индекса Винера графов из K_5

Rings = 4 Graphs = 2 Values = 2							
259	1	263	1				

Rings = 5 Graphs = 3 Values = 3							
442	1	452	1	458	1		

Rings = 6 Graphs = 6 Values = 6							
691	1	716	1	722	1	723	1
707	1					732	1

Rings = 7 Graphs = 10 Values = 10							
1015	1	1055	1	1061	1	1077	1
1037	1	1059	1	1070	1	1083	1
						1086	1
						1098	1

Rings = 8 Graphs = 20 Values = 20							
1423	1	1484	1	1512	1	1533	1
1451	1	1487	1	1515	1	1539	1
1478	1	1502	1	1524	1	1542	1
1479	1	1506	1	1530	1	1543	1
						1545	1
						1552	1
						1554	1
						1570	1

Rings = 9 Graphs = 36 Values = 32							
1924	1	2028	1	2070	2	2091	1
1958	1	2034	1	2076	1	2097	1
1992	1	2036	1	2080	1	2103	2
1994	1	2046	2	2082	1	2104	1
2000	1	2055	1	2088	1	2116	1
2012	1	2061	1	2089	1	2121	1
2027	1	2064	1			2122	1
						2125	2
						2131	1
						2137	1
						2143	1
						2161	1

		Rings = 10		Graphs = 72		Values = 80			

2527	1	2688	2	2742	1	2779	2	2824	1
2567	1	2694	1	2745	1	2781	1	2827	1
2607	1	2697	1	2751	1	2782	1	2830	2
2612	1	2703	1	2752	1	2790	1	2831	1
2618	1	2709	1	2754	1	2791	1	2833	1
2639	1	2712	2	2757	1	2794	1	2839	1
2648	1	2719	1	2760	1	2797	1	2840	2
2652	1	2724	1	2763	1	2800	2	2845	2
2654	1	2728	2	2764	1	2803	1	2849	1
2658	1	2730	1	2766	1	2806	1	2858	1
2672	1	2733	1	2770	1	2815	1	2863	1
2679	2	2739	2	2773	2	2818	2	2885	1

		Rings = 11		Graphs = 136		Values = 103			

3241	1	3477	1	3538	1	3595	1	3655	1
3287	1	3478	1	3540	1	3601	4	3656	1
3333	1	3483	1	3541	2	3604	2	3658	1
3341	1	3487	1	3543	1	3605	1	3667	1
3347	1	3492	1	3546	1	3607	1	3670	1
3377	1	3495	2	3547	2	3610	2	3676	2
3387	1	3498	1	3550	1	3614	1	3677	1
3392	1	3501	2	3555	1	3616	3	3680	1
3393	1	3504	1	3559	1	3622	1	3683	1
3395	1	3511	1	3562	1	3623	2	3686	3
3419	1	3513	1	3565	1	3628	1	3692	2
3423	2	3516	1	3568	1	3631	1	3695	1
3428	1	3519	1	3570	2	3632	2	3698	1
3432	1	3520	1	3571	1	3634	2	3703	1
3438	1	3523	1	3574	2	3637	1	3704	2
3441	3	3525	1	3577	2	3640	3	3707	1
3447	1	3528	2	3580	1	3646	2	3710	1
3453	1	3529	1	3583	1	3647	1	3722	1
3465	2	3531	1	3586	3	3650	1	3731	1
3469	1	3532	1	3588	1	3652	2	3755	1
3474	1	3534	1	3592	1				

		Rings = 12		Graphs = 272		Values = 177			

4075	1	4398	1	4489	1	4564	1	4643	2
4127	1	4401	1	4492	4	4567	1	4645	1
4179	1	4402	1	4497	1	4568	1	4646	2
4190	1	4407	1	4498	5	4570	1	4649	1
4196	1	4408	2	4499	1	4573	3	4652	3
4235	1	4410	1	4501	3	4577	2	4658	1
4242	1	4411	1	4504	1	4579	2	4661	3
4248	1	4417	1	4506	1	4585	3	4663	1
4250	1	4419	2	4507	3	4588	1	4667	2
4262	1	4422	1	4508	1	4589	1	4670	2
4271	1	4425	3	4510	2	4591	3	4673	1
4286	1	4429	2	4513	3	4594	2	4679	2
4287	2	4431	1	4516	2	4595	1	4682	1
4296	1	4435	2	4517	1	4597	1	4685	2
4302	1	4437	1	4519	1	4598	3	4688	2
4304	1	4438	2	4522	1	4600	2	4691	2
4305	1	4440	1	4525	3	4601	1	4694	2
4311	1	4444	1	4526	1	4604	2	4695	1
4314	2	4446	2	4531	1	4606	1	4697	2
4317	1	4447	1	4534	1	4607	3	4700	2
4323	1	4449	1	4535	2	4609	2	4704	2
4338	2	4450	1	4537	1	4610	2	4706	2
4339	1	4453	1	4540	2	4613	2	4709	1
4348	1	4456	1	4543	1	4615	1	4712	1
4350	1	4458	1	4544	2	4616	1	4713	2
4356	3	4459	1	4546	3	4618	1	4715	1
4365	1	4461	1	4549	1	4619	1	4721	1
4366	1	4462	1	4550	1	4621	2	4722	2
4371	1	4464	1	4552	2	4622	1	4724	1
4375	1	4470	1	4553	1	4625	3	4730	1
4377	2	4471	3	4555	1	4627	1	4731	1
4383	2	4473	1	4558	4	4630	1	4733	1
4386	2	4474	2	4559	1	4631	3	4749	1
4390	1	4477	2	4561	3	4637	2	4757	1
4392	1	4479	1	4562	2	4640	2	4785	1
4395	1	4483	3						

