

复杂无向图的同构判定方法

王卓¹ 王成红²

摘要 针对一般复杂无向图的同构判定问题, 给出了基于邻接矩阵之和的特征多项式判定条件; 针对复杂无向连通图的同构判定问题, 给出了基于距离矩阵特征多项式和邻接矩阵特征多项式的同构判定条件, 将该条件用于复杂无向不连通图的各个连通子图, 就可解决复杂无向不连通图的同构判定问题. 上述两个判定条件均是充要条件且当复杂无向图退化为简单无向图时仍然适用.

关键词 复杂无向图, 邻接矩阵, 距离矩阵, 特征多项式, 同构判定条件

引用格式 王卓, 王成红. 复杂无向图的同构判定方法. 自动化学报, 2024, 50(6): 1143–1150

DOI 10.16383/j.aas.c230612

Isomorphism Determination Methods for Complex Undirected Graphs

WANG Zhuo¹ WANG Cheng-Hong²

Abstract For the isomorphism determination problem of general complex undirected graphs, one determination condition based on the characteristic polynomial of the sum of adjacency matrices is proposed. For the isomorphism determination problem of complex undirected connected graphs, another determination condition based on the characteristic polynomials of the distance as well as the adjacency matrices is proposed, which can also be applied to each connected subgraph of the complex undirected unconnected graph, whose isomorphism determination problem can thus be solved. The above two are both necessary and sufficient conditions and still hold true when the complex undirected graphs degenerate into simple undirected graphs.

Key words Complex undirected graphs, adjacency matrix, distance matrix, characteristic polynomials, isomorphism determination conditions

Citation Wang Zhuo, Wang Cheng-Hong. Isomorphism determination methods for complex undirected graphs. *Acta Automatica Sinica*, 2024, 50(6): 1143–1150

图的同构判定在有机化学、计算机科学和人工智能 (机器学习或模式识别中常使用图的邻接矩阵特征值来判定两个对象是否为同一个对象) 等领域有着重要的应用^[1-3]. 上世纪前半叶, 与图同构相关的问题主要围绕图的邻接矩阵特征值及其应用展开^[4], 取得若干重要的理论成果和一批应用成果; 其中一个重要的发现是, 两个互不同构的无向图却具有相同的邻接矩阵特征多项式, 即用邻接矩阵特征多项式判定两个无向图是否同构有时会得出错误的结果^[4].

上世纪 70 年代, Karp 和 Johnson 认为图的同

构判定问题是少数几个既不能归类为 P 问题也不能归类为 NP 的问题^[1, 3]. 此后, 该问题成为理论计算机领域的公开问题并受到广泛重视. 1982 年, Luks 给出一个当时最好的两图同构判定算法, 其时间复杂度是 $\exp(O(\sqrt{n \log n}))$ ^[5-6] (n 为图的顶点数). 此后 40 多年来, 几百篇这方面的文章得以在不同的学术期刊上发表^[1]. 2015 年, Babai^[6] 在 Luks 算法的基础上, 给出两图同构判定问题的拟多项式算法, 其时间复杂度是 $\exp((\log n)^{O(1)})$. Babai 的工作虽然是一个重要进展, 但图的同构判定问题是否在多项式时间内可解仍然悬而未决^[1, 3].

图的同构判定问题的另一研究路径是设计可执行的判定算法, 大致可以分为传统和非传统两类判定算法. 传统判定算法有两类: 1) 针对一些特殊图^[7-8] (如树和极大外平面图) 的同构判定算法 (如 Ullman 算法和 Schmidt 算法等^[9]). 2) 针对一般简单图的同构判定算法, 如一些放在因特网上用于测试两图是否同构的程序 (如 Nauty 和 Saucy 等^[3, 6]). 非传统判定算法也有两类: 1) 基于遗传算法和神经网络的智能判定算法. 这些算法将图的同构判定问

收稿日期 2023-10-03 录用日期 2024-03-15

Manuscript received October 3, 2023; accepted March 15, 2024
广东省重点领域研发计划 (2021B0101410005), 国家自然科学基金 (61673041) 资助

Supported by Key Area Research and Development Program of Guangdong Province (2021B0101410005) and National Natural Science Foundation of China (61673041)

本文责任编辑 秦家虎

Recommended by Associate Editor QIN Jia-Hu

1. 北京航空航天大学仪器科学与光电工程学院 北京 100191 2. 中国自动化学会理事会 北京 100190

1. School of Instrumentation and Optoelectronic Engineering, Beihang University, Beijing 100191 2. Council of Chinese Association of Automation, Beijing 100190

题转化为一类优化求解问题,但其判定结果并不完全可靠. 2) 基于 DNA 计算^[9]和量子计算的判定算法. 这类算法虽然高效,但不能回答图的同构判定是 P 问题还是 NP 问题. 无向连通图的距离矩阵是素矩阵(邻接矩阵一般不是素矩阵),它具有邻接矩阵所没有的独特性质^[10]. 文献[10]揭示了简单无向图同构与距离矩阵同构之间的一般关系,将基于邻接矩阵的同构判定条件推广到距离矩阵,给出几个适合一般简单无向图的同构判定条件. 这些条件均是充要条件且均具有多项式时间复杂度. 上述成果是近年来图同构研究方面的一个重要进展.

简单无向图的同构关系可由其距离矩阵的同构关系确定,但复杂无向图却不能. 其根本原因在于:复杂无向图中的自环和顶点间的重边对顶点间的距离没有影响^[10];换言之,自环数或重边数不同的复杂无向图可能具有完全相同的距离矩阵. 因文献[10]所给的判定条件不能用于复杂无向图,故寻找和发现复杂无向图的同构判定条件既是必须的也是重要的. 本文的主要贡献是: 1) 针对一般复杂无向图的同构判定问题,给出了基于邻接矩阵之和的特征多项式判定条件. 2) 针对复杂无向连通图的同构判定问题,给出了基于距离矩阵特征多项式和邻接矩阵特征多项式的同构判定条件. 将该条件用于复杂无向不连通图的各个连通子图,就可解决复杂无向不连通图的同构判定问题. 上述两个判定条件均是充要条件且均具有多项式时间复杂度. 此外,当复杂无向图退化为简单无向图时,上述两个判定条件仍然适用.

