Матрица плана эксперимента состоит из значений фазы обобщенных функций Радемахера (2-й и 4-й столбцы матрицы F) и с точностью до постоянного множителя равна

Номер эксперимента	Независимые переменные x_1	x_2
0	0	0
1	1	0
2	—1	0
3	0	1
4	1	1
5	—1	1
6	0	—1
7	1	—1
8	—1	—1

ВЫВОДЫ

Предложен метод построения ортогонального плана многофакторного эксперимента при произвольном числе m уровней квантования каждого фактора. План обеспечивает ортогональность матрицы при подборе регрессионных моделей, число членов которых $K \leqslant m^q$, где q — число независимых факторов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. М., «Мир», 1973.
2. Худсон Д. Статистика для физиков. М., «Мир», 1970.
3. Налимов В. В., Голикова Т. И. Логические основания планирования эксперимента. М., «Металлургия», 1976.
4. Трахтман А. М., Трахтман В. А. Основы теории дискретных сигналов на конечных интервалах. М., «Сов. радио», 1975.

Поступила в редакцию 10 мая 1977 г.

УДК 519.1

Ю. П. ДРОБЫШЕВ, Э. М. СОКОЛОВА, С. П. СОКОЛОВ
(Новосибирск)

О СИНТЕЗЕ НЕИЗОМОРФНЫХ МУЛЬТИГРАФОВ

Рассматривается задача синтеза полного множества неизоморфных связных мультиграфов на конечном множестве именованных вершин с заданными степенями. Подобная задача возникает, в частности, в органической химии при построении возможных структурных формул по заданному набору структурных фрагментов. Прямое решение этой задачи путем построения всех возможных мультиграфов и последующего устранения изоморфных [1, 2] и несвязных требует больших затрат машинного времени и памяти, что сильно ограничивает размерность решаемой задачи. Известно [3], что решение задачи изоморфизма графов и более общей проблемы изоморфного вхождения для наиболее интересных случаев не может быть получено существенно проще, чем методом полного перебора. Поэтому повышение эффективности алгоритмов построения структурных формул требует специальной организации процесса перебора [4, 5].

В данной работе предлагается последовательный процесс формирования мультиграфов, при котором на каждом шаге оценивается возможность связного и неизоморфного продолжения построенного подграфа. Неизоморфная продолжимость оценивается на основе условия каноничности матрицы, описывающей мультиграф. Причем проверка на каноничность осуществляется в два этапа: на первом (менее трудоемком) исключается большая часть графов, не удовлетворяющих достаточно простым признакам каноничности, а на втором детально исследуются лишь графы, прошедшие первый этап. Процесс формирования множества мультиграфов упорядочен так, что отклоняемый по условию связности или каноничности подграф подвергается корректировке и процесс продолжается дальше на основе уже полученной подструктуры.

Теоретическая основа метода. Мультиграф описывается матрицей A соседства вершин [3], $A=CC^T$, где C — матрица инциденций. Графу с n вершинами соответствует $n!$ матриц соседства (по числу нумераций n вершин), т. е. множества графов и матриц соседства находятся в отношении изоморфизма. При фиксированной нумерации вершин эти множества изоморфны. В последнем случае матрица соседства однозначно задает граф.

Для несвязного графа матрица соседства может быть приведена к клеточному виду

$$A=\left[\begin{array}{c|c} A_1 & 0 \\ \hline 0 & A_2 \end{array}\right].$$

Отсюда вытекает матричный критерий связности: граф связан, если никакая перестановка строк и столбцов матрицы A не приводит A к клеточному виду. Справедливо и обратное утверждение: матрица несвязного графа имеет клеточную структуру.

Множество матриц соседства может быть лексикографически полностью упорядочено, если ввести полную упорядоченность на множестве векторов (строк матрицы).

Пусть $R=(r_1, r_2, \ldots, r_n)$ и $S=(s_1, s_2, \ldots, s_n)$ — два вектора. Тогда

$$R>S \leftrightarrow \exists i\leqslant n \mid (r_i>s_i)\&(\forall k\ k<i\longrightarrow r_k=s_k). \qquad (1)$$

Выражение (1) определяет полный порядок. Действительно,

$$\{^-(R>S)\}\&\{^-(S>R)\}\longrightarrow S\equiv R,$$

т. е. если не имеет место ни одно из отношений $R>S$ и $S>R$, то R и S совпадают покомпонентно.

