*Boletin de Matematicas*
*Vol. XVIII N° 1,2,3, (1984)* **APORTES**

# UNA FORMULACION EQUIVALENTE DEL PROBLEMA DE ISOMORFISMO DE GRAFOS

*Osvaldo Skliar,*
*Victor Medina,*
*Tatiana Láscaris.*

El problema de encontrar un invariante que caracterice el conjunto de grafos isomorfos a un grafo dado, es un problema clásico en teoría de grafos. No se conoce un conjunto completo de invariantes para un grafo [1,p.11]. En esta nota presentamos, de manera intuitiva, una solución de este problema.

Un grafo dirigido es una tripla $G = (V;E;\varphi)$ donde $V$ y $E$ son conjuntos finitos y $\varphi$ es una función uno a uno que hace corresponder a cada elemento de $E$ una pareja ordenada de elementos de  Geométricamente, $E$ es el conjunto de lados (flechas), $V$ es el conjunto de vértices (nodos) y la aplicación $\varphi$ asigna a cada lado sus vértices de acuerdo con la orientación del lado. Para el grafo dirigido de la Figura 1, tenemos:

$V = \{1,2,3,4,5\}$, $E = \{a,b,c,d,e,f,g,h,i\}$,

$\varphi(a) = (1,2)$, $\varphi(b) = (2,1)$, $\varphi(c) = (2,2)$,

$\varphi(d) = (3,2)$, $\varphi(e) = (2,4)$, $\varphi(f) = (3,4)$,

$\varphi(g) = (5,3)$, $\varphi(h) = (3,5)$, $\varphi(i) = (5,5)$.

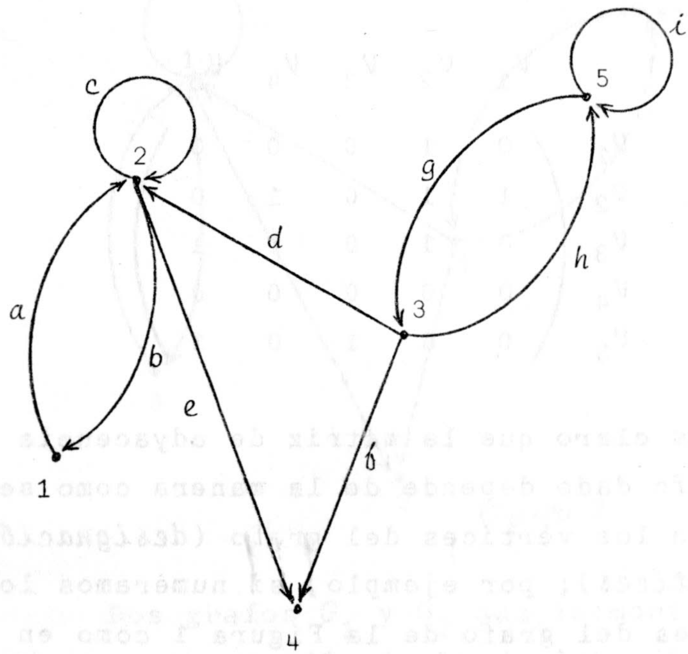


*Figura 1*

Un grafo $G$ puede también representarse por medio de una matriz, llamada *matriz de ad yacencia*. Para obtener esta matriz numeramos los vértices del grafo empezando en 1. Si $V = \{1,2,\ldots,n\}$, definimos

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{si existe una flecha que va del vértice } i \text{ al vértice } j. \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

La matriz de adyacencia correspondiente al grafo de la Figura 1 es

$$\begin{array}{c} \\ V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} V_1 & V_2 & V_3 & V_4 & V_5 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \qquad (1)$$

Es claro que la matriz de adyacencia de un grafo dado depende de la manera como se numeren los vértices del grafo (*designación de vértices*); por ejemplo, si numeramos los vértices del grafo de la Figura 1 como en la Figura 2, obtenemos la siguiente matriz de ad yacencia:

$$\begin{array}{c} \\ V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} V_1 & V_2 & V_3 & V_4 & V_5 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \qquad (2)$$