1 相关概念和预备知识

定义 1^[4, 11-12]. 图 G 是一个二元组, 记作 $G = \langle V, E \rangle$, 其中:

1) $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n \mid |V| = n, 1 \leq n < \infty\}$, $v_i \in V$ 称为 G 的顶点, V 称为 G 的顶点集.

2) $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m \mid |E| = m, 0 \leq m < \infty\}$, $e_j \in E$ 称为 G 的边, E 称为 G 的边集.

3) $\forall e_j \in E: e_j$ 为无向边时, 称 G 为无向图, e_j 为有向边时, 称 G 为有向图.

4) 连接同一顶点的边称为自环, 两顶点间的多条无向边或多条方向相同的有向边称为重边. 既无自环也无重边的图称为简单图, 否则称为复杂图.

在现有文献报道的复杂无向图中, 每个顶点最多有一个自环. 若无特别声明, 本文讨论的均是顶点最多有一个自环的复杂无向图.

定义 2^[11-13]. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 是无向图, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. 若 v_i 和 v_j 之间有 k ($k = 0, 1, \dots$) 条边, 令 $a_{ij} = k$; 称由元素 a_{ij} 构成的矩阵 $A(a_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$

为无向图 G 的邻接矩阵.

定义 2 既适合简单无向图也适合复杂无向图 ($a_{ij} \in \{0, 1, 2, \dots\}$). 无向图的邻接矩阵是非负整数对称矩阵.

定义 3^[14]. 设 $I_n \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为单位矩阵, 交换 I_n 的第 i 行和第 j 行 (或第 i 列与第 j 列) 所得的矩阵 $P(i, j)$ 称为对换矩阵, 对换矩阵的乘积称为置换矩阵.

引理 1^[14]. 对换矩阵和置换矩阵具有如下性质:

1) 置换矩阵的乘积仍是置换矩阵;

2) 设 Q 是置换矩阵, 则 $\det(Q) = \pm 1$;

3) 设 Q 是置换矩阵, 则 Q^T 和 Q^{-1} 也是置换矩阵, 且 $Q^T = Q^{-1}$;

4) 置换矩阵是正交矩阵;

5) 置换矩阵是幂幺矩阵, 即若 Q 是置换矩阵, 则 $Q^m = I_n$, m 是某自然数.

由定义 3 和引理 1 可知, 对换矩阵和 I_n 也是置换矩阵.

定义 4^[10]. 设 $A, B \in \mathbf{R}^{n \times n}$, $\Omega \subset \mathbf{R}^{n \times n}$ 为全体 n 阶置换矩阵的集合. 若存在置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A = Q^T B Q$, 则称 A 与 B 同构, 记作 $A \cong B$; 此外, 称 $Q^T B Q$ 是对 B 的同构变换.

图的同构问题可以这样表述: 给定两个图, 当忽略图中顶点标号、顶点间相对位置、边的长短和曲直信息时, 问这两个图是否具有相同的结构?

定义 5^[4, 12-13]. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个图. 若存在一个从 V_1 到 V_2 的一一映射 $g: \forall v_i, v_j \in V_1, v_i$ 至 v_j 有 k 条边, 当且仅当 $g(v_i), g(v_j) \in V_2$, 且 $g(v_i)$ 至 $g(v_j)$ 也有 k 条边, 则称 G_1 和 G_2 同构, 记作 $G_1 \cong G_2$.

定义 5 既适合简单图也适合复杂图 ($k \in \{0, 1, 2, \dots\}$).

引理 2^[10-11]. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个图, $|V_1| = |V_2| = n$, A 与 B 分别是 G_1 和 G_2 的邻接矩阵, 则 $G_1 \cong G_2$ 的充要条件是存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A = Q^T B Q$.

引理 2 适合一切无向和有向图. 由定义 4 和引理 2 可知, 两图同构与该两图的邻接矩阵同构等价.

定义 6^[4, 10-13]. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 是无向图, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$: 1) G 中顶点与边的交替序列 $W = v_1 e_1 v_2 e_2 \dots v_k e_k v_{k+1}$ ($k \leq n-1$) 称为 G 的链, 各边互异的链称为迹, 各顶点互异的链称为路, 当 W 是路时, W 中的边数 k 称为 W 的长度, 记作 $k = |W|$; 2) 设 v_i 和 v_j 是 V 中任意两个顶点, 当 v_i 和 v_j 之间有 s 条路 W_s 时, 称 $d(v_i, v_j) = \min\{k_p = |W_p| \mid 1 \leq p \leq s\}$ 为 v_i 和 v_j 之

间的距离; 若 v_i 和 v_j 之间无路 (G 不连通), 约定 $d(v_i, v_j) = \infty$.

定义 7^[10, 13]. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 是无向图, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, $d_{ij} = d(v_i, v_j)$ 表示顶点 v_i 和 v_j ($1 \leq i, j \leq n$) 之间的距离: 当 $i = j$ 时, 令 $d_{ii} = 0$; 当 $i \neq j$ 且 $d(v_i, v_j) = k$ ($d(v_i, v_j) = \infty$) 时, 令 $d_{ij} = k$ ($d_{ij} = \infty$), 其中 $k \geq 1$ 为正整数, 称由元素 d_{ij} 构成的矩阵 $D(d_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为无向图 G 的距离矩阵.

由定义 6 和定义 7 可知: 1) 复杂无向图中的自环和顶点间的重边对顶点间的距离没有影响; 2) 当 G 是无向连通图时, 距离矩阵 D 是对角线元素均为零而其他元素均为正整数的对称矩阵.

定义 8^[12-13]. 设 $G_n = \langle V, E \rangle$ 是简单无向图, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, $n \geq 2$, 若 $\forall i \neq j, v_i$ 和 v_j 之间恰有一条边, 则称 G_n 为无向完全图, 其邻接矩阵记为 A_n .

由定义 2 和定义 8 可知, A_n 的对角线元素均为 0 而其他元素均为 1. 设 G_n 的距离矩阵为 D_n , 由定义 7 可知, $D_n = A_n$, 即 A_n 既是 G_n 的邻接矩阵又是 G_n 的距离矩阵.

定义 9. 设 $T \subset \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$) 表示全体 n 阶正交矩阵的集合; $\Omega^- = \{-S \mid S \in \Omega\}$ 表示全体 n 阶负置换矩阵的集合; $\Phi = \Omega \cup \Omega^-$ 表示全体 n 阶置换矩阵和全体 n 阶负置换矩阵的并集; $\Theta = T - \Phi$ 表示 T 中除 Φ 之外全体 n 阶正交矩阵的集合.

