АЛГОРИТМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ГРАФОВ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЯ
(Вычислительные системы)
1988 год Выпуск 127

УДК 519.17:547.64

ПОДГРАФЫ ПРАВИЛЬНОЙ ЧЕТЫРЕХУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКИ R^4

Е.В. Мжельская

Подграфы правильной четырехугольной решетки R^4 рассматривались Харари [1], Ридом [2] в задаче о росте клеток. Уленбек [3] интересовался числом различных способов покрытия плоской решетки данным набором квадратных полимино, т.е. подграфов R^4.

В данной работе рассматриваются свойства подграфов R^4, а также их представление в виде граничной степенной последовательности [4], которое является достаточно простым и удобным средством для машинной обработки графов, в частности, в алгоритмах генерации графов.

§1. Определение h-K[4]-графов

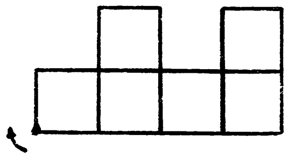
В [4] рассматривались молекулярные графы полициклических бензоидных углеводородов, являющиеся подграфами бесконечного плоского топологического графа R^6.

Аналогичным образом можно определить подграфы плоского топологического графа R^4, все грани которого есть квадраты, а вершины имеют степень четыре [5].

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Граф G, являющийся подграфом R^4, называется ката-конденсированным графом, или h-КК[4]-графом, если ни одна из его вершин не является внутренней. Здесь h - число граней в графе.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Граф G, являющийся подграфом R^4, называется пери-конденсированным графом, или h-PK[4]-графом, если он содержит хотя бы одну внутреннюю вершину.

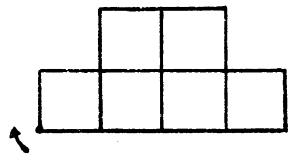
Примеры h-KK[4]-графов и h-PK[4]-графов приведены на рис. 1.



$G \in KK[4]$

$S(G) = (22422442232333)$

а)



$G \in PK[4]$

$S(G) = (2242232422333)$

б)

Рис. 1

Обозначим класс h-KK[4]-графов через $KK[4]$ и класс h-PK[4]-графов через $PK[4]$. Графы, принадлежащие $K[4] = KK[4] \cup PK[4]$, будем называть h-K[4]-графами, или просто K[4]-графами. Заметим, что границы K[4]-графов G и H совпадают тогда и только тогда, когда $G \cong H$ [4]. Пусть $G = (V,E,Q)$ - плоский топологический граф с множеством вершин $V(G)$, $|V(G)| = p$, множеством ребер $E(G)$, $|E(G)| = q$, и множеством граней $Q(G)$, $|Q(G)| = h$.

Следующие свойства h-K[4]-графов очевидны.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. *Пусть* $G = (V,E,Q) \in KK[4]$. *Тогда* $|V| = 2h+2$, $|E| = 3h+1$ *и все вершины* $v \in V(G)$ *принадлежат границе графа* G.

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. *Пусть* $G = (V,E,Q) \in PK[4]$. *Тогда* $|V| = 2h+2-i$ $|E| = 3h+1-i$, *где* i *- число внутренних вершин графа* G.

§2. Граничная степенная последовательность h-K[4]-графов

В [4] рассматривается представление графов в виде граничной степенной последовательности для подграфов правильной шестиугольной решетки R^6.

Граничной степенной последовательностью $S(G)$ K[4]-графа G является числовая последовательность степеней граничных вершин при последовательном обходе границы графа с заданной ориентацией и выбранной начальной вершиной. Множество $\mathbf{S}(G)$ всех граничных степенных последовательностей K[4]-графа G можно определить, меняя выбор начальной вершины и направление обхода границы. Очевидно, что $|\mathbf{S}(G)| = 2p_B$, где p_B - мощность множества граничных вершин.

Для $G \in$ KK[4] граничная степенная последовательность совпадает со степенной последовательностью графа (рис.1а); для $G \in$ PK[4] степени внутренних вершин не входят в граничную степенную последовательность (рис.1б) и $S(G)$ не совпадает со степенной последовательностью графа.

На рис.1 для графов указаны направления обхода границы и точками выделены начальные вершины.

Обозначим длину граничной степенной последовательности $S(G)$ через $\mathrm{lng}(s)$.

Следующие свойства K[4]-графов очевидны.