		Rings = 13		Graphs = 528		Values = 277			
5038	1	5416	1	5515	1	5593	2	5666	1
5096	1	5418	1	5517	1	5594	1	5668	2
5154	1	5419	1	5518	5	5596	3	5669	2
5168	1	5421	1	5520	1	5599	1	5671	1
5174	1	5425	2	5522	1	5603	1	5672	1
5222	1	5434	1	5524	4	5605	3	5674	1
5226	1	5436	1	5526	1	5608	2	5675	2
5232	1	5439	2	5527	5	5609	1	5680	2
5237	1	5442	1	5529	1	5611	6	5681	2
5258	1	5445	2	5530	1	5612	1	5683	3
5276	1	5446	2	5531	1	5614	1	5684	2
5280	2	5448	1	5533	4	5617	1	5686	1
5282	1	5452	2	5536	2	5618	3	5687	3
5289	1	5454	1	5539	2	5621	1	5689	4
5295	1	5455	1	5540	1	5623	1	5690	5
5298	1	5457	1	5542	2	5626	2	5693	3
5304	1	5460	2	5545	2	5627	1	5695	1
5309	1	5464	3	5548	1	5629	4	5696	3
5310	1	5466	1	5551	2	5630	1	5698	1
5316	2	5467	1	5553	2	5632	4	5699	4
5318	1	5469	1	5554	2	5635	4	5701	2
5334	2	5470	3	5557	1	5636	2	5702	2
5338	1	5473	1	5558	1	5638	3	5704	2
5340	2	5475	2	5560	5	5639	2	5705	2
5347	1	5476	1	5563	2	5641	3	5707	2
5352	1	5478	1	5566	1	5642	1	5708	1
5358	1	5479	1	5567	1	5644	2	5711	6
5367	3	5481	1	5569	2	5645	2	5713	1
5373	1	5488	1	5571	1	5647	2	5714	1
5374	1	5493	1	5572	1	5648	3	5716	1
5376	1	5496	1	5575	3	5650	1	5717	4
5388	2	5497	2	5576	2	5651	1	5719	2
5392	1	5499	1	5578	4	5653	4	5720	1
5394	2	5500	2	5581	2	5654	2	5723	2
5397	1	5502	2	5582	1	5656	1	5726	4
5398	1	5503	2	5584	2	5657	3	5729	2
5406	3	5505	1	5585	3	5659	4	5737	1
5409	1	5506	1	5587	3	5660	1	5738	4
5410	1	5508	1	5590	3	5663	3	5741	3
5412	3	5509	1	5591	1	5665	2	5743	1

5744	3	5780	1	5814	1	5849	1	5888	2
5747	8	5783	2	5816	2	5850	1	5889	1
5750	2	5787	1	5819	3	5852	1	5892	1
5752	2	5789	3	5820	2	5853	1	5895	4
5753	3	5792	1	5823	2	5855	2	5898	2
5756	3	5795	4	5825	3	5858	1	5901	2
5759	3	5796	2	5828	1	5862	1	5904	2
5760	1	5798	1	5829	2	5864	1	5913	1
5762	5	5801	3	5831	3	5868	1	5916	1
5765	7	5802	1	5834	2	5870	2	5922	3
5768	3	5804	2	5837	4	5874	1	5924	1
5769	3	5805	3	5840	2	5877	4	5928	1
5771	6	5807	1	5843	2	5882	1	5946	1
5777	4	5810	4	5846	1	5883	3	5958	1
5778	2	5811	1	5847	1	5886	3	5988	1
5779	1								