由定义 9 和正交矩阵的性质可知: $\Theta \cap \Phi = \emptyset$ (\emptyset 为空集), $\Theta \cup \Phi = T$; $\forall Q_1, Q_2 \in \Phi, Q_1 Q_2 \in \Phi$; $\forall Q \in \Phi, \forall P \in \Theta, QP, PQ \in \Theta$; $\forall P \in \Theta, \forall E \in \Phi, \forall Q \in T$ 且 $Q \neq EP^T, QP, PQ \in \Theta$.

2 复杂无向图的同构判定方法

为简便计, $\forall A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$), 本文用 $f_\lambda(A)$ 表示 A 的特征多项式 $\det(\lambda I_n - A)$, 即 $f_\lambda(A) = \det(\lambda I_n - A)$.

推论 1. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个无向图, $|V_1| = |V_2| = n$, A 与 B 分别是 G_1 和 G_2 的邻接矩阵, 若 $f_\lambda(A) \neq f_\lambda(B)$, 则 G_1 和 G_2 不同构.

证明. 设 $f_\lambda(A) \neq f_\lambda(B)$ 时, $G_1 \cong G_2$. 由引理 2 可知, 当 $G_1 \cong G_2$ 时, 存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A = Q^T B Q$. 由此, $f_\lambda(A) = f_\lambda(Q^T B Q) = f_\lambda(B)$, 与假设相矛盾. 故 $f_\lambda(A) \neq f_\lambda(B)$ 时, G_1 和 G_2 不同构. \square

推论 1 既适合简单无向图也适合复杂无向图. 需要强调的是, 即使 $f_\lambda(A) = f_\lambda(B)$, 也不能保证 G_1 和 G_2 同构. 邻接矩阵特征多项式相等仅是两个无向图同构的必要条件^[10, 15].

设 $A(a_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$) 是对称矩阵: 若 a_{ij}

全是正整数, 则称 A 为正整数对称矩阵; 若 a_{ij} 为零或正整数, 则称 A 为非负整数对称矩阵.

引理 3^[10]. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$) 是对角线元素均为 1 而其他元素均为正整数的对称矩阵, 则 $\forall P \in \Theta, P^T A P$ 不是正整数对称矩阵.

引理 4^[14]. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 则 A 为正交矩阵的充要条件是存在正交矩阵 $P \in T$, 使得

$$P^T A P = P^{-1} A P = \begin{bmatrix} I_s & & \\ & -I_t & \\ & & H_\theta \end{bmatrix} = P_\theta$$

其中, I_s 与 I_t 分别是 s 阶和 t 阶单位矩阵,

$$H_\theta = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta_1 & \sin \theta_1 \\ -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 \end{bmatrix} & & \\ & \ddots & \\ & & \begin{bmatrix} \cos \theta_k & \sin \theta_k \\ -\sin \theta_k & \cos \theta_k \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$s + t + 2k = n$, $\theta_j \in \mathbf{R}$ ($1 \leq j \leq k$) 为实数.

由正交矩阵的定义可知, P_θ 和 H_θ 均是正交矩阵.

定理 1. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$) 是对角线元素为 0 或 1 而其他元素均为正整数的对称矩阵, 则 $\forall P \in \Theta, P^T A P$ 既不是正整数对称矩阵也不是非负整数对称矩阵.

证明. 当 A 的对角线元素全为 1 时, 由引理 3 可知, $\forall P \in \Theta, P^T A P$ 不是正整数对称矩阵. 当 A 的对角线元素全为 0 时, 设 $B = A + I_n$. 由引理 3 可知, $\forall P \in \Theta, P^T B P$ 不是正整数对称矩阵. 因 $P^T B P = P^T A P + I_n$, 故 $\forall P \in \Theta, P^T A P$ 不是非负整数对称矩阵. 当 A 的对角线元素不全为 0 也不全为 1 时, 以下用归纳法证明: $\forall P \in \Theta, P^T A P$ 不是非负整数对称矩阵.

当 $n = 2$ 时, 设

$$A = \begin{bmatrix} \delta_1 & a \\ a & \delta_2 \end{bmatrix}, P = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

其中, $\delta_1, \delta_2 \in \{0, 1\}$, $\delta_1 + \delta_2 = 1$, $a \geq 1$ 为正整数, $\theta \in \mathbf{R}$. 设 $\vartheta_1 = \sin 2\theta$, $\vartheta_2 = \cos 2\theta$, $C = P^T A P$, 可得

$$C = \begin{bmatrix} \sin^2 \theta + \delta_1 \vartheta_2 - a \vartheta_1 & (\delta_1 - 0.5) \vartheta_1 + a \vartheta_2 \\ (\delta_1 - 0.5) \vartheta_1 + a \vartheta_2 & \cos^2 \theta - \delta_1 \vartheta_2 + a \vartheta_1 \end{bmatrix}$$

当 $\theta \neq \pm k\pi$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) 时, $P \in \Theta$, C 不是非负整数对称矩阵 (C 的元素中有负数或小数). 当 $P \in \Theta$ 时, 由定义 9 和引理 4 可知, 对一切 2 阶正交矩阵 $E \in \Phi, Z \in T$ 且 $Z \neq EP^{-1}$, 则: 1) $J_1 = ZP \in \Theta, J_2 = PZ \in \Theta, J_3 = Z^T PZ \in \Theta$; 2) $J_1^T A J_1, J_2^T A J_2, J_3^T A J_3$ 均不是非负整数对称矩阵. 由此, 对一切 2 阶正交矩阵 $J \in \Theta, J^T A J$ 不是非负整数对

称矩阵.

