ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Октябрь–декабрь 2017. Том 24, № 4. С. 22–33

УДК 519.17 DOI: 10.17377/daio.2017.24.582

РЕШЁТОЧНО ПОЛНЫЕ ГРАФЫ *)

Ю. Е. Бессонов[1,a], *А. А. Добрынин*[2,b]

[1]Всероссийский институт научной и технической информации РАН,
ул. Усиевича, 20, 125190 Москва, Россия

[2]Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
пр. Акад. Коптюга, 4, 630090 Новосибирск, Россия

E-mail: [a]bessonov-ye@rambler.ru, [b]dobr@math.nsc.ru

Аннотация. Исследуются свойства графов, которые могут быть размещены в прямоугольной решётке на плоскости так, чтобы все вершины, расположенные в одном и том же ряду (горизонтальном или вертикальном), были смежными. Сформулирован критерий принадлежности произвольного графа указанному классу. Ил. 4, библиогр. 23.

Ключевые слова: граф, прямоугольная решётка, клика.

Введение

Интерес к графам, представленным в этой статье, возник в связи с методом решения задач распознавания изоморфизма, изоморфного вхождения графов и определения общих подграфов. Эти задачи имеют большое прикладное значение в химических исследованиях (поиск в больших базах молекулярных структур, определение взаимосвязи между структурой и свойствами органических соединений), в биохимии и биоинформатике, в проектировании электронных схем и в других областях [4, 9–11, 21]. При разработке алгоритмов для решения указанных задач использовались точные и приближённые методы динамического программирования и комбинаторной оптимизации, генетические методы, схемы на основе просмотра с возвратом и другие [7, 12, 13, 19, 20, 22, 23]. Один из интересных подходов к точному решению этих проблем основан на понятии модульного произведения графов. В [5] была показана сводимость задач распознавания изоморфизма и изоморфного вхождения графов к нахождению неплотности их модульного произведения. Модульное произведение двух графов можно представить как граф, вершины которого расположены в прямоугольной решётке на плоскости, где каждая

*)Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 16–01–00499, 17–51–560008).

вершина соответствует упорядоченной паре вершин исходных графов. Смежность двух вершин в модульном произведении определяется отношениями смежности или несмежности соответствующих пар вершин исходных графов. Более точно, под модульным произведением графов G и G' понимается новый граф, множеством вершин которого является декартово произведение $V \times V'$. Вершины (u, u') и (v, v') модульного произведения смежны тогда и только тогда, когда $u = v$, или $u' = v'$, или только одна из пар (u, v), (u', v') является ребром в соответствующем графе. Характерной особенностью графа модульного произведения является то, что его вершины, лежащие в одном ряду решётки, всегда смежны. На рис. 1 приводится пример модульного произведения графов $K_2 \cup K_1$ и P_3.

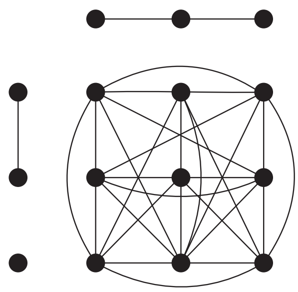

Рис. 1. Модульное произведение двух графов

В статье [18] посредством аналогичной операции над исходными графами задача выделения максимальных общих подграфов сведена к поиску клик. Вспомогательный граф, используемый в [18], является дополнением графа модульного произведения. Поскольку клика — это дополнение максимального независимого множества, оба подхода можно считать эквивалентными. Метод поиска общих частей двух графов с помощью свед́ения задачи к поиску клик отражён в работах [1,6,8,10,11,21]. Известно, что задачи нахождения максимальной клики и неплотности графа относятся к классу NP-полных проблем [14]. С целью сокращения перебора при решении задач выделения максимальных общих подграфов в [1] было предложено исследовать специальные подграфы модульного произведения, в которых вычисление неплотности выполняется с полиномиальной трудоёмкостью. Такие подграфы названы *решёточно полными.* В [2, 3] свойства решёточно полных графов используются для построения алгоритмов определения общих подструктур и анализа симметрий структур. В настоящей статье исследуются свойства решё-

точно полных графов как самостоятельных объектов и даётся критерий решёточной полноты произвольного графа.