Rings = 14 Graphs = 1056 Values = 430

6139	1	6483	2	6573	1	6642	2	6694	1
6203	1	6484	1	6579	1	6643	2	6696	1
6267	1	6492	2	6580	1	6645	1	6697	2
6284	1	6498	1	6585	1	6651	1	6699	1
6290	1	6507	1	6597	2	6660	1	6700	6
6347	1	6513	1	6598	1	6661	2	6701	1
6348	1	6516	2	6600	1	6664	2	6703	2
6354	1	6520	1	6601	2	6666	1	6705	2
6362	1	6534	2	6603	2	6667	2	6706	2
6392	1	6537	2	6607	2	6669	1	6708	1
6411	2	6543	2	6610	1	6672	1	6709	4
6416	1	6544	1	6615	3	6673	1	6715	3
6419	1	6546	1	6619	1	6675	1	6718	2
6420	1	6547	1	6621	2	6678	2	6721	1
6426	1	6555	1	6622	1	6679	3	6723	1
6428	1	6556	2	6624	1	6681	1	6724	3
6429	1	6558	1	6625	1	6682	1	6728	1
6435	1	6561	1	6627	2	6683	1	6729	1
6441	1	6562	1	6628	3	6685	2	6730	2
6452	1	6564	2	6631	1	6688	4	6732	1
6456	2	6565	1	6634	3	6690	1	6733	3
6470	1	6567	1	6636	2	6691	5	6736	2
6475	1	6570	3	6637	1	6692	1	6737	1
6480	2	6571	1	6639	1	6693	3	6738	1

6739	1	6826	4	6896	4	6967	1	7043	5
6742	5	6827	2	6898	2	6968	5	7044	3
6745	3	6829	3	6899	6	6970	1	7046	5
6747	1	6830	1	6901	2	6971	6	7049	3
6748	2	6832	2	6902	4	6972	4	7050	1
6751	3	6833	2	6904	2	6974	4	7052	1
6752	1	6835	5	6905	3	6977	10	7053	1
6754	4	6836	3	6907	1	6979	2	7055	7
6755	2	6838	5	6908	6	6980	8	7058	3
6757	3	6839	1	6910	1	6981	3	7059	2
6760	4	6841	3	6911	2	6982	2	7061	6
6761	1	6842	2	6913	3	6983	6	7062	3
6763	1	6844	5	6914	6	6986	5	7064	3
6764	4	6845	4	6916	4	6989	5	7067	4
6765	1	6847	2	6917	4	6990	2	7068	2
6766	4	6850	6	6919	4	6991	1	7070	4
6769	5	6851	5	6920	3	6992	3	7071	1
6772	4	6853	2	6922	1	6995	6	7073	2
6773	2	6854	2	6923	6	6997	1	7074	1
6774	1	6856	3	6925	2	6998	7	7076	4
6778	2	6857	1	6926	1	6999	1	7077	2
6781	3	6859	4	6928	1	7001	3	7079	5
6782	1	6860	3	6931	2	7004	6	7082	2
6787	6	6863	2	6932	3	7007	4	7083	2
6788	1	6865	1	6934	2	7008	1	7085	5
6790	1	6866	1	6935	3	7010	6	7086	1
6793	4	6868	2	6938	4	7013	4	7088	3
6796	4	6869	2	6940	1	7014	1	7089	3
6797	2	6871	2	6941	5	7015	1	7091	3
6799	1	6874	5	6943	2	7016	2	7092	1
6800	1	6875	3	6944	4	7017	3	7094	4
6802	3	6877	3	6946	3	7019	6	7095	3
6805	1	6878	2	6947	5	7022	6	7097	6
6806	2	6880	2	6949	1	7023	2	7098	4
6809	2	6881	2	6950	3	7025	5	7100	4
6811	5	6883	3	6953	8	7026	2	7103	1
6814	1	6884	2	6955	2	7028	4	7104	3
6815	3	6886	1	6956	2	7031	4	7106	3
6817	3	6887	5	6958	1	7032	2	7107	5
6818	3	6889	5	6959	3	7033	1	7109	2
6820	2	6890	3	6961	2	7034	6	7110	3
6821	1	6892	1	6962	6	7035	3	7112	4
6823	5	6893	3	6963	1	7040	4	7113	2
6824	2	6895	1	6965	3	7041	3	7115	1

