

УДК 681.3

Э.И. Ватутин

evatutin@rambler.ru

Юго-Западный государственный университет, Курск

ПОВЫШЕНИЕ ДИФФЕРЕНЦИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ИНДЕКСА РАНДИЧА

В работе предложена модификация индекса Рандича, позволяющая повысить дифференцирующую способность соответствующего инварианта графа при построении классов изоморфизма графов.

Одной из задач в области теории графов, для которой неизвестен полиномиальный алгоритм решения, является задача проверки изоморфизма пары графов $G_1 = \langle A_1, V_1 \rangle$, $A_1 = \{a_1^{(1)}, a_2^{(1)}, \dots, a_{N_1}^{(1)}\}$ – множество вершин, $V_1 = \{v_1^{(1)}, v_2^{(1)}, \dots, v_{M_1}^{(1)}\}$ – множество дуг, и $G_2 = \langle A_2, V_2 \rangle$, $A_2 = \{a_1^{(2)}, a_2^{(2)}, \dots, a_{N_2}^{(2)}\}$, $V_2 = \{v_1^{(2)}, v_2^{(2)}, \dots, v_{M_2}^{(2)}\}$. В различных классах задач существует необходимость либо в установлении факта наличия или отсутствия изоморфизма, либо в отыскании подстановки изоморфизма.

Отношение изоморфизма графов $G_1 \simeq G_2$ является отношением эквивалентности, что позволяет разбить множество всех графов на классы изоморфизма (пример подобного разбиения для $N = 4$ приведен в [1]), причем в рамках любого класса изоморфизма по определению все графы попарно изоморфны, а между классами – нет. Подобное разбиение может быть полезно, например, для снижения вычислительной сложности при анализе корректности алгоритмов проверки изоморфизма. Для построения подобного разбиения необходим полный полиномиально вычисляемый инвариант графа, однако он в настоящее время неизвестен (хотя для заданного N известно число классов изоморфизма [2]), поэтому для построения предположительно полного разбиения на классы изоморфизма можно воспользоваться кортежем из ряда известных полиномиально вычисляемых инвариантов (число вершин графа, отсортированный вектор степеней вершин, детерминант матрицы смежности, индекс Рандича и др.). Ввиду недостаточной дифференцирующей способности подобного предположительно полного инварианта число классов изоморфизма будет отличаться от искомого в меньшую сторону, т.к. некоторые неизоморфные графы будут определены как изоморфные.

Индекс Рандича [3], рассчитываемый как
$$r = \sum_{\forall (a_i, a_j) \in A} \frac{1}{\sqrt{d(a_i)d(a_j)}},$$

где $d(a_i)$ – степень вершины, и с успехом применяемый в хемоинформатике, в данной задаче обладает низкой дифференцирующей способностью (например, для $N = 8$ формируемое число классов изоморфизма равно 12319 вместо искомого 12346). Его дифференцирующую способность можно повысить путем модификации

индекса $r' = \sum_{\substack{\forall (a_i, a_j) \in V \\ \forall (a_i, a_k) \in V \\ \forall (a_j, a_k) \in V}} \frac{1}{\sqrt{d(a_i)d(a_j)d(a_k)}}$ (при $N = 6$ дополнительно

распознается 2 класса изоморфизма, при $N = 7 - 73$ класса) и совместного использования пары индексов r и r' в качестве компонент кортежа предположительно полного инварианта. (Попытки добавления в знаменатель дополнительных множителей и модификация нелинейной функции, как показали вычислительные эксперименты, не приводят к повышению дифференцирующей способности и признаны нецелесообразными.)

В качестве еще одной модификации можно рассматривать следующий индекс:

$$r'' = \sum_{\substack{\forall (a_i, a_j, a_k), \\ i \neq j, i \neq k}} \frac{1}{\sqrt{d(a_i)d(a_j)m_{ij} + d(a_i)d(a_k)m_{ik} + d(a_j)d(a_k)m_{jk}}},$$

где $m_{ij} \in \{0, 1\}$ – соответствующее значение матрицы смежности графа.

Как показали вычислительные эксперименты, значение индекса r'' можно использовать в составе кортежа вместо пары индексов r и r' . Пример, подтверждающий повышение дифференцирующей способности, приведен на рисунке.

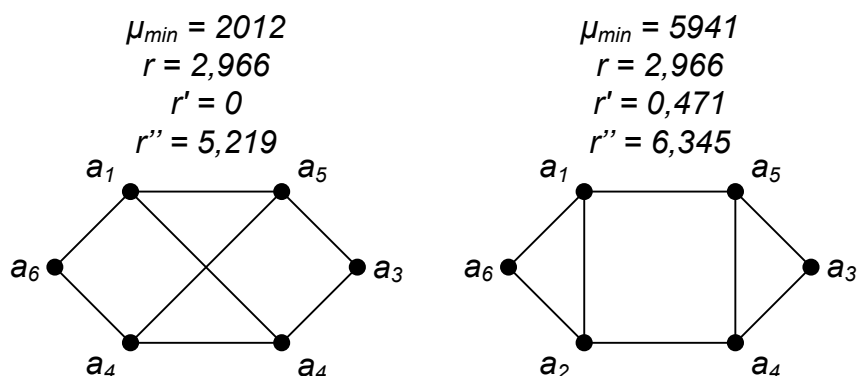


Рис. Пример графов, не различаемых с использованием индекса Рандича r , но различаемых с его использованием модификаций r' и r''

1. Валяев В.В., Ватутин Э.И. Метод определения изоморфизма графов общего вида за полиномиальное время // Известия ЮЗГУ. Серия «Управление, вычислительная техника, информатика. Медицинское приборостроение». № 2. Ч. 1. 2012. С. 200–206.
2. <http://oeis.org/A000088>
3. Randić, M. (1975), «Characterization of molecular branching», Journal of the American Chemical Society T. 97 (23): 6609–6615.