当 $n = 3$ 时, 设

$$A = \begin{bmatrix} \delta_1 & a_1 & a_2 \\ a_1 & \delta_2 & a_3 \\ a_2 & a_3 & \delta_3 \end{bmatrix}, P = \begin{bmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

其中, $\delta_1, \delta_2, \delta_3 \in \{0, 1\}, 1 \leq \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 \leq 2, a_i \geq 1 (1 \leq i \leq 3)$ 为正整数, $\delta = \pm 1, \theta \in \mathbf{R}$. 设 $\vartheta_1 = \sin 2\theta, \vartheta_2 = \cos 2\theta, \alpha(\theta) = a_1 \cos \theta - a_2 \sin \theta, \beta(\theta) = a_1 \sin \theta + a_2 \cos \theta, \eta = \delta_2 - \delta_3, \mu(\theta) = \eta \sin^2 \theta, C = P^T A P$, 可得

$$C = \begin{bmatrix} \delta_1 & \delta\alpha(\theta) & \delta\beta(\theta) \\ \delta\alpha(\theta) & \delta_2 - \mu(\theta) - a_3\vartheta_1 & 0.5\eta\vartheta_1 + a_3\vartheta_2 \\ \delta\beta(\theta) & 0.5\eta\vartheta_1 + a_3\vartheta_2 & \delta_3 + \mu(\theta) + a_3\vartheta_1 \end{bmatrix}$$

当 $\delta = 1$ 且 $\theta \neq \pm 2l\pi (l = 0, 1, 2, \dots)$, 或者 $\delta = -1$ 且 $\theta \neq \pm h\pi (h$ 为奇数) 时, $P \in \Theta, C$ 不是非负整数对称矩阵. 类似 $n = 2$ 时的分析可得, 对一切 3 阶正交矩阵 $J \in \Theta, J^T A J$ 不是非负整数对称矩阵.

当 $n \geq 4$ 时, 设

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{12}^T & A_{22} & A_{23} \\ A_{13}^T & A_{23}^T & A_{33} \end{bmatrix}, P_\theta = \begin{bmatrix} I_s & & \\ & -I_t & \\ & & H_\theta \end{bmatrix}$$

其中, $A_{11} \in \mathbf{R}^{s \times s}, A_{22} \in \mathbf{R}^{t \times t}$ 和 $A_{33} \in \mathbf{R}^{2k \times 2k}$ 均是对角线元素为 0 或 1 而其他元素全是正整数的分块对称矩阵; A_{12}, A_{13}, A_{23} 均是分块正整数矩阵; A 的对角线元素之和满足 $1 \leq \sum_i a_{ii} \leq n - 1; H_\theta$ 为形如引理 4 中的矩阵, $s + t + 2k = n, \theta_j \in \mathbf{R} (1 \leq j \leq k)$ 为实数. 由此,

$$P_\theta^T A P_\theta = \begin{bmatrix} A_{11} & -A_{12} & A_{13}H_\theta \\ -A_{12}^T & A_{22} & -A_{23}H_\theta \\ H_\theta^T A_{13}^T & -H_\theta^T A_{23}^T & H_\theta^T A_{33}H_\theta \end{bmatrix}$$

1) 当 $s = n$, 或 $1 \leq s < n, t = 0$ 且所有的 $\theta_j = \pm 2l\pi (l = 0, 1, 2, \dots)$, 或 $s = t = 0$ 且所有的 $\theta_j = \pm 2l\pi (l = 0, 1, 2, \dots)$ 时, $P_\theta = I_n \in \Omega$.

2) 当 $t = n$, 或 $1 \leq t < n, s = 0$ 且所有的 $\theta_j = \pm h\pi (h$ 为奇数), 或 $t = s = 0$ 且所有的 $\theta_j = \pm h\pi (h$ 为奇数) 时, $P_\theta = -I_n \in \Phi$.

3) 当 s, t, k 和 $\theta_j (1 \leq j \leq k)$ 的取值不是上述两种情况时, $P_\theta \in \Theta, P_\theta^T A P_\theta$ 不是非负整数对称矩阵.

当 $P \in \Theta$ 时, 由定义 9 和引理 4 可知, 对一切 $n \geq 4$ 阶正交矩阵 $E \in \Phi, Z \in T$ 且 $Z \neq EP^{-1}$, 则:

- a) $J_1 = ZP \in \Theta, J_2 = PZ \in \Theta, J_3 = Z^T PZ \in \Theta$;
- b) $J_1^T A J_1, J_2^T A J_2, J_3^T A J_3$ 均不是非负整数对称矩阵. 由此, 对一切 $n \geq 4$ 阶正交矩阵 $J \in \Theta, J^T A J$

不是非负整数对称矩阵.

综上可得, $\forall n \geq 2, \forall P \in \Theta, P^T A P$ 不是非负整数对称矩阵. \square

此外, 不难证明, $\forall n \geq 2, \forall Q \in \Phi, Q^T A Q$ 是非负整数对称矩阵.

使用定义 8 中的符号 A_n 和引理 2, 可以得到如下推论.

推论 2. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个无向图, $|V_1| = |V_2| = n \geq 2, A$ 与 B 分别是 G_1 和 G_2 的邻接矩阵, 则 $G_1 \cong G_2$ 的充要条件是存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A + A_n = Q^T(B + A_n)Q$.

证明. 设 $A + A_n = Q^T(B + A_n)Q$. 由定义 3 和引理 1 可知, 置换矩阵 $Q \in \Omega (Q \neq I_n)$ 可表示为 $m (m \geq 2$ 为正整数) 个对换矩阵 $P(i_s, j_s) = P_s$ 的乘积, 即 $Q = P(i_1, j_1) \cdots P(i_m, j_m) = P_1 \cdots P_m$. 此外, 不难验证, 任给对换矩阵 $P_s, P_s^T A_n P_s = A_n$. 由此可得: $Q^T A_n Q = P_m^T \cdots P_1^T A_n P_1 \cdots P_m = A_n; A + A_n = Q^T(B + A_n)Q = Q^T B Q + A_n; A = Q^T B Q$. 再由引理 2 可得, $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 由引理 2 可知, 存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A = Q^T B Q$. 由上述充分性证明可知, $\forall Q \in \Omega, A_n = Q^T A_n Q$. 由此, $A + A_n = Q^T(B + A_n)Q$. \square

容易理解, 推论 2 适合一切无向图.

引理 5^[14]. 设 $C, B \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是对称矩阵, 则 $f_\lambda(C) = f_\lambda(B)$ 的充要条件是存在 n 阶正交矩阵 $P \in T$, 使得 $C = P^T B P$.

基于前面的分析和准备, 下面给出两个无向图的同构判定条件.

定理 2. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个无向图, 每个顶点最多有一个自环, $|V_1| = |V_2| = n \geq 2, A_1$ 与 A_2 分别是 G_1 和 G_2 的邻接矩阵, 则 $G_1 \cong G_2$ 的充要条件是 $f_\lambda(A_1 + A_n) = f_\lambda(A_2 + A_n)$.