7116	4	7145	2	7179	1	7224	1	7266	1
7118	1	7146	1	7182	2	7227	2	7269	2
7119	5	7148	2	7184	1	7229	1	7270	3
7122	3	7149	6	7187	1	7230	1	7272	1
7124	6	7152	4	7188	6	7233	4	7275	1
7125	5	7154	2	7191	1	7236	1	7278	2
7127	1	7155	2	7193	1	7239	3	7279	3
7128	1	7157	3	7194	2	7242	3	7284	1
7130	4	7158	5	7197	5	7243	1	7290	1
7131	3	7161	3	7200	2	7245	3	7293	1
7133	3	7163	1	7202	1	7248	3	7297	3
7134	2	7164	3	7203	3	7251	4	7302	1
7136	1	7167	1	7206	5	7252	3	7306	1
7137	1	7169	2	7209	1	7254	2	7308	1
7139	2	7170	4	7212	2	7257	2	7314	1
7140	2	7173	2	7215	2	7260	3	7333	1
7142	3	7176	5	7218	1	7261	4	7344	1
7143	5	7178	1	7221	4	7263	1	7378	1

Rings = 15 Graphs = 2080 Values = 609

7387	1	7743	2	7854	1	7918	1	7972	2
7457	1	7759	1	7855	1	7920	1	7974	3
7527	1	7767	2	7857	1	7921	1	7975	2
7547	1	7768	1	7858	1	7924	1	7978	2
7553	1	7769	1	7863	1	7927	1	7980	1
7617	1	7778	1	7864	1	7929	3	7983	1
7619	1	7779	3	7866	1	7930	1	7984	1
7623	1	7785	1	7867	1	7933	1	7989	1
7634	1	7794	1	7869	2	7935	2	7990	1
7673	1	7797	2	7875	2	7936	1	7991	1
7689	2	7800	1	7881	1	7938	1	7993	1
7697	1	7812	2	7882	1	7939	2	7995	1
7698	1	7813	1	7887	2	7941	2	7999	6
7704	1	7833	2	7893	2	7944	2	8000	1
7707	1	7837	1	7902	2	7945	3	8001	2
7709	1	7839	4	7903	2	7950	1	8002	1
7713	1	7842	1	7905	1	7956	2	8005	3
7719	1	7848	1	7908	2	7957	2	8007	1
7727	1	7849	2	7909	3	7959	3	8008	3
7742	1	7851	1	7912	1	7963	2	8009	1