1. Свойства решёточно полных графов

Рассматриваются конечные неориентированные графы $G(V, X)$ без петель и кратных рёбер с множеством вершин $V = V(G)$ и рёбер $X = X(G)$. Число вершин (порядок графа) и рёбер G обозначим через $p(G) = |V|$ и $q(G) = |X|$. *Кликой* графа называется его любой максимальный по включению полный подграф. Далее понятие «максимальность» по отношению к подмножеству или подграфу будет означать максимальность по включению. Для обозначения максимальности по числу элементов будем использовать термин «наибольший». *Графом клик* произвольного графа называется граф пересечений семейства всех его клик. Понятия и обозначения теории графов, не определяемые далее в тексте, можно найти в [16].

Пусть $V_1 = \{1, 2, \ldots, k\}$ и $V_2 = \{1, 2, \ldots, t\}$. Множество $V_1 \times V_2$ будем называть *решёткой*, состоящей из k горизонтальных и t вертикальных рядов. Граф G называется *решёточно полным*, если существует такое отображение множества его вершин на подмножество узлов некоторой решётки, при котором смежные вершины располагаются в одном ряду (горизонтальном или вертикальном), а несмежные — в разных рядах. Другими словами, если вершины v_1 и v_2 смежны, то для соответствующих им узлов решётки (x_1, y_1) и (x_2, y_2) выполняются условия $x_1 = x_2$ и $y_1 \neq y_2$ или $x_1 \neq x_2$ и $y_1 = y_2$, а если v_1 и v_2 несмежны, то $x_1 \neq x_2$ и $y_1 \neq y_2$. В дальнейшем определённое таким образом размещение графа G в решётке будем называть *правильным*. На рис. 2 показан пример решёточно полного графа (слева) и его правильное размещение в прямоугольной решётке (справа). Пунктиром изображены части решётки,

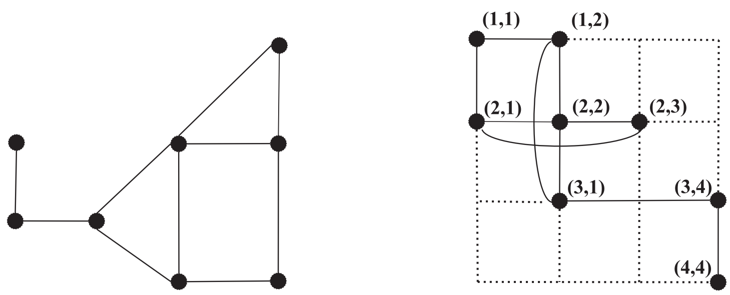

Рис. 2. Решёточно полный граф и его размещение в решётке

не покрытые рёбрами графа. Легко убедиться в том, что полные графы, простые цепи и чётные циклы будут решёточно полными графами.

Назовём *строкой* подмножество всех вершин G, размещённых в узлах (x, y) с одинаковым значением x. Соответственно *столбец* образуют все такие вершины, размещённые в узлах (x, y), у которых значение y одинаково. Отметим, что если решёточно полный граф правильно размещён в решётке, то любое другое его размещение, отличающееся от исходного перестановкой любых двух строк или столбцов либо поворотом на угол, кратный $90°$, также будет правильным. Очевидно, что свойство решёточной полноты графа является наследственным, т. е. любой его порождённый подграф обладаёт этим свойством.

Обозначим через $\mathcal{L}$ класс всех решёточно полных графов. Между множеством $\mathcal{L}$ и множеством всех двудольных графов имеется взаимно однозначное соответствие. Каждому графу $G \in \mathcal{L}$ можно поставить в соответствие двудольный граф $D(G)$ следующим образом. Пусть $S = \{S_1, S_2, \ldots, S_n\}$ — множество строк, а $C = \{C_1, C_2, \ldots, C_m\}$ — множество столбцов графа G. Множество вершин графа $D(G)$ состоит из двух долей: $V_S = \{s_1, s_2, \ldots, s_n\}$ и $V_C = \{c_1, c_2, \ldots, c_m\}$; две вершины s_i и c_j смежны в $D(G)$, если $S_i \cap C_j \neq \varnothing$. Произвольному двудольному графу D с долями V_S и V_C можно поставить в соответствие граф $G(D) \in \mathcal{L}$, правильно размещённый в решётке таким образом, что его вершины расположены в узлах (i, j), если s_i смежна с c_j.