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. *Пусть* $G \in$ K[4], i - *число внутренних вершин графа* G. *Тогда*

$$\mathrm{lng}(s) = 2h - 2(i-1).$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 4. *Число граничных вершин степени три* K[4]*-графа четно.*

УТВЕРЖДЕНИЕ 5. *Сумма числа граничных вершин степени два и числа граничных вершин степени четыре* K[4]*-графа четна.*

Каноническим представлением [4] $K[4]$-графа называется лексикографически минимальный элемент множества $S(G)$. Обозначим его $S^*(G)$. Так, для графа G, изображенного на рис. 1а, $S^*(G)$ = (22323332242244).

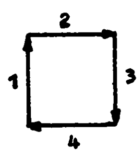
Поскольку, как было замечено в §1, границы $K[4]$-графов G и H совпадают тогда и только тогда, когда $G \simeq H$ и граница любого $K[4]$-графа может быть восстановлена по его граничной степенной последовательности единственным образом, то верна следующая

ТЕОРЕМА. *Пусть* $G, H \in K[4]$, $S^*(G)$, $S^*(H)$ - *каноническое представление графов. Тогда*

$$S^*(G) = S^*(H) \Leftrightarrow G \cong H.$$

Из теоремы следует, что различные канонические представления соответствуют неизоморфным $K[4]$-графам. Распознавание изоморфизма $K[4]$-графов сводится к нахождению их канонических представлений и сравнению.

Заметим, что по граничной степенной последовательности графа может быть легко восстановлена его матрица смежности. Кроме этого, возможна визуализация графов на основе граничной реберной последовательности, которая формируется с учетом четырех направлений в решетке. Если в R^4 каждому из четырех ребер C_4 поставить в соответствие определенную цифру (рис. 2), то его граница может быть описана граничной реберной последовательностью, например, 1234.



$R(G)$= (1234)

Рис. 2

Переход от граничной степенной последовательности осуществляется следующим образом. Пусть $S(G) = (d_1 \ldots d_{p_B})$ - граничная степенная последовательность, $R(G)=(e_1 \ldots e_{p_B})$ - граничная реберная последовательность, Ψ - циклическая подстановка (1234).

Тогда $R(G)$ можно получить по $S(G)$:

$$e_1 = 1,$$

$$e_{i+1} = \begin{cases} \Psi(e_i), \text{ если } \deg v_i = 2, \\ e_i, \text{ если } \deg v_i = 3, \quad 1 \le i \le p_B - 1, \\ \Psi^{-1}(e_i), \text{ если } \deg v_i = 4 . \end{cases}$$

И, наоборот, $S(G)$ можно получить по $R(G)$:

1) если $e_{i+1} = \Psi^{-1}(e_i), 1 \le i \le p_B - 1$, $e_1 = \Psi^{-1}(e_{p_B})$, то $\deg v_{i+1} = 4$;

2) если $e_{i+1} = e_i$, $1 \le i \le p_B - 1$, $e_1 = e_{p_B}$, то $\deg v_{i+1} = 3$;

3) если $e_{i+1} = \Psi(e_i)$, $1 \le i \le p_B - 1$, $e_i = \Psi(e_{p_B})$, то $\deg v_{i+1} = 2$.

§3. Генерация h-K[4]-графов

Представление h-K[4]-графов в виде граничной степенной последовательности может быть использовано в алгоритмах генерации h-K[4]-графов.

Процесс генерации данных графов выглядит следующим образом. Считаем, что простой цикл длины четыре C_4 задан. Предположим, что все неизоморфные K[4]-графы степени h получены. Здесь под степенью K[4]-графа будем понимать число простых циклов длины четыре. Тогда K[4]-графы степени $(h + 1)$ получаются из данного K[4]-графа степени h путем отождествления всех его возможных граничных ребер с любым ребром C_4 . Для каждого нового K[4]-графа находится его каноническое представление. Последовательности упорядочиваются и одинаковые устраняются. В итоге имеем все неизоморфные К[4]-графы степени (h+1).

Алгоритм генерации реализован в виде программ GEN4 на языке PASCAL. Результаты генерации для $1 \le h \le 7$ представлены в таблице.

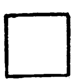
Таблица

Число К[4]-графов с числом циклов h и числом внутренних вершин i для $1 \le h \le 7$

Число циклов, h	Число вершин, i			Общее число К[4]-графов
	0	1	2	
1	1			1
2	1			1
3	2			2
4	4	1		5
5	11	1		12
6	27	7	1	35
7	82	21	4	107

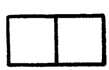
Ниже даны изображения полученных h-К[4]-графов для $1 \le h \le 7$; i - число внутренних вершин.