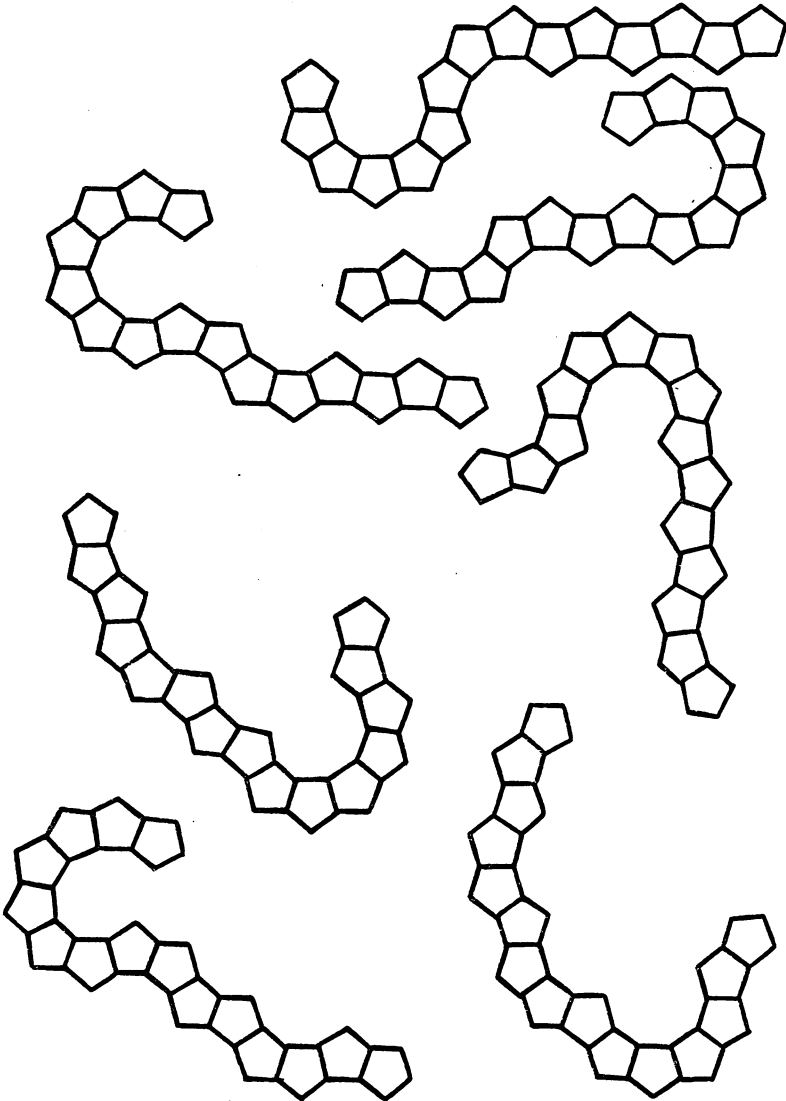
8010	1	8088	1	8168	1	8242	4	8311	3
8011	4	8089	5	8170	1	8243	6	8312	6
8013	2	8090	3	8171	3	8245	4	8313	1
8014	3	8091	1	8173	5	8246	4	8314	1
8016	2	8092	2	8176	4	8248	5	8315	7
8019	1	8095	3	8177	4	8249	6	8317	1
8020	5	8097	1	8179	5	8251	3	8318	5
8022	1	8098	3	8180	3	8252	8	8320	2
8025	1	8099	3	8182	7	8254	2	8321	8
8026	2	8101	5	8185	2	8255	2	8322	3
8028	1	8104	1	8186	3	8257	4	8323	4
8029	6	8107	6	8188	6	8258	6	8324	7
8031	1	8108	3	8189	4	8260	3	8326	1
8035	2	8110	2	8191	3	8261	4	8327	7
8037	2	8114	1	8192	1	8263	3	8329	1
8038	3	8116	3	8194	8	8264	6	8330	6
8041	1	8119	5	8195	4	8266	2	8331	3
8044	4	8122	4	8197	5	8267	7	8332	2
8045	1	8123	2	8198	5	8269	3	8333	6
8047	1	8124	2	8200	1	8270	4	8335	3
8049	1	8125	5	8203	3	8272	2	8336	4
8050	1	8128	3	8204	6	8273	2	8338	2
8052	1	8134	7	8206	2	8276	2	8339	9
8053	5	8135	2	8209	3	8278	1	8340	3
8054	1	8140	7	8210	3	8279	4	8342	7
8055	1	8141	3	8212	3	8281	2	8344	2
8058	1	8142	1	8213	2	8282	3	8345	2
8059	2	8143	1	8215	4	8284	6	8347	1
8062	1	8144	2	8218	4	8285	8	8348	9
8064	2	8146	1	8219	3	8287	1	8349	2
8065	3	8147	1	8221	3	8288	5	8350	1
8068	2	8149	4	8222	2	8290	8	8351	5
8069	1	8150	4	8224	7	8291	4	8353	1
8070	1	8152	3	8225	2	8294	8	8354	11
8071	5	8153	3	8227	2	8296	4	8356	3
8074	2	8155	3	8228	1	8297	3	8357	4
8077	1	8156	1	8230	5	8299	1	8359	1
8078	1	8158	2	8231	5	8300	6	8360	18
8079	1	8159	2	8233	2	8302	4	8362	2
8080	5	8161	6	8234	2	8303	3	8363	2
8081	2	8162	1	8236	3	8305	3	8366	8
8082	1	8164	2	8237	3	8306	6	8367	1
8083	4	8165	1	8239	1	8308	3	8369	6
8086	4	8167	3	8240	3	8309	2	8371	2

