24.04.2025

ІЗОМОРФІЗМ ГРАФІВ

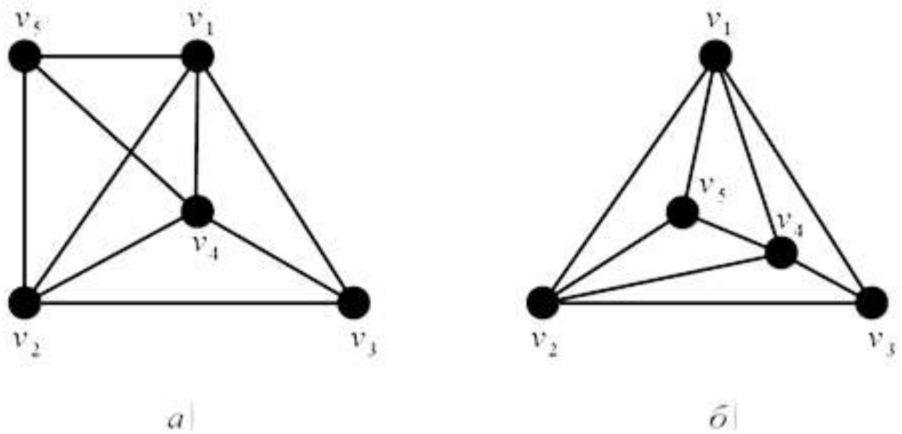

Рис.1 Графи G_1 і G_2 .

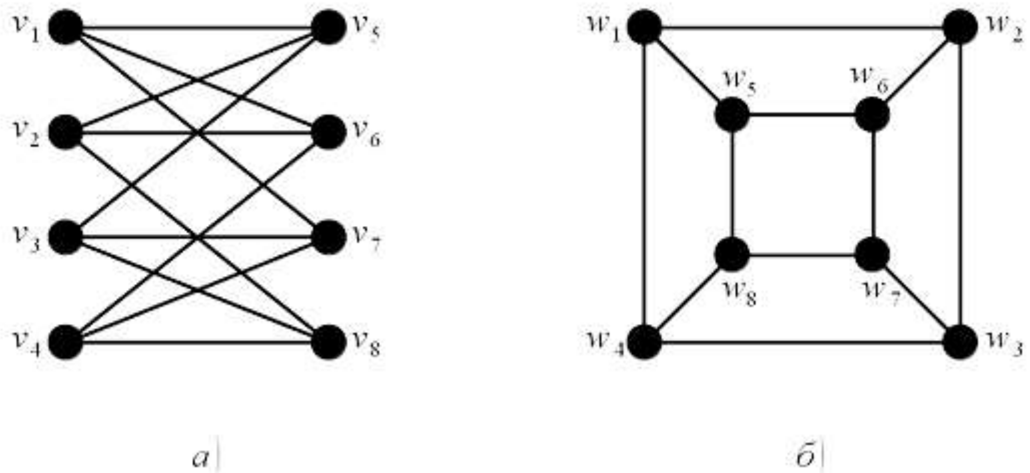

Рис.2 Графи G_1 =(V, E) і G_2= (W,F).

Так, графи G_1=(V, E) та G_2 =(WF) з рис.2а та 2б насправді є двома представленнями одногой того ж самого графа, якщо їхні вершини перенумеровані таким чином:

$$\begin{pmatrix} V \\ W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 & v_6 & v_7 & v_8 \\ w_1 & w_6 & w_8 & w_3 & w_5 & w_2 & w_4 & w_7 \end{pmatrix}.$$

Після такої перенумерації (підстановки) всі 12 ребер поєднують ті ж самі вершини:

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_{1,5} & e_{1,6} & e_{1,7} & e_{2,5} & e_{2,6} & e_{2,8} & e_{3,5} & e_{3,7} & e_{3,8} & e_{4,6} & e_{4,7} & e_{4,8} \\ f_{1,5} & f_{1,2} & f_{1,4} & f_{6,5} & f_{6,2} & f_{6,7} & f_{8,5} & f_{8,4} & f_{8,7} & f_{3,2} & f_{3,4} & f_{3,7} \end{pmatrix}.$$

Саме такі графи і називаються ізоморфними.

Означення 1. Ізоморфізмом графів (graph isomorphism) G_1 = (V, E) та G_2 = (W,F) називається бієкція (взаємно однозначна відповідність) між множинами вершин V та W:

$$f : V \leftrightarrow W \qquad (1)$$

така, що будь-які дві вершини v_i та v_j графа G_1 є суміжними тоді й тільки тоді, коли f (v_i) та f (v_j) суміжні в G_2 .

Існування ізоморфізму позначається: $G_1 \simeq G_2$.

В цьому означенні йдеться про прості незважені графи. Але його можна узагальнити й на мультиграфи, псевдографи, гіперграфи, орграфи. Якщо ребра зважені, то ізоморфізм вимагає також збереження ваги відповідних ребер. Єдине, що не зберігається, так це порядок (нумерація) ребер. А він і не потрібен: будь-яка множина, у т.ч. й множина ребер E, є неупорядкованою. Ми будемо розглядати лише найпростіший випадок: прості незважені графи.

Основна задача ізоморфізму є такою. Для двох заданих графів G_1= (V, E) та G_2 = (W,F) треба з'ясувати, чи є вони ізоморфними, тобто чи існує бієкція (1). Якщо існує, треба її знайти і побудувати відповідну підстановку вершин.