Вершину произвольного графа G назовём *уникликовой*, если она принадлежит только одной клике. Если $G \in \mathcal{L}$ правильно размещён в решётке, то уникликовая вершина является единственной вершиной в строке или в столбце. В размещении графа на рис. 2 уникликовые вершины находятся в узлах решётки с координатами $(2, 3)$ и $(4, 4)$. На рис. 3 показан двудольный граф $D(G)$, соответствующий правильному размещению графа на рис. 2. В решёточно полном графе G число всех клик равно $n+m-r$, где n — число строк, m — число столбцов, а r — число уникликовых вершин в G. Поскольку граф решёточно полный тогда и только

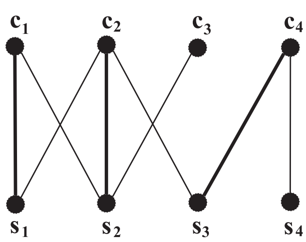

Рис. 3. Граф $D(G)$, построенный по размещению графа G

тогда, когда каждая его компонента решёточно полна, далее будут рассматриваться только связные графы.

Утверждение 1. *Для $G \in \mathcal{L}$ выполняются следующие свойства:*

(а) *висячие вершины в графе $D(G)$ соответствуют уникликовым вершинам в G;*

(б) *граф, полученный удалением всех висячих вершин из $D(G)$, будет графом клик для G;*

(в) *граф G является рёберным графом для $D(G)$.*

Доказательство. (а) Пусть c_i — вершина графа $D(G)$, смежная только с одной вершиной s_j из противоположной доли, т. е. столбец C_i пересекается только с одной строкой S_j. Следовательно, размещённая в узле (i, j) вершина графа G принадлежит единственной клике, составляющей строку S_j.

(б) Вершина графа G, входящая в пересечение клик, не является уникликовой. В силу (а) после удаления висячих вершин в $D(G)$ останутся только те вершины, которые соответствуют кликам, пересекающимся с другими кликами. Такие пересечения отмечаются рёбрами графа $D(G)$.

(в) Каждому ребру $\{s_i, c_j\}$ графа $D(G)$ соответствует вершина v в G, находящаяся на пересечении строки S_i и столбца C_j. Рассмотрим пару произвольных смежных рёбер из $D(G)$. Пусть это будут рёбра $\{s_i, c_r\}$ и $\{s_i, c_k\}$ или $\{s_r, c_j\}$ и $\{s_k, c_j\}$ для некоторых r и k. В первом случае соответствующие этим рёбрам вершины графа G располагаются в строке S_i, а во втором — в столбце C_j графа G, т. е. будут смежными в G. Утверждение 1 доказано.

Так как решёточно полный граф G является рёберным, каждая вершина G принадлежит одной или двум кликам, а непустое пересечение двух клик в G состоит из одной вершины. В силу взаимной однозначности соответствия двудольных и решёточно полных графов рёберный граф произвольного двудольного графа будет решёточно полным. Возникает следующий вопрос: какие структурные свойства обеспечивают решёточную полноту произвольно заданного графа? Ответ на него даёт следующий критерий.

Утверждение 2. *Граф G принадлежит классу $\mathcal{L}$ тогда и только тогда, когда каждые две его клики имеют не более одной общей вершины и его граф клик является двудольным.*

Доказательство. Необходимость следует из утверждения 1. Докажем достаточность. Пусть H — двудольный граф клик для G. Доли графа H обозначим через $S = \{s_1, s_2, \ldots, s_n\}$ и $C = \{c_1, c_2, \ldots, c_m\}$.