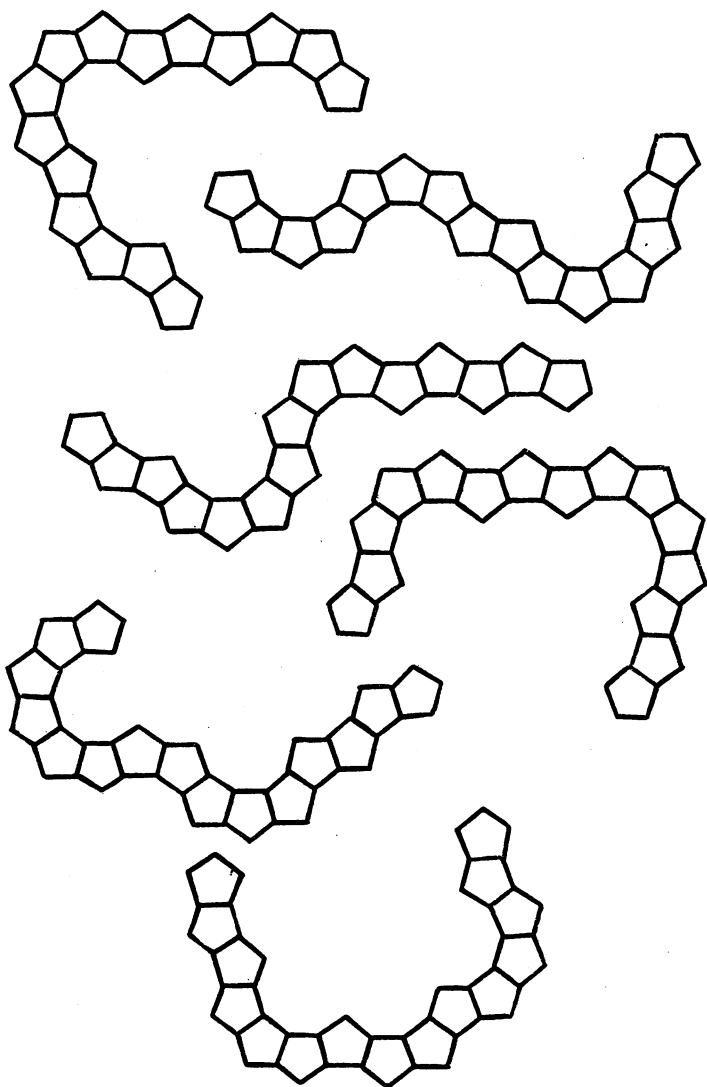
8372	5	8435	4	8499	3	8570	4	8643	4
8373	1	8436	3	8501	3	8571	3	8644	2
8374	2	8438	6	8502	4	8573	3	8646	12
8375	10	8439	3	8504	15	8574	13	8649	7
8376	2	8441	6	8505	5	8576	5	8652	4
8377	1	8442	1	8508	4	8579	2	8653	4
8378	8	8444	7	8510	7	8580	8	8655	9
8380	1	8445	3	8511	3	8582	1	8661	9
8381	8	8447	7	8513	4	8583	5	8662	5
8382	3	8448	3	8514	2	8585	4	8663	2
8384	8	8450	10	8516	5	8586	6	8664	13
8385	2	8451	2	8517	4	8589	4	8666	1
8387	3	8453	2	8519	4	8591	5	8667	3
8389	1	8454	1	8520	8	8592	13	8670	14
8390	10	8456	10	8522	9	8594	5	8671	6
8391	3	8457	1	8523	2	8595	5	8673	5
8392	2	8459	3	8525	4	8598	8	8676	7
8393	12	8460	2	8526	10	8600	5	8679	4
8394	4	8461	1	8528	9	8601	8	8680	3
8396	6	8462	11	8529	5	8604	6	8681	2
8398	1	8463	7	8531	4	8606	3	8682	4
8399	3	8465	7	8532	5	8607	10	8685	6
8400	3	8466	3	8534	6	8609	2	8688	8
8402	10	8468	10	8535	9	8610	6	8689	3
8403	2	8469	1	8537	9	8613	6	8691	7
8405	9	8471	6	8538	8	8615	2	8694	5
8408	6	8472	6	8540	4	8616	2	8695	1
8409	2	8474	5	8541	3	8618	1	8697	4
8410	1	8475	6	8543	5	8619	5	8700	5
8411	5	8477	4	8544	6	8621	3	8703	6
8412	2	8478	1	8547	3	8622	3	8704	3
8414	8	8480	7	8549	4	8624	1	8706	1
8417	6	8481	2	8550	4	8625	8	8707	2
8418	3	8483	5	8552	4	8627	1	8709	5
8420	5	8484	8	8553	6	8628	5	8712	1
8421	2	8486	2	8555	5	8630	1	8713	2
8423	5	8487	3	8556	2	8631	3	8715	4
8425	1	8489	6	8558	2	8633	1	8716	5
8426	11	8490	6	8559	7	8634	8	8717	1
8427	1	8492	5	8562	6	8635	1	8721	2
8429	7	8493	5	8564	1	8636	1	8722	1
8430	6	8495	7	8565	5	8637	5	8725	3
8432	6	8496	5	8567	2	8639	2	8727	2
8434	2	8498	4	8568	4	8640	7	8730	1

8731	2	8755	1	8787	5	8818	1	8851	6
8733	5	8757	5	8791	1	8820	2	8857	3
8734	3	8758	2	8793	2	8821	3	8860	2
8736	8	8760	3	8796	1	8824	5	8869	1
8739	3	8761	2	8797	2	8827	3	8872	1
8740	3	8763	3	8799	1	8830	3	8875	1
8742	5	8764	2	8803	1	8833	6	8884	1
8743	2	8766	1	8805	2	8836	1	8887	2
8745	5	8769	2	8806	6	8839	2	8892	1
8746	1	8772	3	8808	1	8841	1	8893	1
8748	2	8773	2	8811	1	8842	1	8917	1
8749	1	8775	4	8812	4	8845	2	8932	1
8751	7	8781	5	8815	7	8847	2	8968	1
8754	3	8785	1	8817	1				

