

# Глава 1

## Графы и их инварианты

### 1.1 Определения

**Определение 1** Граф, или неориентированный граф  $G$  — это упорядоченная пара  $G := (V, E)$ , где  $V$  — это непустое множество вершин или узлов, а  $E$  — множество пар (в случае неориентированного графа — неупорядоченных) вершин, называемых рёбрами.

**Определение 2** Ориентированный граф (сокращённо орграф)  $G$  — это упорядоченная пара  $G := (V, A)$ , где  $V$  — непустое множество вершин или узлов, и  $A$  — множество (упорядоченных) пар различных вершин, называемых дугами или ориентированными рёбрами.

**Определение 3** Инвариант графа в теории графов — некоторое обычно числовое значение или упорядоченный набор значений (хэш-функция), характеризующее структуру графа  $G = \langle A, V \rangle$  и не зависящее от способа обозначения вершин или графического изображения графа. Игрет важную роль при проверке изоморфизма графов, а также в задачах компьютерной химии.

### 1.2 Примеры инвариантов

К инвариантам графа относятся:

- ◇ Диаметр графа  $\text{diam}(G)$  — длина кратчайшего пути (расстояние) между парой наиболее удалённых вершин.
- ◇ Инвариант Колен де Вердьера.
- ◇ Индекс Винера — величина  $w = \sum_{i,j} d(v_i, v_j)$ , где  $d(v_i, v_j)$  — минимальное расстояние между вершинами  $v_i$  и  $v_j$ .
- ◇ Индекс Рандича — величина  $r = \sum_{(v_i, v_j) \in V} \frac{1}{\sqrt{d(v_i)d(v_j)}}$ .
- ◇ Индекс Хосойи — число паросочетаний рёбер графа плюс единица.
- ◇ Мини-  $\mu_{\min}(G)$  и макси-код  $\mu_{\max}(G)$  матрицы смежности, получаемые путём выписывания двоичных значений матрицы смежности в строчку с последующим переводом полученного двоичного числа в десятичную форму. Мини-коду соответствует такой порядок следования строк и столбцов, при котором полученное значение является минимально возможным; макси-коду — соответственно максимальным.
- ◇ Минимальное число вершин, которое необходимо удалить для получения несвязного графа.

- ◇ Минимальное число ребер, которое необходимо удалить для получения несвязного графа.
- ◇ Минимальное число вершин, необходимое для покрытия ребер.
- ◇ Минимальное число ребер, необходимое для покрытия вершин.
- ◇ Неплотность графа  $\epsilon(G)$  — число вершин максимального по включению безреберного подграфа (наибольшее количество попарно несмежных вершин). Несложно заметить, что  $\varphi(G) = \epsilon(\overline{G})$  и  $\epsilon(G) = \varphi(\overline{G})$ .
- ◇ Обхват графа — число ребер в составе минимального цикла.
- ◇ Определитель матрицы смежности.
- ◇ Плотность графа  $\varphi(G)$  — число вершин максимальной по включению клики.
- ◇ Упорядоченный по возрастанию или убыванию вектор степеней вершин  $s(G) = (d(v_1), d(v_2), \dots, d(v_n))$  — при использовании переборных алгоритмов определения изоморфизма графов в качестве предположительно-изоморфных пар вершин выбираются вершины с совпадающими степенями, что способствует снижению трудоемкости перебора. Использование данного инварианта для  $k$ -однородных графов не приводит к снижению вычислительной сложности перебора, так как степени всех вершин подобного графа совпадают:  $s(G) = (k, k, \dots, k)$ .
- ◇ Упорядоченный по возрастанию или убыванию вектор собственных чисел матрицы смежности графа (спектр графа). Сама по себе матрица смежности не является инвариантом, так как при смене нумерации вершин она претерпевает перестановку строк и столбцов.
- ◇ Число вершин  $n(G) = |A|$  и число дуг/ребер  $m(G) = |V|$ .
- ◇ Число компонент связности графа  $\kappa(G)$ .
- ◇ Число Хардвигера  $\eta(G)$ .
- ◇ Характеристический многочлен матрицы смежности.
- ◇ Хроматическое число  $\chi(G)$ .