Определим правильное отображение множества вершин графа G в узлы решётки следующим образом.

Этап 1. Размещение не уникликовых вершин. Если s_i смежна с c_j, то каждая из них представляет одну и ту же вершину графа G, входящую в пересечение двух клик S_i и C_j. Поместим эту вершину в узел (i, j). Таким образом, в прямоугольной области Q, состоящей из n горизонтальных и m вертикальных рядов, будут размещены все те вершины графа G, которые являются пересечениями его клик. Если в G есть уникликовые вершины, то переходим к следующему этапу.

Этап 2. Размещение уникликовых вершин. Все оставшиеся вершины графа G не входят ни в одно из пересечений клик. Пусть клики, содержащие уникликовые вершины, представлены вершинами множества S с индексами $i_1, i_2, \ldots, i_f$ и вершинами из множества C с индексами $t_1, t_2, \ldots, t_h$. Разместим уникликовые вершины в строках по следующему правилу. Пусть $a = i_j$, где $j \in \{1, 2, \ldots, f\}$ и $r(a)$ вершин клики S_a уже размещены в области Q. Поместим оставшиеся $g(a) = |S_a| - r(a)$ вершин в узлы $(a, m+k+1), (a, m+k+2), \ldots, (a, m+k+g(a))$, где

$$k = \begin{cases} 0, & \text{если } j = 1, \\ \sum\limits_{\lambda=1}^{j-1} g(i_\lambda), & \text{если } j > 1. \end{cases}$$

Аналогичным образом будем размещать уникликовые вершины в столбцах. Пусть $b = t_j$, где $j \in \{1, 2, \ldots, h\}$ и $r(b)$ вершин клики C_b уже размещены в области Q. Поместим оставшиеся $g(b) = |C_b| - r(b)$ вершин в узлы $(n+k+1, b), (n+k+2, b), \ldots, (n+k+g(b), b)$, где

$$k = \begin{cases} 0, & \text{если } j = 1, \\ \sum\limits_{\lambda=1}^{j-1} g(t_\lambda), & \text{если } j > 1. \end{cases}$$

Утверждение 2 доказано.

Приведённый способ размещения вершин в решётке проиллюстрирован на рис. 4. Для графа G (а) изображены его граф клик (б) и правильное размещение вершин G (в). На первом этапе заполняется область Q, а далее множество уникликовых вершин очередной клики располагается ниже или правее уже размещённых вершин.

Известно, что рёберный граф двудольного графа является совершенным, что влечёт совершенность и решёточно полных графов. Задача

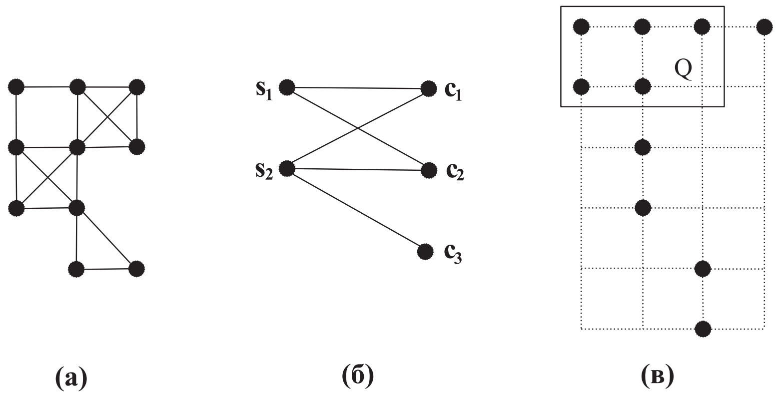

Рис. 4. Граф G, его граф клик и правильное размещение G

нахождения наибольшей клики и наибольшего независимого множества в совершенных графах может быть решена с полиномиальной трудоёмкостью [15]. Так как любая пара клик решёточно полного графа имеет не более одной общей вершины, нахождение наибольшей клики в $G \in \mathcal{L}$ можно осуществить с оценкой трудоёмкости $O(p^2(G))$, а если граф размещён в решётке — то с линейной оценкой.