$h = 1$



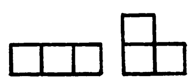
1

$h = 2$



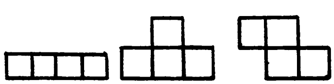
1

$h = 3$



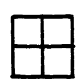
1 2

$h = 5$, $i = 0$



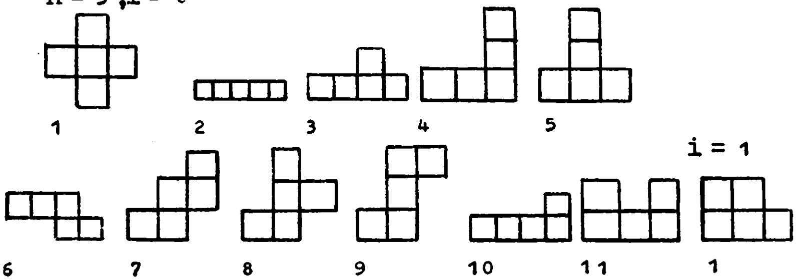
1 2 3 4

$i = 1$

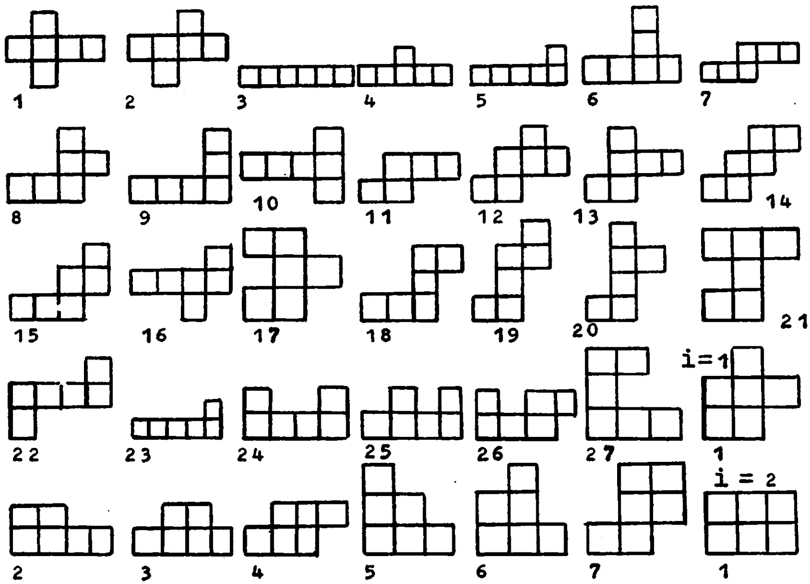


1

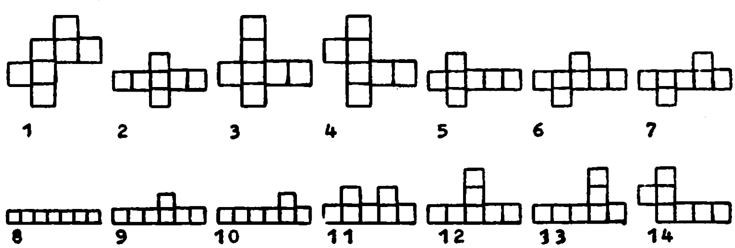
h = 5, i = 0

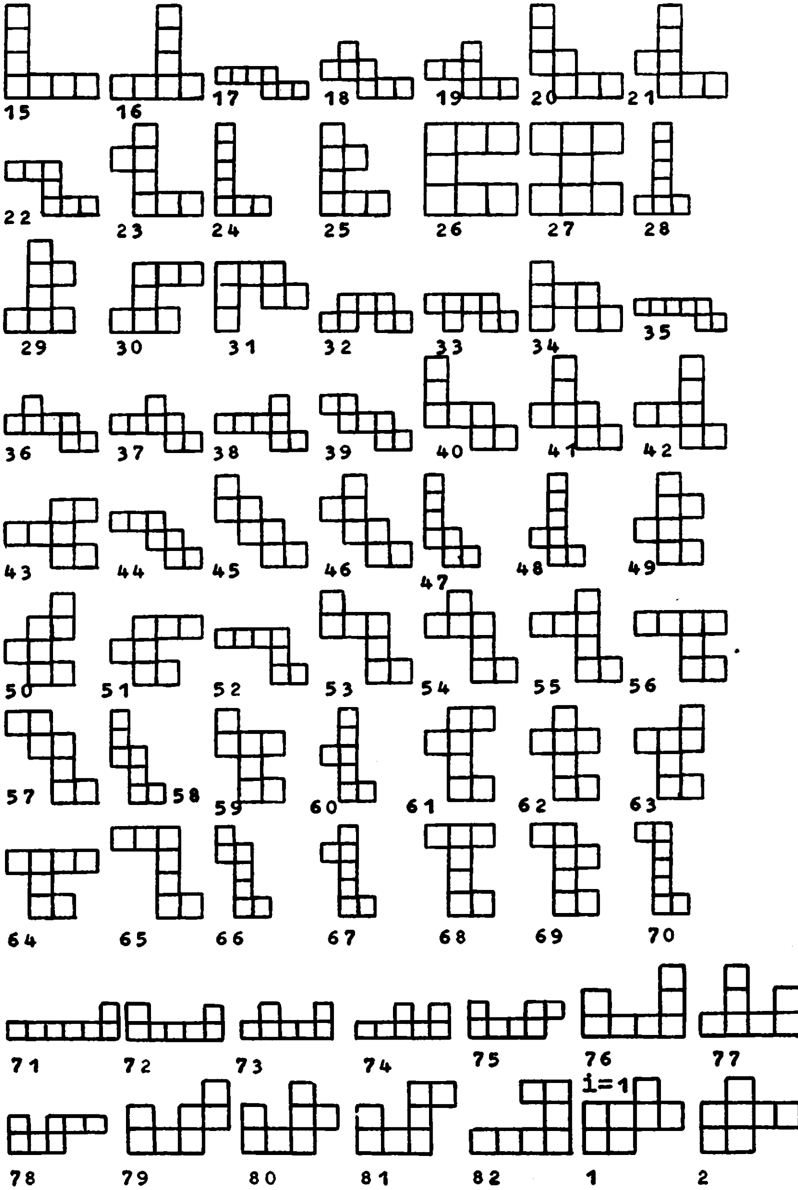


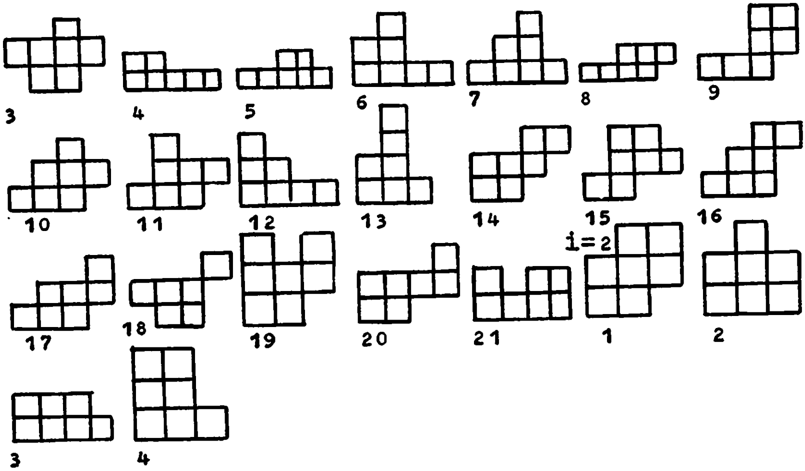
h = 6, i = 0



h = 7, i = 0




15 16 17 18 19 20 21
22 23 24 25 26 27 28
29 30 31 32 33 34 35
36 37 38 39 40 41 42
43 44 45 46 47 48 49
50 51 52 53 54 55 56
57 58 59 60 61 62 63
64 65 66 67 68 69 70
71 72 73 74 75 76 77
i=1
78 79 80 81 82 1 2



Результаты машинной генерации h-K[4]-графов совпадают с данными, которые были получены Ридом [2] при перечислении им квадратных полимино на основе классических комбинаторных методов.

Литература

1. ХАРАРИ Ф. Задачи перечисления графов //Успехи мат.наук. 1969. - Вып. 24, № 5. - С. 208-212.

2. READ R.C. Contributions to the cell-growth problem //Can. J. Math. - 1982. - Vol. 14, N 1. - P. 1-21.

3. FORD G.W., UHLENBECK G.E. Combinatorial problems in the theory of graphs //Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. — 1956.- Vol. 42. - P. 122-128, 203-208. 529-535.

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

5. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В., СКОРОБОГАТОВ В.А. Применение теории графов в химии полициклических бензоидных углеводородов. -Новосибирск, 1987. - 34 с. - (Препринт/ АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т математики; № 35).

Поступила в ред.-изд.отд.
12 октября 1988 года