图同构的判定研究

陈新泉

（重庆三峡学院计算机科学与工程学院 重庆 404000）

摘 要 图论中的图同构判定问题仍是一个未能圆满解决的重要问题。文章从图的邻接矩阵的行、列置换出发，得到能加快判定两个图是否同构的一系列性质。在几个性质基础上，提出了一种判定两个图是否同构的搜索算法。接着给出两个实例对该算法加以说明和演示，以便更好地理解这些性质和算法。最后对文章作简要的总结并指出进一步的研究方向。

关键词 图；同构；邻接矩阵；同构置换

On Isomorph Judgement of Graph

CHEN Xinquan

(*School of Computer Science & Engineering*, *Chongqing Three Gorges University*, *Chongqing* 404000, *China*)

Abstract The graph isomorph judgement problem in graph theory is yet to be solved. A series of properties for the quicker judgement on whether two graphs are isomorphic were obtained through the permutation of rows and columns of adjacent matrix of graphs. A search algorithm on graph isomorph judgement was proposed on the basis of several properties. Then two examples were presented to explain and demonstrate the algorithm for better understanding of these properties and the algorithm. Finally a brief conclusion and the further research direction were presented.

Keywords graph; isomorph; adjacent matrix; isomorphic permutation

1 引 言

从图同构、相似矩阵、等价矩阵、等价类等这些概念可以对人类的认识活动中纷繁复杂的客观事物进行分门别类，从而将本质上相同的一些事物归结为一类来进行研究，这样可以大大减轻人类认识世界的负担。图同构是图论中一个非常重要的概念，在给出图同构的定义后，研究者们就已经给出了图同构的几个必要条件，但到目前为止还未找到判定图同构的有效充要条件，也还没有找到判定图同构的简单方法。

本文在归纳总结出图同构的几个性质后，提出了一种比图同构的定义判别法更有效的图同构搜索算法，这是在图同构判定领域上的一点进步。本文第 2 节列出了图同构的定义，然后介绍了图同构的几个性质，第 3 节给出了判定两个图同构的搜索算法，第4节给出 2 个实例来说明如何通过图同构的几个性质及定理来加快判定两个图是否同构，最后对本文作简要的总结并指出进一步的研究方向。

2 图同构的概念及性质

2.1 图同构的定义

定义 1[1]：设两个图 $G=(V,E)$ 和 $G'=(V',E')$，如果存在一一映射函数 $f:V\rightarrow V'$，使得对于任意的 $e=(v_i,v_j)\in E$（或 $e=<v_i,v_j>\in E$）当且仅当 $e'=(f(v_i),f(v_j))\in E'$（或 $e'=<f(v_i),f(v_j)>\in E'$），并且 e 和 e' 的重数相同，则称 G 和 G' 同构，记为 $G\cong G'$。

参考文献[1]列出了判定图同构的三个必要条件：

(1) 结点数目相同；

(2) 边数相同；

作者简介：陈新泉，博士，副教授，研究方向为数据挖掘、物联网中的智能信息处理等，E-mail：chenxqscut@126.com。

(3)度数相同的结点数相同。

根据图同构的定义，这三个必要条件显然成立。

定义 2[2]：设两个图 G 和 H，如果存在一一映射函数 $f:V(G)\to V(H)$，使得对于图 G 中任意的结点对 u 和 v 连接当且仅当 $f(u)$ 和 $f(v)$ 在图 H 中连接，则称 G 和 H 同构。

参考文献[2,3]还列出了判定图同构的另外一个必要条件，即：两个图同构必有度序列相同。

注：本文提到的图均为连通图。度数、度序列等也是在某个连通图中进行计算。不失一般性，若两个图均有多个连通子图，则先在连通子图层次上搜索这两个图之间是否存在一一映射关系(如先通过连通子图的结点数、度序列等来进行搜索)。然后再在相对应的连通子图之间判定它们是否同构。只有这两者都满足一一映射关系，才能说这两个图同构。这种具有回溯性质的两层搜索判别法比图同构的定义判别法一般要省时省力一些。