Нетрудно показать, что если $G \in \mathcal{L}$, то каждому максимальному независимому множеству из G соответствует максимальное паросочетание в $D(G)$, и обратно, каждому максимальному паросочетанию в $D(G)$ соответствует максимальное независимое множество в G. Наибольшее паросочетание графа содержит наибольшее число рёбер и является максимальным. В примере на рис. 3 рёбра наибольшего паросочетания в графе $D(G)$ выделены жирными линиями. Они соответствуют вершинам в узлах решётки $(1,1),(2,2)$ и $(3,4)$, входящим в наибольшее независимое множество графа G на рис. 2. Для поиска наибольшего паросочетания может быть применён, например, алгоритм Хопкрофта—Карпа [17] с оценкой трудоёмкости $O(q(D)p(D)^{1/2})$. Так как максимум $p(D)$ равен $2p(G)$ (вершины G расположены по диагонали решётки), а $q(D) = p(G)$, в терминах порядка графа G получим оценку $O(p^{3/2}(G))$.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Бессонов Ю. Е.** О решении задачи поиска наибольших пересечений графов на основе анализа проекций подграфов модульного произведения // Вычислительные системы. Новосибирск, 1985. Вып. 112. С. 3–22.
2. **Бессонов Ю. Е.** Использование свойств решёточно полных графов для поиска общих подструктур / ВИНИТИ РАН. М., 2014. 13 с. Деп. в ВИНИТИ РАН 03.02.2014, № 32-В2014.

3. **Бессонов Ю. Е.** Использование свойств решёточно полных графов для анализа симметрий структур / ВИНИТИ РАН. М., 2014. 18 с. Деп. в ВИНИТИ РАН 10.06.2014, № 169-В2014.
4. **Бессонов Ю. Е., Мищенко Г. Л., Скоробогатов В. А.** О задаче выделения скелетных схем химических реакций при построении информационных систем по химии // Науч.-техн. инф. Сер. 2. 1985. № 1. С. 8–12.
5. **Визинг В. Г.** Сведение проблемы изоморфизма и изоморфного вложения к задаче нахождения неплотности // Тр. III Всесоюз. конф. по проблемам теоретической кибернетики. Новосибирск, 1974. С. 124.
6. **Загоруйко Н. Г., Скоробогатов В. А., Хворостов П. В.** Вопросы анализа и распознавания молекулярных структур на основе анализа общих фрагментов // Вычислительные системы. Новосибирск, 1984. Вып. 103. С. 26–50.
7. **Akutsu T.** A polynomial time algorithm for finding a largest common subgraph of almost trees of bounded degree // IEICE Trans. Fundamentals. 1993. Vol. E76-A, No. 9. P. 1488–1493.
8. **Barrow H. G., Burstall R. M.** Subgraph isomorphism, matching relational structures and maximal cliques // Inf. Proc. Lett. 1976. Vol. 4, No. 4. P. 83–84.
9. **Bonnici V., Giugno R., Pulvirenti A., Shasha D., Ferro A.** A subgraph isomorphism algorithm and its application to biochemical data // BMC Bioinformatics. 2013. Vol. 14, Suppl. 7, S13. P. 1–13.
10. **Duesbury E., Holliday J. D., Willett P.** Maximum common subgraph isomorphism algorithms // MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 2017. Vol. 77. P. 213–232.
11. **Ehrlich H. C., Rarey M.** Maximum common subgraph isomorphism algorithms and their applications in molecular science: A review // WIREs Comput. Mol. Sci. 2011. Vol. 1. P. 68–79.
12. **Fröhlich H., Košir A., Zajc B.** Optimization of FPGA configurations using parallel genetic algorithm // Inf. Sci. 2001. Vol. 133, No. 3. P. 195–219.
13. **Funabiki N., Kitamichi J.** A two-stage discrete optimization method for largest common subgraph problems // IEICE Trans. Inf. Syst. 1999. Vol. E82-D, No. 8. P. 1145–1153.
14. **Garey M. R., Johnson D. S.** Computers and intractability: A guide to the theory of NP-completeness. San Francisco: Freeman, 1979. 338 p.
15. **Grötschel M., Lovász L., Schrijver A.** Geometric algorithms and combinatorial optimization. Heidelberg: Springer-Verl. 1988. 362 p.
16. **Harary F.** Graph theory. Reading: Addison-Wesley, 1969. 274 p.
17. **Hopcroft J. E., Karp R. M.** An $n^{5/2}$ algorithm for maximum matchings in bipartite graphs // SIAM J. Comput. 1973. Vol. 2, No. 4. P. 225–231.
18. **Levi G.** A note on the derivation of maximal common subgraphs of two directed or undirected graphs // Calcolo. 1973. Vol. 9, No. 4. P. 341–352.