Пусть теперь A и B — две матрицы, у которых множества строк упорядочены в соответствии с (1). Тогда

$$A>B\leftrightarrow \exists i\leqslant n\mid \{R_i(A)>R_i(B)\}\&\{\forall k\ k<i\longrightarrow R_k(A)=R_k(B)\}, \qquad (2)$$

где $R_i(A)$ и $R_i(B)$—i-е строки матриц A и B.

Выражение (2) задает полный порядок на множестве матриц. В множестве всех вершин v_0 выделим подмножества одноименных вершин

$$M_k,\ M_k\subseteq v_0,\ \bigcup_k M_k=v_0.$$

Это индуцирует соответствующее разбиение на подмножества M_k всех столбцов и строк матрицы соседства вершин. Изоморфные мультиграфы образуются тогда и только тогда, если

$$\exists k \; N[M_k] > 1,$$

где $N[M_k]$ — мощность множества M_k, и составляют класс эквивалентности.

Канонической матрицей будем называть наибольшую (наименьшую) матрицу соседства вершин из матриц класса эквивалентности. Отсюда и из выражения (2) вытекает необходимое условие каноничности матрицы: в канонической матрице для каждого M_k строки образуют невозрастающую (неубывающую) последовательность. Действительно, если это условие не выполнено, то существует перестановка строк (и соответственно столбцов), приводящая к возрастанию (убыванию) матрицы.

Итак, множество связных неизоморфных мультиграфов состоит из представителей классов эквивалентности (по одному от каждого класса), описываемых каноническими матрицами.

При машинной реализации алгоритма синтеза вершины нумеруются. Подмножества M_k могут быть частично упорядочены по степеням входящих в них элементов или по их мощности при равенстве этих степеней:

$$\forall M_k M_j \in L \quad M_k > M_j \leftrightarrow (W[M_k] > W[M_j]) \cup (\{W[M_k] = \\ = W[M_j]\} \& (N[M_k] > N[M_j])).$$

На этом множестве вводится нумерация Π_0:

$$M_k > M_j \rightarrow n[M_k] > n[M_j]. \qquad (3)$$

Здесь $W[E]$ и $N[E]$ — степень вершин и мощность подмножества E, а $n[E]$ — номер E. Внутри каждого подмножества M_k нумерация элементов произвольная. Таким образом, введенный порядок является частичным. В этом порядке не различаются подмножества одинаковой мощности и степени вершин. Аналогичным образом может быть введен частичный порядок на заданном множестве вершин:

$$v_0 = \{v_i\}_1^{N_0} : \forall v_1, v_2 \in v_0 \quad v_1 > v_2 \leftrightarrow (W[v_1] > \\ > W[v_2]) \cup ((W[v_1] = W[v_2]) \& (T[v_1] > T[v_2])),$$

где $T[v_k] = M$ означает, что вершина v_k в соответствии с разбиением T относится к подмножеству M, а $W[v_k]$ — степень вершины v_k. Если на множестве вершин проведена нумерация m_0:

$$\begin{cases} v_i > v_j \rightarrow n[v_i] > n[v_j]; \\ n[T[v_i]] > n[T[v_j]] \rightarrow n[v_i] > n[v_j], \end{cases} \qquad (4)$$

то число нумераций множества вершин при фиксированной нумерации подмножеств M_k равно $P_0 = \prod_k N[M_k]!$ Число же возможных нумераций множества L подмножеств M_k, удовлетворяющих нумерации (3), равно

$$P_1 = \prod_j m_j!$$

Здесь m_j — число неразличимых M_k.

Итак, общее число нумераций вершин с соблюдением условий (3) и (4) будет равно $P = P_0 P_1$.

Формализация задачи. Пусть задано множество мощности N_0 именованных вершин v_0 с заданными степенями и его разбиение T на подмножества M_k.

Требуется построить множество матриц соседства вершин $A_l = \{a_{ij}\}$ порядка N_0, удовлетворяющих условиям:

$$\sum^{N_0} a_{ij}^{(l)} = W[v_j], \quad \sum_j^{N_0} a_{ij}^{(l)} = W[v_i]; \tag{5}$$

$$A_l \in F \wedge G, \tag{6}$$

где F — множество матриц, не приводящихся к клеточному виду, а G — множество канонических матриц.