证明. 设 $f_\lambda(A_1 + A_n) = f_\lambda(A_2 + A_n)$. 给 G_1 和 G_2 中的每两个顶点之间加一条边, 可以得到两个新的无向图 \hat{G}_1 和 \hat{G}_2 , 其邻接矩阵分别是 $A_1 + A_n$ 和 $A_2 + A_n$. 因 G_1 和 G_2 的顶点最多有一个自环, 由定义 2 可知, A_1 和 A_2 的对角线元素为 0 或 1 (可以全为 0, 也可全为 1); 再由定义 8 可知, $A_1 + A_n$ 和 $A_2 + A_n$ 均是对角线元素为 0 或 1 而其他元素均是正整数的对称矩阵, 即 $A_1 + A_n$ 和 $A_2 + A_n$ 均是非负整数对称矩阵. 由引理 5 可知, 当 $f_\lambda(A_1 + A_n) = f_\lambda(A_2 + A_n)$ 时, 存在正交矩阵 $Q \in T$, 使得 $A_1 + A_n = Q^T(A_2 + A_n)Q$. 由定理 1 可知, $Q \notin \Theta$; 否则, $A_1 + A_n$ 将不是非负整数矩阵. 因 $Q \in T = \Phi \cup \Theta$ 且 $Q \notin \Theta$, 故 $Q \in \Phi$. 由此, 存在 $Q \in \Omega$ (或 $-Q \in \Omega$),

使得 $A_1 + A_n = Q^T(A_2 + A_n)Q$; 再由推论 2 可知, $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 因 $G_1 \cong G_2$, 故存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A_1 = Q^T A_2 Q$. 由推论 2 的证明结果可知, $A_n = Q^T A_n Q$. 由此, $A_1 + A_n = Q^T(A_2 + A_n)Q$, $f_\lambda(A_1 + A_n) = f_\lambda(A_2 + A_n)$. \square

需要说明的是: 1) 定理 2 既适合复杂无向图也适合简单无向图, 既适合连通无向图也适合不连通无向图; 一言以蔽之, 定理 2 适合一切无向图. 2) 因求解特征多项式 $f_\lambda(A)$ 的算法复杂度是 $O(n^3)$ [16-17], 故使用定理 2 判定两个无向图是否同构的算法复杂度是 $2O(n^3)$.

引理 6 [10]. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个简单无向连通图, $|V_1| = |V_2| = n \geq 2$, D_1 与 D_2 分别是 G_1 和 G_2 的距离矩阵, 则 $G_1 \cong G_2$ 的充要条件是 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$.

引理 7 [18]. 设 $C, B \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为对称矩阵, 对一切 $1 \leq i \leq n$, $\lambda_i(C)$ 为 C 的特征值, $\lambda_i(B)$ 为 B 的特征值, 则 $\min \lambda_i(B) + \lambda_i(C) \leq \lambda_i(C + B) \leq \lambda_i(C) + \max \lambda_i(B)$.

设 $G = \langle V, E \rangle$ 是复杂无向连通图, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, $n \geq 2$: 1) 除去 G 中顶点上的自环和邻接顶点间的重边 (邻接顶点间仅保留一条边), 可以得到一个简单无向连通图 G_1 (称 G_1 为 G 的主图). 2) $\forall i \neq j$, 若 v_i 和 v_j 邻接, 除去 v_i 和 v_j 之间的一条边, 其他保持不变, 可以得到另一个无向图 G_2 (称 G_2 为 G 的附图). 3) 设 A 为 G 的邻接矩阵, A_1 和 A_2 分别是 G_1 和 G_2 的邻接矩阵, D 为 G 的距离矩阵. 由上述假设可知, $A = A_1 + A_2$. 因复杂无向图中的自环和顶点间的重边对距离没有影响, 由定义 6 和定义 7 可知, D 既是 G 也是 G_1 的距离矩阵.

基于以上的叙述和讨论, 本文给出两个复杂无向图同构的另一个判定条件.

定理 3. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个复杂无向连通图, 每个顶点最多有一个自环, $|V_1| = |V_2| = n \geq 2$, A_1 与 A_2 分别是 G_1 和 G_2 的邻接矩阵, D_1 与 D_2 分别是 G_1 和 G_2 的距离矩阵. 则 $G_1 \cong G_2$ 的充要条件是 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$ 且 $f_\lambda(A_1) = f_\lambda(A_2)$.

证明. 设 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$ 且 $f_\lambda(A_1) = f_\lambda(A_2)$. 另设 G_{11} 与 G_{12} 分别是 G_1 的主图和附图, A_{11} 与 A_{12} ($A_{12} \neq 0$) 分别是 G_{11} 和 G_{12} 的邻接矩阵; G_{21} 与 G_{22} 分别是 G_2 的主图和附图, A_{21} 与 A_{22} ($A_{22} \neq 0$) 分别是 G_{21} 和 G_{22} 的邻接矩阵. 由此, 可得: $A_1 = A_{11} + A_{12}$, $A_2 = A_{21} + A_{22}$; D_1 既是 G_1 也是 G_{11} 的距离矩阵, D_2 既是 G_2 也是 G_{21} 的距离矩阵. 由

引理 6 可知, 当 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$ 时, $G_{11} \cong G_{21}$; 再由引理 2 可知, 存在 $Q \in \Omega$, 使得 $A_{11} = Q^T A_{21} Q$. 因 A_1 和 A_2 均是实对称矩阵, 且 $f_\lambda(A_1) = f_\lambda(A_2)$, 由引理 5 可知, 存在 n 阶正交矩阵 $P \in T$, 使得 $A_1 = P^T A_2 P$, 即 $A_{11} + A_{12} = P^T A_{21} P + P^T A_{22} P$. 综上所述可知, 当 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$ 且 $f_\lambda(A_1) = f_\lambda(A_2)$ 时

$$A_{11} = Q^T A_{21} Q \quad (1)$$

且

$$A_{11} + A_{12} = P^T A_{21} P + P^T A_{22} P \quad (2)$$

设 $A_{12} = P^T A_{22} P$, 由式 (1) 和式 (2) 可得, $A_{11} = Q^T A_{21} Q$, $A_{11} = P^T A_{21} P$, 由此, $P = Q$. 另由式 (2) 可得, $A_{11} = P^T A_{21} P + P^T A_{22} P - A_{12}$.