19. McGregor J. J. Backtrack search algorithms and the maximal common subgraph problem // Software: Pract. Exper. 1982. Vol. 12. P. 23–34.

20. Raymond J. W., Gardiner E. J., Willett P. Heuristics for similarity searching of chemical graphs using a maximum common edge subgraph algorithm // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 2002. Vol. 42, No. 2. P. 305–316.

21. Raymond J. W., Willett P. Maximum common subgraph isomorphism algorithms for the matching of chemical structures // J. Comput. Aided Mol. Des. 2002. Vol. 16. P. 521–533.

22. Ullmann J. R. An algorithm for subgraph isomorphism // J. ACM. 1976. Vol. 16. P. 31–42.

23. Wagener M., Gasteiger J. The determination of maximum common substructures by a genetic algorithm: application in synthesis design and for the structural analysis of biological activity // Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1994. Vol. 33, No. 11. P. 1189–1192.

Бессонов Юрий Ефимович,
Добрынин Андрей Алексеевич

Статья поступила
20 июня 2017 г.

Исправленный вариант —
17 июля 2017 г.

DISKRETNYI ANALIZ I ISSLEDOVANIE OPERATSII
/DISCRETE ANALYSIS AND OPERATIONS RESEARCH/
October–December 2017. Volume 24, No. 4. P. 22–33

UDC 519.17 DOI: 10.17377/daio.2017.24.582

LATTICE COMPLETE GRAPHS

Yu. E. Bessonov[1,a] and *A. A. Dobrynin*[2,b]
[1]All-Russian Institute for Scientific and Technical Information,
20 Usievich St., 125190 Moscow, Russia
[2]Sobolev Institute of Mathematics,
4 Acad. Koptyug Ave., 630090 Novosibirsk, Russia
E-mail: [a]bessonov-ye@rambler.ru, [b]dobr@math.nsc.ru

Abstract. We study the properties of graphs that can be placed in a rectangular lattice so that all vertices located in the same (horizontal or vertical) row be adjacent. Some criterion is formulated for an arbitrary graph to be in the specified class. Illustr. 4, bibliogr. 23.

Keywords: graph, rectangular lattice, clique.

REFERENCES

1. **Yu. E. Bessonov,** On the solution to the greatest intersection search problem on graphs with the use of analysis of subgraph projections in the modular product of the graphs, *Vychislitel'nye sistemy* (Computing Systems), Vol. 112, pp. 3–22, Inst. Mat. SO AN SSSR, Novosibirsk, 1985.
2. **Yu. E. Bessonov,** Using the properties of lattice complete graphs for search of common substructures, *Manuscr.,* Deposited in VINITI RAN 03.02.2014, No. 32-B2014, VINITI RAN, Moscow, 2014.
3. **Yu. E. Bessonov,** Using the properties of lattice complete graphs for analysis of structure symmetries, *Manuscr.,* Deposited in VINITI RAN 10.06.2014, No. 169-B2014, VINITI RAN, Moscow, 2014.
4. **Yu. E. Bessonov, G. L. Mishchenko,** and **V. A. Skorobogatov,** On the problem of determining skeleton schemes of chemical reactions in the construction of information systems in chemistry, *Nauchno-Tekh. Inf., Ser. 2,* **1**, 8–12, 1985.
5. **V. G. Vizing,** Reduction of the isomorphism and isomorphic embedding problems to the evaluation problem for nondensity of a graph, in *Trudy III Vsesoyuznoi konferentsii po problemam teoreticheskoi kibernetiki* (Proc. III All-Union Conf. on Problems of Teoretical Cybernetics), p. 124, Inst. Mat. SO AN SSSR, Novosibirsk, 1974.