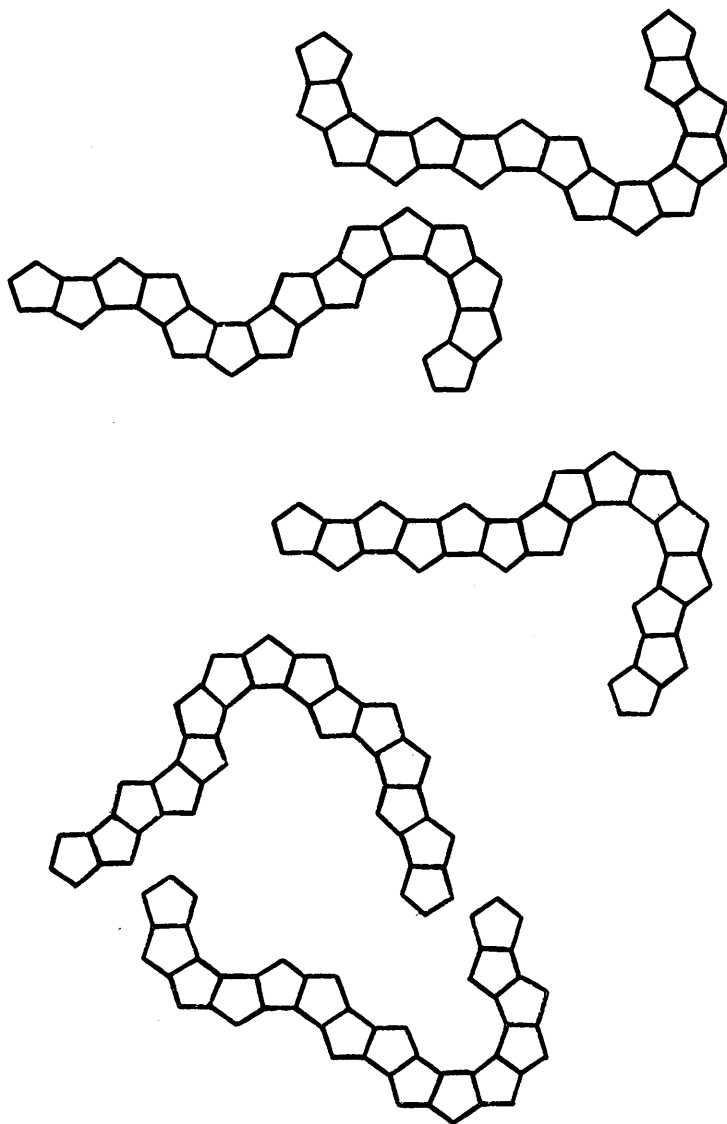
ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Максимальный класс вырождения для графов с числом
колец $h = 15$ и $W = 8360$