1) 设 $H_1 = P^T A_{21} P$, $H_2 = P^T A_{22} P - A_{12}$, 则

$$A_{11} = H_1 + H_2 \quad (3)$$

因 H_1 和 H_2 均是实对称矩阵且 $\lambda(H_1) = \lambda(A_{21})$. 由式 (3) 和引理 7 可得

$$\min \lambda_i(H_2) + \lambda_i(A_{21}) \leq \lambda_i(A_{11}) \leq \lambda_i(A_{21}) + \max \lambda_i(H_2) \quad (4)$$

2) 设 $A_{12} \neq P^T A_{22} P$, 则 $H_2 \neq 0$. 因 H_2 是对称矩阵, 故当 $H_2 \neq 0$ 时, $\lambda(H_2) \neq 0$. 设 $\min \lambda_i(H_2) = \max \lambda_i(H_2) = h$, 由式 (4) 可得, $\lambda_i(A_{11}) = \lambda_i(A_{21}) + h$. 若 $\lambda(A_{11}) = \lambda(A_{21})$, 则 $h = 0$, $\lambda(H_2) = 0$, $A_{12} = P^T A_{22} P$, 与假设矛盾; 若 $\lambda(A_{11}) \neq \lambda(A_{21})$, 则与式 (1) 矛盾. 设 $\lambda_i(A_{11}) \leq \lambda_i(A_{21}) + \max \lambda_i(H_2)$ ($\lambda_i(A_{11}) \geq \lambda_i(A_{21}) + \min \lambda_i(H_2)$), 若 $\lambda(A_{11}) \neq \lambda(A_{21})$, 则与 $A_{11} = Q^T A_{21} Q$ 矛盾; 若 $\lambda(A_{11}) = \lambda(A_{21})$, 则由引理 5 可得, $A_{11} = P^T A_{21} P$ ($P \in T$). 由此, $A_{11} = P^T A_{21} P$, $A_{11} = Q^T A_{21} Q$, $P = Q$. 而当 $P = Q$ 时, 由式 (1) 和式 (2) 可得, $A_{12} = P^T A_{22} P$, 与 $A_{12} \neq P^T A_{22} P$ 的假设矛盾. 总之, $A_{12} \neq P^T A_{22} P$ 的假设不成立.

综上所述可知: 当 $A_{12} = P^T A_{22} P$ 时, $P = Q$; 由式 (2) 可得 $A_1 = Q^T A_2 Q$, 再由引理 2 可得, $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 由引理 2 可知, 存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A_1 = Q^T A_2 Q$. 因 G_1 和 G_2 均是复杂无向连通图, 如充分性证明可设, $A_1 = A_{11} + A_{12}$, $A_2 = A_{21} + A_{22}$, 由此, $A_{11} + A_{12} = Q^T(A_{21} + A_{22})Q$. 因 Q 是正交矩阵, 故 $f_\lambda(A_1) = f_\lambda(A_2)$. 设 $A_{11} \neq Q^T A_{21} Q$, 则简单无向连通图 G_{11} 和 G_{21} 不同构, 进而可得 G_1 和 G_2 不同构, 与假设矛盾. 当 $A_{11} = Q^T A_{21} Q$ 时, 由引理 2 可知, $G_{11} \cong G_{21}$; 再由引理 6 可得, $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$. 综上, 当 $G_1 \cong G_2$ 时, $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$ 且 $f_\lambda(A_1) = f_\lambda(A_2)$. \square

比较引理 6 和定理 3 可知, 简单无向连通图的

同构条件不同于复杂无向连通图的同构条件.

由定理 3 的证明过程可知, 当定理 3 中的 G_1 和 G_2 均是简单无向连通图时, $G_1 = G_{11}$, $G_2 = G_{21}$, $A_{12} = A_{22} = 0$, $A_1 = A_{11}$, $A_2 = A_{21}$. 由引理 6 可知: 当 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$ 时, $G_1 \cong G_2$; 再由引理 2 可知, 存在 $Q \in \Omega$, 使得 $A_1 = Q^T A_2 Q$, 进而可得 $f_\lambda(A_1) = f_\lambda(A_2)$. 由此, 当 G_1 和 G_2 均是简单无向连通图时, 定理 3 中的条件可简化为 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$; 定理 3 退化为引理 6. 这表明定理 3 也适合简单无向连通图.

因为求解距离矩阵 D 的算法复杂度是 $O(n^3)$ [12-13], 求解特征多项式的算法复杂度是 $O(n^3)$ [16-17], 故定理 3 判定条件的算法复杂度是 $4O(n^3)$.

设 G_1 和 G_2 是两个复杂无向不连通图且分别由 m 个连通子图 G_{ij} ($i = 1, 2; 1 \leq j \leq m$) 组成, G_1 与 G_2 同构是指 G_1 中的连通子图 G_{1j} 与 G_2 中的连通子图 G_{2j} 一一对应同构. 不难理解, 将定理 3 用于复杂无向不连通图的各个连通子图, 就可解决复杂无向不连通图的同构判定问题.

比较定理 2 和定理 3 可知: 1) 定理 2 适合一切无向图, 而定理 3 仅适合复杂无向连通图; 2) 若将定理 2 限定在复杂无向连通图上, 则定理 2 与定理 3 等价; 3) 就一般复杂无向图的同构判定问题而言, 定理 2 比定理 3 具有更低的算法复杂度, 因此也更方便于实际应用.

例 1 [10, 15]. 判定图 1 中下列各组对应图是否同构.

1) G_1 和 G_2 均是复杂无向连通图. 设 G_1 和 G_2 的邻接矩阵分别是 A_{11} 和 A_{12} , 距离矩阵分别是 D_1 和 D_2 . 按图中顶点标号, 经计算可得

$$A_{11} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, A_{12} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_1 = D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$f_\lambda(A_{11} + A_3) = \lambda^3 - 3\lambda^2 - 9\lambda - 5$$

$$f_\lambda(A_{12} + A_3) = \lambda^3 - \lambda^2 - 17\lambda - 15$$

$$f_\lambda(A_{11}) = \lambda^3 - 3\lambda^2, f_\lambda(A_{12}) = \lambda^3 - \lambda^2 - 6\lambda$$

其中, A_3 是 3 顶点无向完全图的邻接矩阵.