2.2 图同构的性质

定义 3：同构置换：设两个图的度序列相同，如果对一个图的邻接矩阵进行的初等变换仅限于在具有相同度数的结点范围内进行相对应的行、列置换，则这种同时进行行、列的初等变换就称为同构置换。

注意：对于无向图，度数相同是指这些结点的度数相等。对于有向图，度数相同是指这些结点的入度和出度都相等。

定义 4：同构相似：设两个图的度序列相同，如果对一个图的邻接矩阵进行若干次同构置换后，能得到另外一个图的邻接矩阵，则说明这两个图同构，这两个图的邻接矩阵就称为同构相似。

性质 1：在度数相同的结点范围内对两个结点进行互换等价于在其邻接矩阵中对与两个互换结点相对应的行和列进行一次行和列的置换。

证明：根据图同构的定义，即可得知。

注意：不管是对无向图还是对有向图，都需要同时对行和列进行置换。

性质 2：对于某个图的邻接矩阵，在度数相同的结点范围内进行一次行和列的置换后，若置换后的邻接矩阵保持不变，则置换前后的两个图保持同构。

证明：邻接矩阵反映出图中各个结点的连接状况，若两个图的邻接矩阵相等，则这两个图同构。根据图同构的定义和性质 1，即可得知性质 2 成立。

性质 3：图同构满足自反性、对称性、传递性。可见，图同构是一种等价关系。

证明：根据图同构的定义，可知图同构满足这三种性质，从而说明它也是一种等价关系。

通过图同构这个概念可以对所有的图进行划分，进而对图进行分类研究，建立等价类，从而简化图的研究。

对于无向图，按照结点度数相同的原则对结点集进行升序分割排列，这个操作很容易进行；对于有向图，需要按照结点的入度数和出度数对结点集进行分割排列，此时可以按照入度数优先或出度数优先来进行升序排列。为了叙述方便，下面均以无向图为例进行解释说明。

设$\{n_0,n_1,n_2,\cdots,n_k\}$为按照结点度数相同的原则对结点集进行分割后的 $k+1$ 个结点子集所包含的结点个数的排列集合，其中 $n_i(i=0,1,\cdots,k)$为结点度数为 i 的结点个数，显然有 $\sum_{i=0}^{k}n_i=|V(G)|$。

性质 4：设图的邻接矩阵均按照结点度数升序的度序列来表示。如果在图 G 的邻接矩阵 $A(G)$的同构置换过程中存在 $p^*(A(G))=A(H)$，则可判定图 G 和图 H 同构。其中 $p^*(A(G))$是邻接矩阵 $A(G)$经过若干步同构置换而得到的矩阵。

证明：根据定义 3 可知，同构置换不改变图的同构性质。如果在置换过程中存在 $p^*(A(G))=A(H)$，说明图 G 经过若干步同构置换后的邻接矩阵与图 H 的邻接矩阵相等，从而说明图 G 和图 H 同构。

性质 5：设图的邻接矩阵均按照结点度数升序的度序列来表示。如果图 G 的邻接矩阵 $A(G)$在所有度数相同的结点范围内进行了穷尽的行、列置换，均不能与图 H 的邻接矩阵 $A(H)$相等，则可判定图 G 和图 H 不同构。

证明：根据图同构的定义及性质 4，即可得知。

根据图同构的定义 1[1]，这种一一映射函数的搜索范围为 $n!$，借助于“度数相同的结点数相同”这个图同构的必要条件，可将搜索范围降低到 $\prod_{i=1}^{k}n_i!$。结点度数为 0 的孤立结点只要结点数目相同即可，无须参与判定两个图是否同构的搜索匹配过程。

显然，尽管一般存在 $O(\prod_{i=1}^{k}n_i!)\le O(n!)$，借助于性质 5 能降低根据图同构的定义来判定两个图不同构的代价，但这种搜索方法仍不是十分高效。