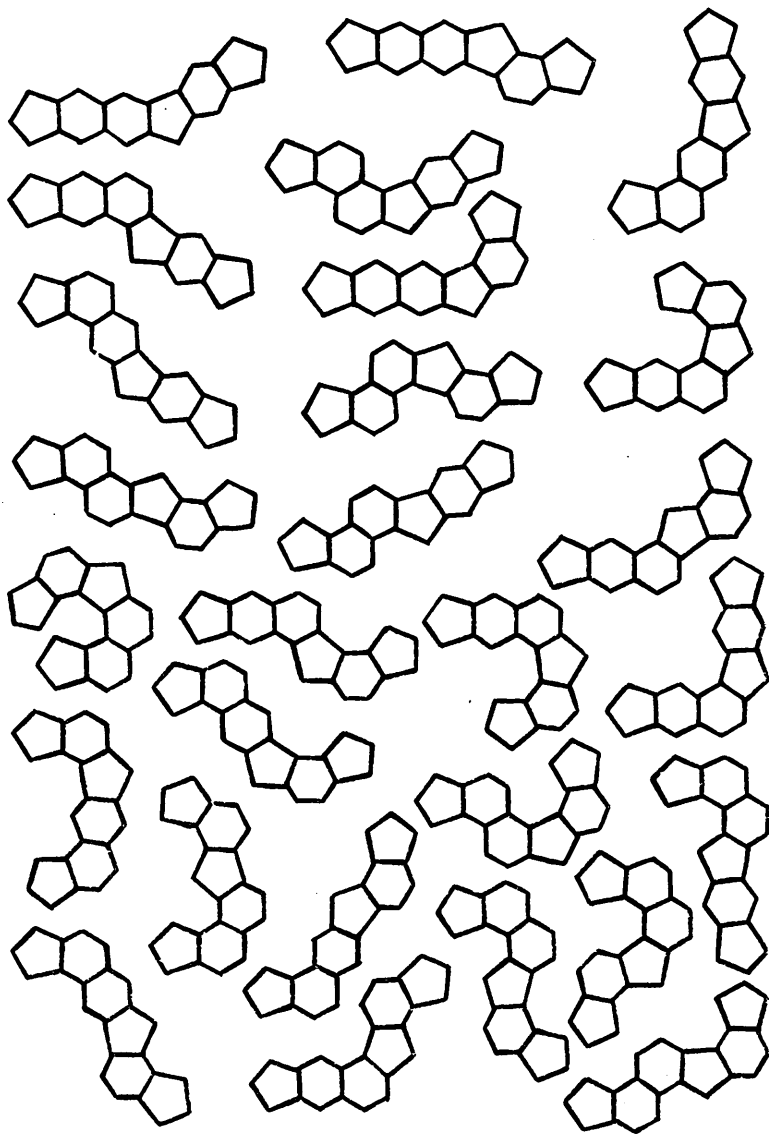




Продолжение приложения 3



Графы, порожденные набором (5,6,6,5,6,5)



Распределение графов класса $K_{5,6}$

h_5	h_6	m	o	a	Все графы
0	3	2	0	0	2
1	2	1	0	2	3
2	1	2	0	1	3
3	0	1	0	0	1
Всего		6	0	3	9
0	4	2	1	1	4
1	3	0	0	8	8
2	2	3	2	7	12
3	1	0	0	5	5
4	0	1	1	0	2
Всего		6	4	21	31
0	5	5	1	4	10
1	4	3	0	26	29
2	3	8	2	38	48
3	2	5	0	31	36
4	1	3	1	11	15
5	0	2	0	1	3
Всего		26	4	111	141
0	6	5	4	16	25
1	5	0	0	95	95
2	4	11	10	172	193
3	3	0	0	186	186
4	2	8	8	98	114
5	1	0	0	32	32
6	0	2	2	2	6
Всего		26	24	601	651

Продолжение приложения 5

h_5	h_6	ш	о	а	Все графы
0	7	14	4	52	70
1	6	9	0	320	329
2	5	32	10	715	757
3	4	21	0	912	933
4	3	24	8	674	706
5	2	16	0	300	316
6	1	6	2	72	80
7	0	4	0	6	10
Всего		126	24	3051	3201
0	8	14	13	169	196
1	7	0	0	1094	1094
2	6	41	40	2815	2896
3	5	0	0	4239	4239
4	4	45	45	3870	3960
5	3	0	0	2304	2304
6	2	22	22	822	866
7	1	0	0	176	176
8	0	4	4	12	20
Всего		126	124	15501	15751
0	9	41	13	520	574
1	8	27	0	3632	3659
2	7	122	40	10672	10834
3	6	81	0	18387	18468
4	5	135	45	20133	20313
5	4	90	0	14697	14787
6	3	66	22	7096	7184
7	2	44	0	2194	2238
8	1	12	4	392	408
9	0	8	0	28	36
Всего		626	124	77751	78501

Продолжение приложения 5

h_5	h_6	m	o	a	Все графы
0	10	41	40	1600	1681
1	9	0	0	12029	12029
2	8	149	148	39400	39697
3	7	0	0	76788	76788
4	6	216	216	97308	97740
5	5	0	0	84672	84672
6	4	156	156	50748	51060
7	3	0	0	20928	20928
8	2	56	56	5576	5688
9	1	0	0	896	896
10	0	8	8	56	72
Всего		626	624	390001	391251
0	11	122	40	4840	5002
1	10	81	0	39326	39407
2	9	446	148	142405	142999
3	8	297	0	309312	309609
4	7	648	216	445716	446580
5	6	432	0	448848	449280
6	5	468	156	321744	322368
7	4	312	0	164436	164748
8	3	168	56	58640	58864
9	2	112	0	13896	14008
10	1	24	8	1968	2000
11	0	16	0	120	136
Всего		3126	624	1951251	1955001
0	12	122	121	14641	14884
1	11	0	0	127940	127940
2	10	527	526	506311	507364
3	9	0	0	1213785	1213785
4	8	945	945	1956420	1958310
5	7	0	0	2239488	2239488
6	6	900	900	1863396	1865196
7	5	0	0	1137888	1137888
8	4	480	480	504960	505920
9	3	0	0	159360	159360
10	2	136	136	33720	33992
11	1	0	0	4352	4352
12	0	16	16	240	272
Всего		3126	3124	9762501	9768751