因 $f_\lambda(A_{11} + A_3) \neq f_\lambda(A_{12} + A_3)$, 由定理 2 可以判定 G_1 和 G_2 不同构. 因 $f_\lambda(D_1) = f_\lambda(D_2)$, 但 $f_\lambda(A_{11}) \neq f_\lambda(A_{12})$, 由推论 1 和定理 3 均可判定 G_1 和 G_2 不同构.

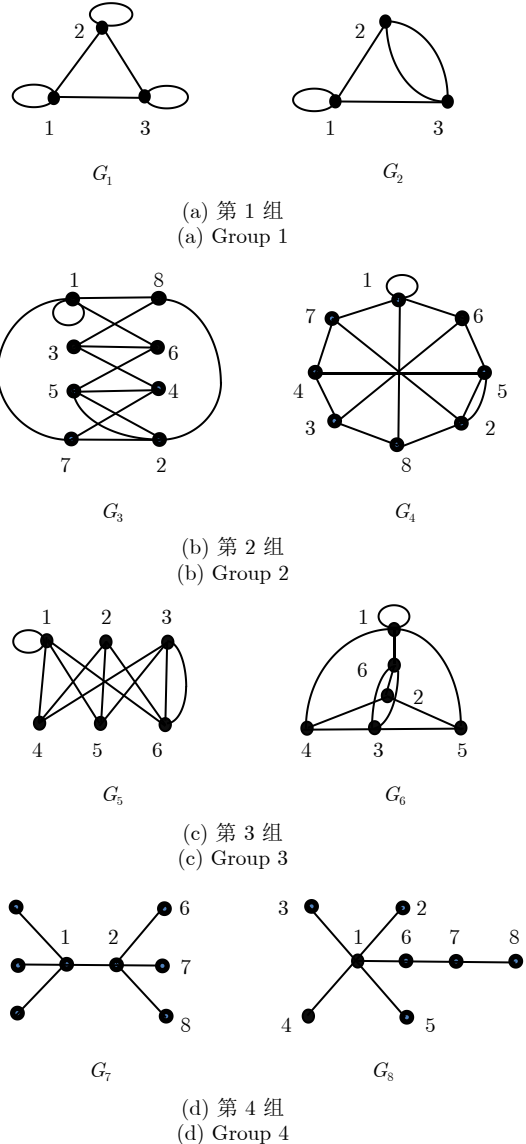


图 1 例 1 中的各对应图

Fig.1 Corresponding figures of Example 1

2) G_3 和 G_4 均是复杂无向连通图. 设 G_3 的邻接矩阵和距离矩阵分别是 A_{31} 和 D_3 , G_4 的邻接矩阵和距离矩阵分别是 A_{41} 和 D_4 . 按图中顶点标号, 经计算可得

$$A_{31} = A_{41} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_3 = D_4 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 1 & 2 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

设 A_8 是 8 顶点无向完全图的邻接矩阵. 因 $f_\lambda(A_{31} + A_8) = f_\lambda(A_{41} + A_8)$, 由定理 2 可以判定 $G_3 \cong G_4$. 因 $f_\lambda(D_3) = f_\lambda(D_4)$ 且 $f_\lambda(A_{31}) = f_\lambda(A_{41})$, 故由定理 3 亦可判定 $G_3 \cong G_4$.

3) G_5 和 G_6 均是复杂无向连通图. 设 G_5 的邻接矩阵和距离矩阵分别是 A_{51} 和 D_5 , G_6 的邻接矩阵和距离矩阵分别是 A_{61} 和 D_6 . 按图中顶点标号, 经计算可得

$$A_{51} = A_{61} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_5 = D_6 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

设 A_6 是 6 顶点无向完全图的邻接矩阵. 因 $f_\lambda(A_{51} + A_6) = f_\lambda(A_{61} + A_6)$, 由定理 2 可以判定 $G_5 \cong G_6$. 因 $f_\lambda(A_{51}) = f_\lambda(A_{61})$ 且 $f_\lambda(D_5) = f_\lambda(D_6)$, 由定理 3 亦可判定 $G_5 \cong G_6$.

4) G_7 和 G_8 均是无向树. 设 G_7 和 G_8 的邻接矩阵分别是 A_{71} 和 A_{81} , 距离矩阵分别是 D_7 和 D_8 . 按图中顶点标号, 经计算可得

$$A_{71} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_{81} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_7 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 3 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 2 & 3 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 3 & 3 & 3 \\ 2 & 1 & 3 & 3 & 3 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 3 & 3 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 3 & 3 & 2 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_8 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 2 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 3 & 3 & 3 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 4 & 4 & 4 & 4 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

设 A_8 是 8 顶点无向完全图的邻接矩阵, 可得 $\det(A_{71} + A_8) = 17$, $\det(A_{81} + A_8) = 21$. 由此, $f_\lambda(A_{71} + A_8) \neq f_\lambda(A_{81} + A_8)$, 由定理 2 可以判定 G_7 和 G_8 不同构. 另外, 还可求得: $f_\lambda(A_{71}) = f_\lambda(A_{81}) = \lambda^8 - 7\lambda^6 + 9\lambda^4$; $\det(D_7) = -1048$, $\det(D_8) = 1600$. 因 $\det(D_7) \neq \det(D_8)$, 故 $f_\lambda(D_7) \neq f_\lambda(D_8)$. 由此, $f_\lambda(A_{71}) = f_\lambda(A_{81})$, 但 $f_\lambda(D_7) \neq f_\lambda(D_8)$, 由定理 3 可以判定 G_7 和 G_8 不同构.

3 结束语

图的同构关系是一种等价关系, 凡与图的结构相关的分类、聚类、识别和学习等问题均与图的同构判定问题有关. 时至今日, 图的同构判定问题仍然具有重要的理论和应用价值.

文献 [10] 将基于邻接矩阵的同构判定条件 (引理 2) 推广到简单无向图距离矩阵 (引理 6 和引理 7), 解决了简单无向图的同构判定问题. 但引理 6 和引理 7 不能用于复杂无向图的同构判定, 原因在于复杂无向图的同构关系不能由其距离矩阵唯一确定.