性质 6：设图的邻接矩阵均按照结点度数升序的度序列来表示。如果图 G 的邻接矩阵 $A(G)$经过若干

步同构置换，能同构置换成 $A(H)$，则 $A(G)$ 的秩等于 $A(H)$ 的秩，邻接矩阵 $A(G)$ 相似于 $A(H)$。反之，则未必成立。

证明：根据矩阵变换的理论，图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 在度数相同的结点范围内进行行、列置换(如对第 i 行和第 j 行，第 i 列和第 j 列进行置换，其中第 i, j 行所对应的结点度数相同)，等价于左乘、右乘一个与 $A(G)$ 进行相同的行、列置换的同阶单位矩阵(对同阶单位矩阵进行第 i 行和第 j 行的置换之后的矩阵作为左乘矩阵，对同阶单位矩阵进行第 i 列和第 j 列的置换之后的矩阵作为右乘矩阵)。而这种带约束的行、列置换是初等变换的一种，它并不改变矩阵的秩，从而矩阵 $A(G)$ 相似于 $A(H)$，可见充分条件成立。

根据矩阵变换的理论，秩相等的两个同阶矩阵，一个矩阵经过若干次初等变换后，相似于另外一个矩阵，而这里不满足可采取任意的初等变换这一点，所以必要条件未必成立。

性质 7：按照结点度数相同且从小到大的原则对结点集进行有序排列，如果图 G 和 H 的度序列相同，则可设图 G 和 H 的非零度序列分别为 $G(n_1,n_2,\cdots,n_k)$ 和 $H(n_1,n_2,\cdots,n_k)$。根据非零度序列将图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 划分为 $k\times k$ 的分块矩阵，其中第 $i(i=1,\cdots,k)$ 块由 $A(G)$ 中度数为 i，结点个数为 n_i 的结点子集构成(根据已经排序的原则，度数相同的结点相邻排列)，图 H 的邻接矩阵 $A(H)$ 也进行类似的划分。

如果发现在图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 中，对度数为 i，结点个数为 n_i 的结点子集范围内进行了穷尽的行、列置换，该中心块仍不能与图 H 的邻接矩阵 $A(H)$ 相对应的中心块相等，则可判定图 G 和图 H 不同构。

证明：对图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 而言，由于对度数为 i，结点个数为 n_i 的结点子集范围内进行了行、列置换并不改变其它中心块(如度数为 j，结点个数为 nj 的结点子集，其中 $i\neq j$)的值。若在图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 中存在一个中心块经过穷尽的行、列置换后与图 H 的邻接矩阵 $A(H)$ 相对应的中心块仍不相等，表明 $A(G)$ 就不能经过同构置换得到 $A(H)$，从而说明图 G 和图 H 不同构。

性质 8：与性质 7 的预处理步骤相同，如果发现图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 中度数为 $i(i=1,\cdots,k)$，结点个数为 n_i 的中心块的秩与图 H 的邻接矩阵 $A(H)$ 相对应的中心块的秩不相等，则说明图 G 和图 H 不同构。

证明：如果邻接矩阵 $A(G)$ 中度数为 $i(i=1,\cdots,k)$，结点个数为 n_i 的中心块的秩与图 H 的邻接矩阵 $A(H)$ 相对应的中心块的秩不相等，根据矩阵理论，说明这两个中心块就不能经过同构置换得到。根据性质 7 可知，这两个图不同构。

根据性质4、性质5和性质7，很容易得到定理1。

定理 1：设图的邻接矩阵均按照结点度数升序的度序列来表示，图 G 和 H 的邻接矩阵分别为 $A(G)$ 和 $A(H)$，$p^*(A(G))$ 是邻接矩阵 $A(G)$ 经过若干步同构置换而得到的矩阵，则：