Алгоритм. Для синтеза неизоморфных связных мультиграфов используется метод направленного перебора с пошаговым (по строкам) формированием матриц соседства и проверкой условий связности и каноничности на каждом шаге, что позволяет значительно снизить число анализируемых матриц. Перед описанием алгоритма целесообразно ввести ряд понятий. Алгоритм состоит в последовательном формировании лексикографически упорядоченных строк и матриц. Для определенности в дальнейшем излагается процесс синтеза от больших строк и матриц к меньшим. Изменение строк в процессе их формирования производится поэлементно с конца.

Формирующуюся строку будем называть текущей строкой. Часть столбца, находящегося над текущей строкой, будем называть текущим столбцом.

Формируемый мультиграф может состоять на каждом шаге из нескольких компонент связности, каждой из которых соответствуют подмножества связанных строк матрицы. Эти подмножества будем называть текущими компонентами связности матрицы. В описываемом алгоритме проверка на связность выполняется не через приведение матрицы соседства к клеточному виду, хотя ее смысл остается прежним. Вводятся разности α и β_i между суммой степеней заданных множеств вершин и удвоенным числом использованных ребер, причем α вычисляется для всей матрицы в целом, а β_i — для текущих компонент связности графа. Величины α и β_i сравниваются с нулем на каждом шаге. Если при этом одна из разностей β_i обращается в нуль при $\alpha \neq 0$, то эта строка корректируется. На последнем шаге остается только одна компонента связности $(i=1)$ и β_1 обращается в нуль одновременно с α.

Проверка на каноничность проводится следующим образом. Во-первых, проверяется выполнение необходимого условия каноничности. Пусть формируется строка l_p. Рассмотрим текущие столбцы $t_s^{(p)} \in M_k$, $s=1, 2, \ldots, m$. Если среди них $t_q^{(p)}$, $q=1, 2, \ldots$, одинаковые, то элементы a_{pq} строки l_p должны следовать в невозрастающем порядке. Для неодинаковых текущих столбцов ведется обычное сравнение строк. Во-вторых, проверяется выполнение достаточного условия каноничности в два этапа. На первом этапе проверяется условие $l_1^{(k)} \geqslant l_j^{(k)}$, $l_1^{(k)}$, $l_j^{(k)} \in M_k$, $j \neq 1$. Для этого все l_j максимизируются путем всевозможных перестановок столбцов, принадлежащих M_k, и сравниваются с $l_1^{(k)}$. Если условие не выполняется для некоторых j, то происходит коррекция этих строк. На втором этапе происходит детальное сравнение текущей матрицы и производных от нее.

Итак, приходим к следующему алгоритму:

1. Упорядочиваются подмножества M_k.
2. Выполняется нумерация вершин v_0.
3. Формируется 1-я строка матрицы A.

4. Вычисляется β_1 для компоненты связности, включающей в себя 1-ю вершину:

$$\beta_1 = \sum_{i \in I_1} W_i - 2 \sum_{k, l \in I_1} \delta_{kl},$$

где I — подмножество вершин, составляющих 1-ю компоненту связности; δ_{kl} — кратность ребра, инцидентного k-й и l-й вершинам; W_i — степень i-й вершины.

5. Вычисляется величина

$$\alpha = \sum_{i=1}^{N_2} W_i - 2 \sum_{k, l \in j} \delta_{kl}$$

на первом шаге $J = I_1$.

6. Проверяется условие $\beta_1 > 0$. При $\beta > 0$ выполняется п. 7. Если $\beta_1 = 0$, то изменяется последний элемент 1-й строки.

7. Определяется принадлежность $l_p \in M_k$ при условии $l_{p-1} \in M_k$ для $p = 2, 3, \ldots, m$.

8. Формируется строка l_p, $p = 2, 3, \ldots, m$, при условии, что если среди $t_s^{(p)} \in M_k$ найдутся одинаковые $t_q^{(p)}$, то элементы строки a_{pq} упорядочены, т. е. $a_{p1} \geqslant a_{p2} \geqslant a_{p3} \geqslant \ldots$ Если в п. 7 ответ положителен, то выполняется п. 9. В противном случае — сразу п. 10 и 11.