Зазвичай ми нумеруємо вершини натуральними числами від 1 до n. Тоді графи є ізоморфними, якщо існує перестановка p(i) чисел від 1 до n така, що вершини з номерами p(i) та p(j) будуть суміжними в графі G_2 тоді й тільки тоді, коли вершини з номерами i та j суміжні в графі G_1. Здавалося б, у чому проблема? Треба перевірити всі P_n = n! перестановок та знайти потрібну. Але це неможливо за реальний час. Дійсно, нехай, наприклад, n = 100 (невеликий граф). Треба перевірити $P_{100} = 100! \approx 9{,}33 \times 10^{157}$ перестановок.

$9{,}08 \times 10^{88}$ років.

Отже, перебирання перестановок є неефективним. Треба скорочувати кількість операцій. На жаль, поки ще не відомі алгоритми розв'язання задачі ізоморфізму, поліноміальні за часом відносно n та m. В інтернеті нещодавно промайнуло повідомлення, що, начебто, такий алгоритм створено, але підтвердження цьому немає. Проте інколи є можливість швидко довести неізоморфність графів, що перевіряються. Справа в тому, що є величини, які не змінюються при переході до ізоморфного графа. Кажуть, що такі величини є інваріантними відносно бієкції (1).

2. Інваріанти графів

Означення 2. Інваріантом графа (graph invariant) називається числова величина (скалярна, векторна, матрична), що не змінюється при переході до ізоморфного графа. З означення випливає, що рівність інваріантів є лише необхідною, але не достатньою умовою ізоморфізму. Тобто якщо інваріанти не співпадають, то графи точно не ізоморфні.

А якщо співпадають, то можуть бути ізоморфними, а можуть і не бути. Це дозволяє при дослідженні на ізоморфізм відкидати напевно неізоморфні графи. Почнемо з найпростішого. Якщо у графів $G_1 = (V_1 ,E_1)$ та $G_2 = (V_2 ,E_2)$ різна кількість вершин або ребер, вони не можуть бути ізоморфними, тому що тоді побудувати бієкцію (1) неможливо.

Інваріант 1. $G_1 \simeq G_2 \Rightarrow n_1 = n_2$.

Інваріант 2. $G_1 \simeq G_2 \Rightarrow m_1 = m_2$.

Обчислимо в графах G_1 та G_2 ексцентриситети всіх вершин . Оскільки ізоморфні графи відрізняються один від одного лише нумерацією вершин, то в векторах ексцентриситетів ізоморфних графів повинна бути одинакова кількість одиниць, двійок, трійок тощо. Якщо координати векторів ексцентриситетів упорядкувати (наприклад, у порядку зростання), то вони повинні просто співпадати. Позначимо упорядковані вектори ексцентриситетів графів G_1 та G_2 як $\varepsilon(G_1)$ та $\varepsilon(G_2)$. Тоді маємо наступний інваріант:

Інваріант 3. $G_1 \simeq G_2 \Rightarrow \varepsilon(G_1) = \varepsilon(G_2)$.

Як наслідок, повинні співпадати найменші координати цих векторів (радіуси графів) та найбільші (діаметри).

Інваріант 4. $G_1 \simeq G_2 \Rightarrow rad(G_1) = rad(G_2)$.

Інваріант 5. $G_1 \simeq G_2 \Rightarrow diam(G_1) = diam(G_2)$.

Вже на цьому етапі, якщо виявиться, що $(G_1) = (G_2)$, можна спробувати

відшукати перестановку ізоморфізму перебираючи не всі n! перестановок, а лише $n_1! \times n_2! \times n_3! \times\ldots \times n_k!$, де k– максимальний ексцентриситет вершини. Тобто можна окремо переставляти між собою вершини з ексцентриситетом 1, з ексцентриситетом 2 і т. д. Це суттєво зменшить кількість обчислювань. Наприклад, для графа з n = 50 пряме перебирання дає $50! \approx 3{,}04 \times 10^{64}$ перестановок.

Як і у випадку з вектором ексцентриситетів, вектор ступенів вершин також

можна використовувати для зменшення кількості перестановок,які треба перебирати. Тобто можна окремо переставляти вершини ступеня 1,окремо ступеня 2 і т.д.

Наступний інваріант. Обчислимо відстань від кожної вершини v_i до кожної іншої v_j:$d(v_i, v_j)$,а потім знайдемо їхню суму,яка називається індексом Вінера (Wiener index):

$$W(G) = \sum_{\forall i,\, j} d(v_i,\, v_j)\,.$$

Якщо графи ізоморфні,то між множинами відстаней (як і між множинами вершин) існує бієкція.Як наслідок,сума відстаней не змінюється.

Інваріант 6.$G_1 \simeq G_2 \Rightarrow W(G_1)=W(G_2)$.

Наступний інваріант–це хроматичне число $x(G)$, або кількість кольорів у

мінімальній правильній розфарбовці .

Інваріант 7.$G_1 \simeq G_2 \Rightarrow x(G_1)=x(G_2)$.

Індекс Рандіча:

Зі ступенями вершин пов’язаний ще один інваріант: індекс Рандича (Randiˇ cindex), який використовується в математичній хімії та хемоінформатиці.

$$r(G) = \sum_{\forall e_{ij} \in E} \frac{1}{\sqrt{\deg(v_i)\deg(v_j)}}.$$

Як бачимо, задача перевірки графів на ізоморфізм є досить складною.