6. **N. G. Zagoruyko, V. A. Skorobogatov,** and **P. V. Khvorostov,** Topics in the analysis and recognition of molecular structures on the basis of common fragments, *Vychislitel'nye sistemy* (Computing Systems), Vol. 103, pp. 26–50, Inst. Mat. SO AN SSSR, Novosibirsk, 1984.
7. **T. Akutsu,** A polynomial time algorithm for finding a largest common subgraph of almost trees of bounded degree, *IEICE Trans. Fundamentals,* **E76-A**, No. 9, 1488–1493, 1993.
8. **H. G. Barrow** and **R. M. Burstall,** Subgraph isomorphism, matching relational structures and maximal cliques, *Inf. Proc. Lett.,* **4**, No. 4, 83–84, 1976.
9. **V. Bonnici, R. Giugno, A. Pulvirenti, D. Shasha,** and **A. Ferro,** A subgraph isomorphism algorithm and its application to biochemical data, *BMC Bioinform.,* **14**, Suppl. 7, S13, 1–13, 2013.
10. **E. Duesbury, J. D. Holliday,** and **P. Willett,** Maximum common subgraph isomorphism algorithms, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.,* **77**, 213–232, 2017.
11. **H. C. Ehrlich** and **M. Rarey,** Maximum common subgraph isomorphism algorithms and their applications in molecular science: A review, *WIREs Comput. Mol. Sci.,* **1**, 68–79, 2011.
12. **H. Fröhlich, A. Košir,** and **B. Zajc,** Optimization of FPGA configurations using parallel genetic algorithm, *Inf. Sci.,* **133**, No. 3, 195–219, 2001.
13. **N. Funabiki** and **J. Kitamichi,** A two-stage discrete optimization method for largest common subgraph problems, *IEICE Trans. Inf. Syst.,* **E82-D**, No. 8, 1145–1153, 1999.
14. **M. R. Garey** and **D. S. Johnson,** *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness,* Freeman, San Francisco, 1979.
15. **M. Grötschel, L. Lovász,** and **A. Schrijver,** *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization,* Springer-Verlag, Heidelberg, 1988 (Algorithms Comb., Vol. 2).
16. **F. Harary,** *Graph Theory,* Addison-Wesley, Reading, MA, 1969.
17. **J. E. Hopcroft** and **R. M. Karp,** An $n^{5/2}$ algorithm for maximum matchings in bipartite graphs, *SIAM J. Comput.,* **2**, No. 4, 225–231, 1973.
18. **G. Levi,** A note on the derivation of maximal common subgraphs of two directed or undirected graphs, *Calcolo,* **9**, No. 4, 341–352, 1973.
19. **J. J. McGregor,** Backtrack search algorithms and the maximal common subgraph problem, *Softw., Pract. Exper.,* **12**, 23–34, 1982.
20. **J. W. Raymond, E. J. Gardiner,** and **P. Willett,** Heuristics for similarity searching of chemical graphs using a maximum common edge subgraph algorithm, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.,* **42**, No. 2, 305–316, 2002.
21. **J. W. Raymond** and **P. Willett,** Maximum common subgraph isomorphism algorithms for the matching of chemical structures, *J. Comput. Aided Mol. Des.,* **16**, 521–533, 2002.

22. J. R. Ullmann, An algorithm for subgraph isomorphism, *J. ACM,* **16**, 31–42, 1976.

23. M. Wagener and **J. Gasteiger,** The determination of maximum common substructures by a genetic algorithm: Application in synthesis design and for the structural analysis of biological activity, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.,* **33**, No. 11, 1189–1192, 1994.

Yuri E. Bessonov,
Andrey A. Dobrynin

Received
20 June 2017
Revised
17 July 2017