9. Проверяется необходимое условие каноничности. Сравнивается l_p и l_{p-1}. Если $l_p \leqslant l_{p-1}$, то переходим к следующему элементу текущей строки l_p. Если $l_p > l_{p-1}$, то корректируем изменяемый элемент из l_p.

10. Вычисляются величины β_i и α:

$$\beta_i = \sum_{j \in I_i} W_j - 2 \sum_{k, l \in I_i} \delta_{kl},$$

где I_i — подмножество вершин, составляющих i-ю текущую компоненту связности. Если $\beta_i = 0$ для какого-либо i, а $\alpha \neq 0$, то выполняется корректировка последнего элемента строки l_p.

11. Первый этап проверки достаточного условия каноничности. Проверяется принадлежность $l_p^{(k)} \in M_1$. Если это имеет место, то $l_p^{(1)}$ путем всевозможных перестановок столбцов из M_1 максимизируется и проверяется условие $l_{p\max}^{(1)} \leqslant l_1^{(1)}$. При его выполнении переходим к формированию l_{p+1}, причем если $l_{p\max}^{(1)} = l_1^{(1)}$, то $l_{p\max}^{(1)}$ запоминается. Если $l_{p\max}^{(1)} > l_1^{(1)}$, то $l_p^{(1)}$ корректируется. Аналогично проверяется $l_p^{(k)} \in M_k$. Все законченные строки упорядочиваются и образуют множество G.

Примечание. Проверка условий $l_{p\max}^{(k)} \leqslant l_1^{(k)}$, $k = 2, 3 \ldots$, необходима только в том случае, если до этого не установлено отношение порядка строк $l_{p\max}^{(k)}$ и $l_1^{(k)}$.

12. Второй этап проверки достаточного условия. Сформированная в результате предыдущих шагов подматрица Y последовательно сравнивается с подматрицами Y_k, полученными из Y путем следующих операций.

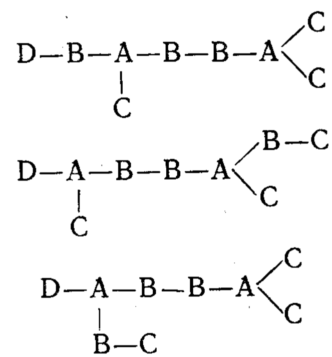
В качестве 1-й строки в Y_k берется k-я строка из G. В качестве ν-й строки в Y_k, обозначаемой $l_\nu(Y_k)$, $\nu = 2, 3, \ldots$, берем строку, полученную транспонированием столбца с максимальным элементом в $l_{\nu-1}(Y_k)$. Формирование строки $l_\nu(Y_k)$ выполняется только в случае равенства $l_{\nu-1}(Y_k) = l_{\nu-1}(Y)$.

Перед сравнением $l_\nu(Y_k)$ и $l_k(Y)$, $\nu = 2, 3, \ldots$, строка $l_\nu(Y_k)$ должна быть максимизирована при условии постоянства $l_s(Y_k)$, $s = 1, 2, 3, \ldots, (\nu - 1)$. Если $l_\nu(Y_k) < l_\nu(Y)$, то переходим к сравнению матриц Y и путем корректировки формируется очередная матрица Y' *.

Результаты. Описанный алгоритм был реализован на языке α—6 для БЭСМ-6 и проверен на ряде задач.

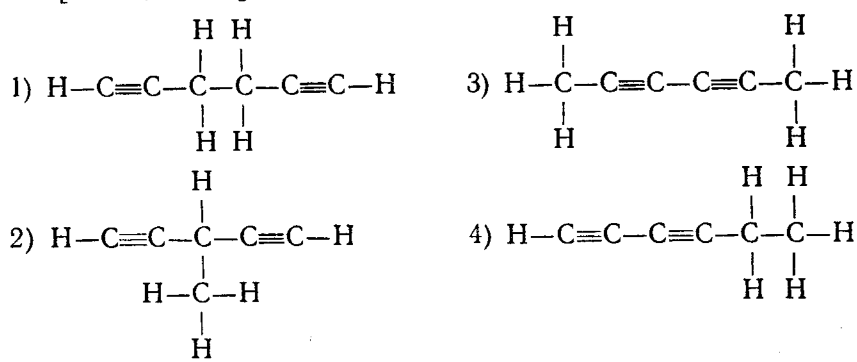
Поскольку уже при небольшом числе вершин количество построенных мультиграфов может оказаться значительным, для практической работы с программой целесообразно выделить из полного множества мультиграфов интересующие исследователя классы. Проще всего класс характеризовать обязательным присутствием задаваемого подграфа, но возможны и другие ограничения на класс, например, число связей заданного типа и т. п. Это позволяет получить множество неизоморфных мультиграфов по частям. Ниже даны примеры работы программы, в которых вершина задается именем (в данном случае буквой) и степенью. Перед именем ставится цифра, обозначающая количество одноименных вершин. Так, код 4*R*3 обозначает 4 вершины имени *R* со степенью 3.