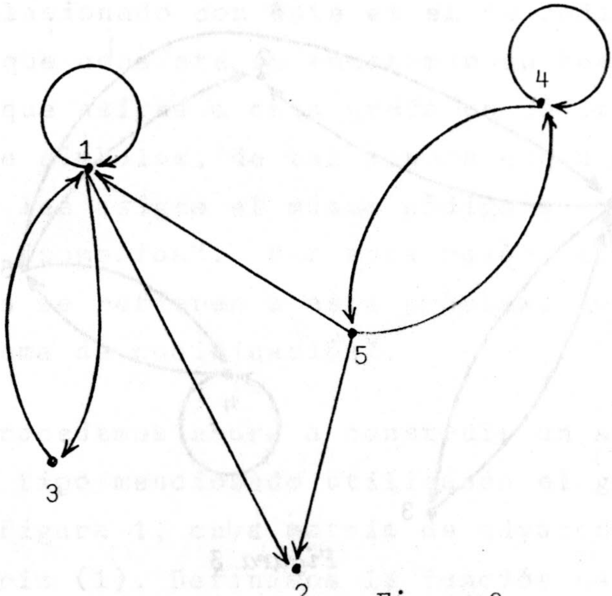


*Figura 2*

Dos grafos $G_1$ y $G_2$ son isomorfos si exis te una permutación de la designación de vérti ces de uno de ellos tal qué, cuando renumeramos sus vértices de acuerdo con esta permutación, su nueva matriz de adyacencia coincide con la matriz de adyacencia del otro grafo. Por ejemplo, los grafos $G_1$ y $G_3$ de las Figuras 1 y 3 respectivamente, cuyas matrices de adyacencia son las matrices (1) y (2), son isomorfos. En efecto, si redesignamos los vértices de $G_1$ de acuerdo con la permutación $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 5 & 2 & 4 \end{pmatrix}$, entonces su matriz de adyacencia es (2).

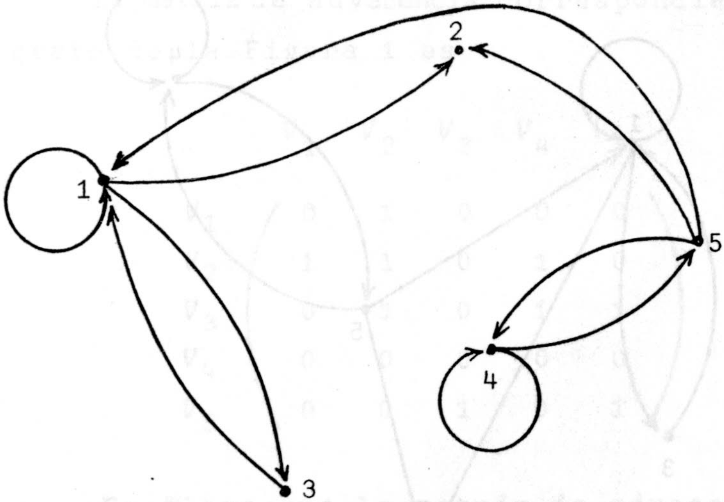


*Figura 3*

El problema que estamos estudiando puede reformularse como sigue: se trata de encontrar un algoritmo por medio del cual podamos obtener, para cualquier grafo dado, una entidad (el *invariante*) que permanece constante cuando se hacen variaciones en la designación de vértices del grafo. En otras palabras, dado un par de grafos, un tal algoritmo asigna a ambos grafos el mismo invariante si y sólo si los dos grafos son isomorfos.

Read y Corneil [2] enunciaron el problema de la siguiente manera: "se trata de encontrar un buen algoritmo para determinar cuándo dos grafos dados son isomorfos. Un problema muy relacionado con éste es el de codificación, que consiste en encontrar un buen algoritmo que asigne a cada grafo un código o cadena de símbolos, de tal manera que a dos grafos se les asigna el mismo código si y sólo si son isomorfos". Por esta razón, algunos autores se refieren a este problema como el "problema de codificación".

Procedemos ahora a construír un algoritmo del tipo mencionado utilizando el grafo $G_1$ de la Figura 1, cuya matriz de adyacencia es la matriz (1). Definimos la función característica del grafo $G_1$ como sigue: asignamos a los vértices 1,2,3,4 y 5 las variables reales $X_1, X_2, X_3, X_4$ y $X_5$, respectivamente; si la $i$-ésima fila de (1) tiene unos en las columnas $j_1, \ldots, j_r$ asignamos a esta fila la función $X_i^{X_{j_1} \cdot X_{j_2} \cdot \ldots \cdot X_{j_r}}$. En nuestro caso, a la primera fila de la matriz (1) le corresponde la función $X_1^{X_2}$; a la segunda fila le corresponde $X_2^{X_1 X_2 X_4}$; a la tercera $X_3^{X_2 X_4 X_5}$ y a la quinta $X_5^{X_3 X_5}$. En el caso en que una fila carezca de unos, como ocurre con la cuarta fila de (1), le asignamos la variable correspondiente con exponente uno: a la cuarta fila le corresponde la función $X_4^1 = X_4$.