(1) 如果 $A(G)=A(H)$，则图 G 和图 H 同构。即 $A(G)=A(H)$ 是 $G\cong H$ 的充分条件。

(2) 如果 $p^*(A(G))=A(H)$，则图 G 和图 H 同构；反之，若图 G 和图 H 同构，则必有 $p^*(A(G))=A(H)$。即 $p^*(A(G))=A(H)$ 是 $G\cong H$ 的充要条件。

证明：

(1) 根据图同构的定义及按照结点度数升序的度序列来表示的邻接矩阵，很容易证得。

(2) 根据性质4，可得到其充分条件。根据性质5的逆反命题，可得到其必要条件。所以，充要条件成立。

借助于性质 7，性质 8 及定理 1，可将判定图是否同构的搜索范围大为缩小。

3 图同构的判定算法

3.1 图同构判定算法的理论基础

根据图结点的度数，将 $V(G)$ 划分成度数为 i，结点数目为 n_i 的 $k+1$ 个结点子集，其中 $i=0,\cdots,k$。显然，如果图 G 和 H 同构，那么它们的度序列 $G(n_0,n_1,\cdots,n_k)$ 和 $H(n_0,n_1,\cdots,n_k)$ 必然相同。

欲搜索 $A(G)$ 能否经过若干步同构置换得到 $A(H)$，只须在结点度数取 $i(i=1,\cdots,k)$，结点个数为 n_i 的结点子集范围内进行相对应的行、列置换(即同构置换)。

如果 $A(G)$ 经过若干步同构置换，能变换成 $A(H)$，则说明图 G 和 H 同构。

如果在结点度数取 $i(i=1,\cdots,k)$，结点个数为 n_i 的结点子集范围内进行了穷尽的行、列置换，仍不能变换成 $A(H)$，则说明图 G 和 H 不同构。

3.2 图同构的判定算法

图同构判定算法可描述如下：

Step 1：先判断两个图(标记为 G 和 H)的结点数目是否相同、边数是否相同、度数相同的结点数是否

相同、度序列是否相同，若判定图同构的这 4 个必要条件全部满足，则进入 Step 2，否则可以判定这两个图不图构，从而退出该算法；

注意：度序列相同其实已经包含了结点数目相同、度数相同的结点数相同这两个必要条件。

Step 2：按照结点度数相同的原则对结点集进行升序分割排列，然后根据结点度数由小到大升序排列的结点子集分别构造出图 G 和 H 的邻接矩阵 $A(G)$ 和 $A(H)$；

注意：显然这两个图的按照结点度数由小到大升序排列的结点子集存在着一一对应关系，邻接矩阵 $A(G)$ 和 $A(H)$ 的行和列根据结点度数可分割为若干段，同一段的结点有相同的结点度数。注意的是，邻接矩阵行和列的结点排列次序需保持一致。

Step 3：根据性质 4，对图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 在结点度数相同的结点范围内进行若干步行、列的置换，如果能同构置换成 $A(H)$，则说明图 G 和图 H 同构。根据性质 7，如果在图 G 的邻接矩阵 $A(G)$ 中，对度数为 $i\,(i=1,\cdots,k)$，结点个数为 n_i 的结点子集范围内进行了穷尽的行、列置换，该中心块仍不能与图