Пример 1. Дано v_0:2А3, 3В2, 3С1, 1Д1. Все возможные неизоморфные мультиграфы могут быть разбиты на 4 класса, характеризуемые соответственно подграфами [А—А], [А—В—А], [А—В—В—А], [А—В—В—В—А]. Всего получено 22 мультиграфа — соответственно по классам: 11, 7, 3 и 1. Например, для класса 3 были получены следующие мультиграфы:

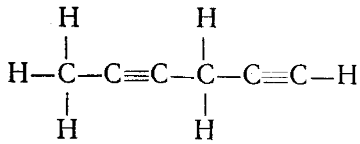


Время решения на БЭСМ-6 равно 5 с.

Пример 2. v_0 : 6С4, 6Н1. Всего было получено 217 мультиграфов. Время решения 35 с. В классе с подграфом [С≡С] — 53 объекта, а в классе [С≡С, С≡С] было 5 следующих мультиграфов:



* Другой алгоритм канонизации матриц на основе лексикографического порядка приведен в [6].

5) 

Пример 3. v_0:6C4, 3H1, 1A1, 1B1, 1D1. Построено около 6680 мультиграфов за время менее 10 мин.

ЛИТЕРАТУРА

1. Разников В. В. Автоматическое построение полного набора структурных формул изомеров соединения определенного элементарного состава молекул и веса.— «Структурная химия», 1970, т. 11, № 2, с. 357—360.
2. Горфинкель М. И., Дробышев Ю. П., Ильина Л. Е., Нехорошев С. А., Коптюг В. А. Построение полного набора возможных структурных формул для исследуемого соединения по заданному набору фрагментов с помощью ЭВМ.— «Тезисы Конференции по автоматизации научных исследований на основе применения ЭЦВМ. Вычислительные комплексы, обслуживающие научный эксперимент». Новосибирск, изд. ИАиЭ СО АН СССР, 1972.
3. Зыков А. А. Теория конечных графов. Новосибирск, «Наука», 1969.
4. Dubois J.-E. Ordered chromatic graph and limited environment concept (chapter of "Chemical Applications of graph theory". London, Academic Press, 1976).
5. Нехорошев С. А., Коптюг В. А. Построение полного набора возможных структурных формул исследуемого соединения по заданному набору фрагментов с помощью ЭВМ.— «Изв. СО АН СССР. Сер. химическая», 1975, вып. 6, с. 66—71.
6. Арлазаров В. М., Зуев П. П., Усков А. В., Фараджев И. А. Алгоритм приведения конечных неориентированных графов к каноническому виду.— «Журн. ВМ и МФ», 1974, т. 14, № 3, с. 737—743.

Поступила в редакцию 27 июня 1976 г.

УДК 681.3 : 519.2

И. С. МИКАДЗЕ

(Тбилиси)

ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ ДВУХМАШИННОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ТИПА С УЧЕТОМ ЕЕ НАДЕЖНОСТИ

Рассмотрим вычислительную систему (ВС) параллельного типа, состоящую из двух самостоятельных вычислительных машин (ВМ) и решающую одну большую задачу. Необходимость решения задач большого объема, как известно [1], исключительно велика. К таким задачам относятся, например, решение динамической системы для предсказания погоды, нахождение сбалансированной экономики, проблемы газодинамики и т. д. Объединение ВМ в единую систему особенно эффективно при решении информационно-поисковых задач и задач управления промышленными и научными объектами. При этом повышается надежность решения и уменьшается время его реализации.

Данная работа посвящена определению вероятностной характеристики производительности ВС параллельного типа, состоящей из двух независимых идентичных ВМ с учетом их надежности. Предполагается, что объем вычислений, необходимый для решения заданной большой задачи, является случайной величиной; программа решения разбита на