La función característica del grafo *G* es el producto de las funciones asignadas a cada una de las filas de su matriz de adyacencia. Para el grafo $G_1$ es

$$X_1^{X_2} \cdot X_2^{X_1 X_2 X_4} \cdot X_3^{X_2 X_4 X_5} \cdot X_4 \cdot X_5^{X_3 X_5}$$

Finalmente exigimos que nuestras variables satisfagan la siguiente condición:

$$\begin{aligned} &(X_1-2)^2 \cdot (X_2-2)^2 \cdot (X_3-2)^2 \cdot (X_4-2)^2 \cdot (X_5-2)^2 \\ &+ (X_1-3)^2 \cdot (X_2-3)^2 \cdot (X_3-3)^2 \cdot (X_4-3)^2 \cdot (X_5-3)^2 \\ &+ (X_1-5)^2 \cdot (X_2-5)^2 \cdot (X_3-5)^2 \cdot (X_4-5)^2 \cdot (X_5-5)^2 \\ &+ (X_1-7)^2 \cdot (X_2-7)^2 \cdot (X_3-7)^2 \cdot (X_4-7)^2 \cdot (X_5-7)^2 \\ &+ (X_1-11)^2 \cdot (X_2-11)^2 \cdot (X_3-11)^2 \cdot (X_4-11)^2 \cdot (X_5-11)^2 \\ &= 0. \qquad (3) \end{aligned}$$

También podríamos considerar el conjunto $\chi = \{X_1, X_2, X_3, X_4, X_5\}$ como un subconjunto de los números naturales y en este caso la condición (3) vendría dada por

$$X_1 X_2 X_3 X_4 X_5 - 2 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11 = 0 \qquad (4)$$

Es fácil ver que el hecho esencial consiste en que las variables toman valores en el conjunto de los números primos y que variables diferentes deben tomar valores diferentes.

La función característica de un grafo dirigido con $n$ vértices puede escribirse en forma general así:

$$C_G = \prod_{i=1}^{n} X_i^{\left(\prod_{j=1}^{n} X_j^{a_{ij}}\right)}$$

donde $a_{ij}$ es el elemento $(i,j)$ de la matriz de adyacencia.

Cuando consideramos $\chi = \{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ como un subconjunto de los reales la restricción se expresa por la condición

$$\sum_{p \in \phi} \prod_{j=1}^{n} (X_j - p)^2 = 0$$

donde $\Phi = \{2,3,\ldots,p_n\}$ es el conjunto de los primeros $n$ números primos. Si $X$ se considera como un subconjunto de los números naturales la condición se transforma en:

$$\prod_{j=1}^{n} X_j - \prod_{p\in\phi} p = 0.$$

El invariante que estamos buscando es el máximo de la función característica sujeta a la correspondiente restricción. La demostración de esta invarianza se explica en [3], pero es tan directa y sencilla que el lector puede hacerla por sí mismo. En nuestro ejemplo, este invariante es

$$\text{Max } C_{G_1} = \text{Max } X_1^{X_2} \cdot X_2^{X_1X_2X_3} \cdot X_3^{X_2X_4X_5} \cdot X_4 \cdot X_5^{X_3X_5}$$

con la condición (3) si las variables toman valores reales o con la condición (4) si toman valores en el conjunto de los números naturales.

Para el grafo $G_2$ obtenemos como invariante

$$\text{Max } C_{G_2} = \text{Max } X_1^{X_1X_2X_3} \cdot X_2 \cdot X_3^{X_1} \cdot X_4^{X_4X_5} \cdot X_5^{X_1X_2X_4}$$

con la condición (3) o con la condición (4);

como se señaló antes, Max $C_{G_1}$ = Max $C_{G_2}$.

Resumiendo, los máximos de las funciones características de dos grafos coinciden si y sólo si los grafos correspondientes son isomorfos. Sin embargo este invariante no es el único que caracteriza el conjunto de grafos que son isomorfos a un grafo dado. El mínimo de la función característica es también un invariante en el mismo sentido, lo cual significa que los mínimos de las funciones características de dos grafos dados coinciden si y sólo si los grafos son isomorfos. Es evidente que para un grafo completamente simétrico $G_s$, es decir, para cualquier grafo cuya matriz de adyacencia permanece invariante cuando se hacen permutaciones de la designación de vértices, se cumple que Max $C_{G_s}$ = Min $C_{G_s}$.

La función característica no es la única herramienta que sirve para construir invariantes del conjunto de grafos isomorfos a un grafo dado. Como ejemplo de un método diferente consideremos los $n^2$ elementos de la matriz de adyacencia de un grafo dirigido. Escribámoslos en una fila según un orden previamente establecido en los elementos de la matriz; obtendremos así un número en expresión binaria. Ahora a cada una de las $n!$ per mutaciones de la designación de vértices corresponde un número binario y la correspondencia está bien definida. Este conjunto de $n!$ números tiene un máximo y un mínimo los cuales son invariantes del tipo que estamos buscando.