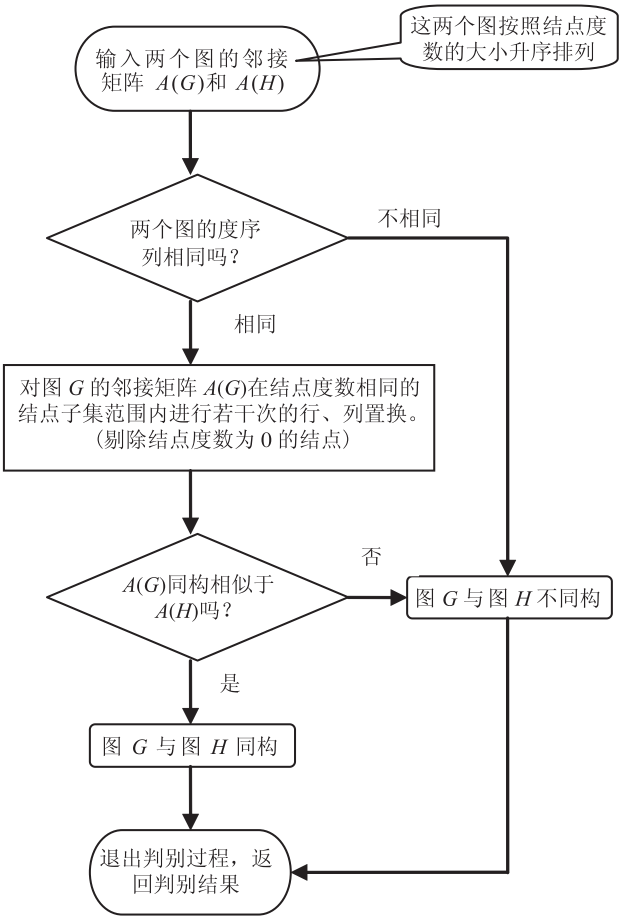


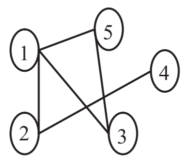
图 1　图同构判定算法的流程图

H 的邻接矩阵 $A(H)$ 相对应的中心块相等，则可判定图 G 和图 H 不同构。

图同构判定算法的流程图如图 1 所示。

4　实例说明

例 1：图 2(a)与图 3(a)同构。其中图 2(a)的邻接矩阵由图 2(b)表示，图 3(a)的邻接矩阵由图 3(b)表示。

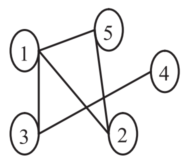


(a)

	4	2	3	5	1
4	0	1	0	0	0
2	1	0	0	0	1
3	0	0	0	1	1
5	0	0	1	0	1
1	0	1	1	1	0

(b)

图 2　5 个结点构成的连通图(a)及其邻接矩阵表示(b)



(a)

	4	2	3	5	1
4	0	0	1	0	0
2	0	0	0	1	1
3	1	0	0	0	1
5	0	1	0	0	1
1	0	1	1	1	0

(b)

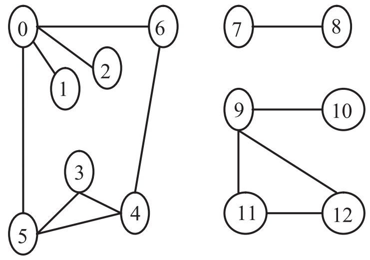
图 3　与图 2(a)同构的连通图(a)及其邻接矩阵表示(b)

对图 2(a)的邻接矩阵的第 2 行和第 3 行，第 2 列和第 3 列进行置换，就得到图 3(a)的邻接矩阵，说明这两个图的邻接矩阵同构相似，从而说明这两个图同构。

例 2：图 4(a)与图 5(a)同构，图 6(a)与图 4(a)和图 5(a)均不同构[4]。其中图 4(a)的邻接矩阵由图 4(b)表示，图 5(a)的邻接矩阵由图 5(b)表示，图 6(a)的邻接矩阵由图 6(b)表示。

图 4(a)和图 5(a)的度序列相同，所以还需要搜索能否由图 4(a)的邻接矩阵同构置换得到图 5(a)的邻接矩阵。

按照邻接表中的结点的排列次序，图 4(a)的两个小连通子图的邻接矩阵与图 5(a)的两个小连通子图的邻接矩阵对应相等。图 4(a)的结点子集{1,8}与图 5(a)的结点子集{7,8}可以建立一一映射关系。图 4(a)的结点子集{4,0,9,11}与图 5(a)的结点子集{10,11,12,9}也可以建立一一映射关系。



(a)