本文的主要思路和贡献可概括为: 1) 证明了对角线元素为 0 或 1 而其他元素均为正整数的对称矩

阵在非同构正交变换下不再是非负整数对称矩阵 (定理 1); 利用无向完全图邻接矩阵在矩阵同构变换下保持不变的特性, 给出了引理 2 的另一种等价表示 (推论 2); 基于定理 1 和推论 2, 给出了基于邻接矩阵之和的特征多项式判定条件 (定理 2). 2) 针对复杂无向连通图的同构判定问题, 使用图及邻接矩阵的分解方法, 给出了基于邻接矩阵特征多项式和距离矩阵特征多项式的同构判定条件 (定理 3). 将该条件用于复杂无向不连通图的各个连通子图, 就可解决复杂无向不连通图的同构判定问题. 定理 2 和定理 3 中的判定条件均是充要条件且均具有多项式时间复杂度. 需要再次说明的是: 定理 2 所给的判定条件具有一般普适性, 即对任意的简单、复杂 (每一顶点最多允许有一个自环)、连通和不连通无向图均适用; 定理 3 既适合复杂无向连通图也适合简单无向连通图.

与文献 [10] 中的结果相比, 定理 2 和定理 3 是无向图同构研究方面的又一重要进展. 定理 2 和定理 3 的另一理论价值表明, 无向图的同构判定问题是 P 问题. 需要说明的是, 虽然我们解决了无向图的同构判定问题, 但有向图的同构判定是 P 问题还是 NP 问题仍然没有得到解决.

今后我们将针对有向图的同构判定问题开展研究, 期望得到一些有理论和实用价值的新结果.

References

- Grohe M, Schweitzer P. The graph isomorphism problem. *Communications of the ACM*, 2020, **63**(11): 128–134
- McKay B D, Piperno A. Practical graph isomorphism, II. *Journal of Symbolic Computation*, 2014, **60**: 94–112
- Rosen K H [Author], Xu Liu-Tong, Yang Juan, Wu Bin [Translator]. *Discrete Mathematics and Its Applications*. Beijing: China Machine Press, 2016.
(Rosen K H [著], 徐六通, 杨娟, 吴斌 [译]. 离散数学及其应用. 北京: 机械工业出版社, 2016.)
- West D B. *Introduction to Graph Theory, Second Edition*. New Jersey: Pearson Education, Inc., 2018.
- Luks E M. Isomorphism of graphs of bounded valance can be tested in polynomial time. *Journal of Computer and System Sciences*, 1982, **25**(1): 42–65
- Babai L. Graph isomorphism in quasipolynomial time. *Computer Science*, arXiv preprint arXiv: 1512.03547v2, 2016.
- Beyer T, Jones W, Nitché S. Linear algorithms for isomorphism of maximal outer planar graph. *Journal of the Association for Computing Machinery*, 1979, **26**(4): 603–610
- Buss S R. A logtime algorithm for tree isomorphism, comparison and canonization. In: Proceedings of the 5th Kurt Code Colloquium on Computational Logic and Proof Theory. Vienna, Austria: 1997. 18–33
- Liu G W, Yin Z X, Xu J, Dong Y F. Algorithm of graph isomorphism with three dimensional DNA graph structures. *Progress in Natural Science*, 2005, **15**(2): 181–184
- Wang Zhuo, Wang Cheng-Hong. Isomorphism determination methods for simple undirected graphs. *Acta Automatica Sinica*, 2023, **49**(9): 1878–1888
(王卓, 王成红. 简单无向图的同构判定方法. 自动化学报, 2023,

49(9): 1878–1888)

- Wang Chao-Rui. *Graph Theory, Second Edition*. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1997.
(王朝瑞. 图论, 第 2 版. 北京: 北京理工大学出版社, 1997.)
- Wang Shu-He. *Graph Theory*. Beijing: Science Press, 2004.
(王树禾. 图论. 北京: 科学出版社, 2004.)
- Yin Jian-Hong, Wu Kai-Ya. *Graph Theory and Its Algorithms*. Hefei: Press of University of Science and Technology of China, 2003.
(殷剑宏, 吴开亚. 图论及其算法. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2003.)
- Fan Yun, Qian Ji-Lin, Cen Jia-Ping, Liu Heng, Mu Han-Lin. *Algebraic Dictionary*. Wuhan: Central China Normal University Press, 1994.
(樊恽, 钱吉林, 岑嘉评, 刘恒, 穆汉林. 代数学辞典. 武汉: 华中师范大学出版社, 1994.)
- Mowshowitz A. The characteristic polynomial of a graph. *Journal of Combinatorial Theory Series B*, 1972, **12**(2): 177–193
- Liu Chun-Feng, Chang Jin-Cai, Yang Ai-Min, Gong Dian-Xuan, Yan Shao-Hong. *Numerical Methods*. Beijing: Higher Education Press, 2016.
(刘春风, 常锦才, 杨爱民, 龚佃选, 阎少宏. 数值计算方法. 北京: 高等教育出版社, 2016.)
- Wang Ming-Hui, Wang Guang-Bin, Zhang Wen. *Applied Numerical Analysis*. Beijing: Chemical Industry Press, 2015.
(王明辉, 王广彬, 张闻. 应用数值分析. 北京: 化学工业出版社, 2015.)
- Wang Song-Gui, Wu Mi-Xia, Jia Zhong-Zhen. *Matrix Inequalities, Second Edition*. Beijing: Science Press, 2006
(王松桂, 吴密霞, 贾忠贞. 矩阵不等式, 第 2 版. 北京: 科学出版社, 2006.)



王卓 北京航空航天大学仪器科学与光电工程学院教授. 2013 年获得美国伊利诺伊大学芝加哥分校电子与计算机工程系博士学位. 主要研究方向为基于数据的系统分析与控制方法和网络理论. 本文通信作者.

E-mail: zhuowang@buaa.edu.cn

(WANG Zhuo Professor at the School of Instrumentation and Optoelectronic Engineering, Beihang University. He received his Ph.D. degree in Electrical and Computer Engineering Department, University of Illinois at Chicago, USA in 2013. His research interest covers data-based system analysis and control methods, and network theory. Corresponding author of this paper.)



王成红 中国自动化学会常务委员会研究员. 1997 年获博士学位. 主要研究方向为运筹学与控制论, 图论及其应用.

E-mail: chenghwang@163.com

(WANG Cheng-Hong Fellow researcher of the Council of Chinese Association of Automation. He received his Ph.D. degree in 1997. His research interest covers operational research and cybernetics, and graph theory and its applications.)