Siguiendo estas ideas el lector podrá encontrar otros invariantes que caractericen el conjunto de grafos isomorfos a un grafo dado.

Además del interés teórico del problema de encontrar invariantes del tipo mencionado, el cálculo de ellos utilizando un algoritmo ligado a un polinomio , constituiría una manera de resolver el problema de isomorfismo entre grafos, a saber, encontrar un método eficiente para determinar si dos grafos son isomorfos. Trataremos estos problemas en un próximo artículo.

La solución del problema de isomorfismo entre grafos no solo tiene un interés académico sino que también tiene importancia práctica en cuestiones como: **a)** el establecimiento de una nomenclatura unificada en química orgánica, **b)** la aplicabilidad del análisis hecho en ciertos sistemas a otros del mismo tipo (circuitos electrónicos) y **c)** la medida del grado de complejidad de una variedad de sistemas.

Finalmente observamos que los métodos que hemos aplicado a grafos dirigidos pueden extenderse de una manera natural a otras clases de grafos, por ejemplo a los grafos no dirigidos, a los grafos ponderados y a los grafos rotulados. Consideremos por ejemplo el caso de los grafos no dirigidos. Se cambia cada arco que une vértices distintos por un par de flechas dirigidas en direcciones opuestas y se cambia cada arco cerrado por una flecha simple. Obtenemos así un grafo dirigido tal que cualquier invariante (con respecto a la designación de vértices) para este grafo es también un invariante del mismo tipo para el grafo no dirigido. Siguiendo este criterio, el grafo no dirigido de la Figura 4 puede considerarse como el grafo dirigido de la Figura 5. Cuando estamos trabajando en un "universo" de grafos no dirigidos, no hay problema en considerar como invariante de un grafo dado al invariante del correspondiente grafo dirigido.

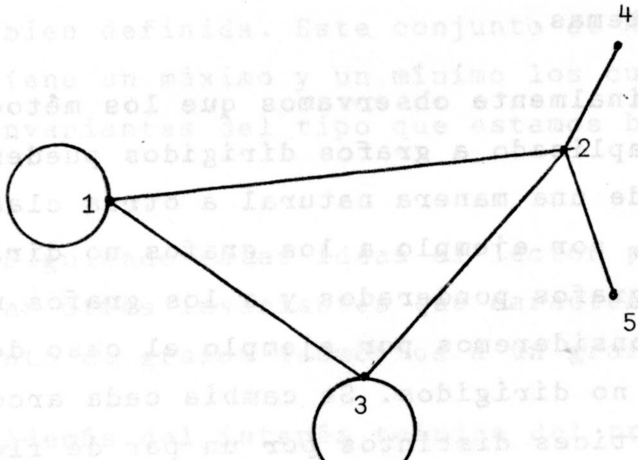


*Figura 4*

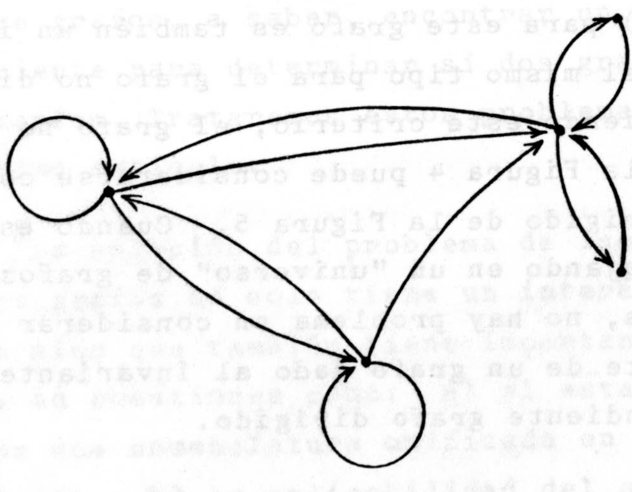

*Figura 5*

## BIBLIOGRAFIA

[1] Harary, F., *Graph Theory*, 1a. edición, Addison Wesley, Reading, Massachussets, 1969.

[2] Read, R.C. and Corneil, D.G., *The Graph Isomorphism Disease*, J. Graph Theory, 1 (1977) 339-363.

[3] Skliar, O. and Haeberer, A.M., *Designación, isomorfismo y complejidad estructural de grafos*, Revista del Instituto de Cibernética de la Sociedad Científica Argentina, 1 (1976) 17-28.

* *

Universidad Nacional
HEREDIA, Costa Rica.