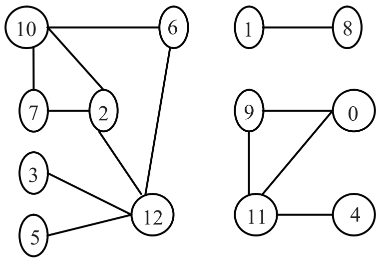
	1	2	3	6	4	5	0
1	0	0	0	0	0	0	1
2	0	0	0	0	0	0	1
3	0	0	0	0	1	1	0
6	0	0	0	0	1	0	1
4	0	0	1	1	0	1	0
5	0	0	1	0	1	0	1
0	1	1	0	1	0	1	0

	7	8
7	0	1
8	1	0

	10	11	12	9
10	0	0	0	1
11	0	0	1	1
12	0	1	0	1
9	1	1	1	0

(b)

图 4　3 个连通子图组成的 13 个结点的图 (a) [4] 及其邻接矩阵表示 (b)



(a)

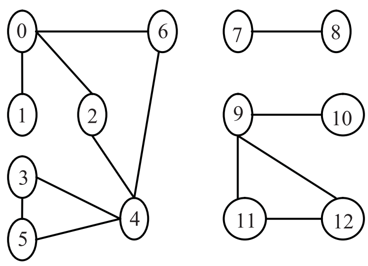
	3	5	6	7	2	10	12
3	0	0	0	0	0	0	1
5	0	0	0	0	0	0	1
6	0	0	0	0	0	1	1
7	0	0	0	0	1	1	0
2	0	0	0	1	0	1	1
10	0	0	1	1	1	0	0
12	1	1	1	0	1	0	0

	1	8
1	0	1
8	1	0

	4	0	9	11
4	0	0	0	1
0	0	0	1	1
9	0	1	0	1
11	1	1	1	0

(b)

图 5　与图 4 (a) 同构的图 (a) [4] 及其邻接矩阵表示 (b)



(a)

	1	2	3	5	6	0	4
1	0	0	0	0	0	1	0
2	0	0	0	0	0	1	1
3	0	0	0	1	0	0	1
5	0	0	1	0	0	0	1
6	0	0	0	0	0	1	1
0	1	1	0	0	1	0	0
4	0	1	1	1	1	0	0

	7	8
7	0	1
8	1	0

	10	11	12	9
10	0	0	0	1
11	0	0	1	1
12	0	1	0	1
9	1	1	1	0

(b)

图 6　与图 4 (a)、图 5 (a) 均不同构的图 (a) [4] 及其邻接矩阵表示 (b)

按照邻接表中的结点的排列次序，图 4 (a) 的大连通子图的邻接矩阵与图 5 (a) 的大连通子图的邻接矩阵不相等，但对图 4 (a) 的大连通子图的邻接矩阵的结点 3 和结点 6 进行一次行、列置换，接着再对结点 4 和结点 5 进行一次行、列置换，就与图 5 (a) 的大连通子图的邻接矩阵相同了。说明图 4 (a) 的大连通子图的邻接矩阵同构相似于图 5 (a) 的大连通子图的邻接矩阵，从而它们可以建立同构关系。图 6 (a) 的度序列与图 4 (a) 和图 5 (a) 不相同，所以与前面两个图不同构。

5　结束语

本文归纳、发掘、总结出图同构的一系列性质，然后提出了一种判定图同构的搜索算法。这些研究具有一定的理论价值。将本文研究所得的结论应用于判别两个图是否同构的算法实现中，减少图同构搜索算法的置换次数，从而提高其效率，是下一步的工作。

参 考 文 献

[1] 傅彦, 顾小丰, 王庆先, 等编著. 离散数学及其应用 [M]. 高等教育出版社, 2007.

[2] Buckley F, Lewinter M. A Friendly Introduction to Graph Theory [M] 李慧霸 (译). 清华大学出版社, 2005.

[3] Brualdi RA. Introductory Combinatorics [M]. 罗平 (译). 北京: 机械工业出版社, 2005.

[4] Sedgewick R. Algorithms in C [M]. 周良忠 (译). 人民邮电出版社, 2004.