**图的同构问题算法研究**

摘要：图的同构问题一直受到数学界与工程技术界的关注，其原因主要来自两个方面：其一，从理论上讲，一般认为该问题属于 NP-完全问题；其二，图的同构问题具有很好的应用前景，在化学、运筹学、计算机科学、电子学、网络理论等诸多领域都有应用，但指数时间复杂度的算法以及算法本身适用对象的局限性使得涉及到复杂图形同构判定的应用问题难以入手。本文采用多次实验，数据分析的方式对算法进行分析，虽然取得了较好的结果，但从改进策略角度和问题判定准确性角度，各种算法仍有待改进的空间，这也是我们以后研究的重点和难点。

绪论：鉴于迄今为止，从同构图的性质理论方面出发，还没有关于图同构的多项式算法，仅仅通过穷举法使用计算机对问题求解，在面对规模较大的图的同构问题时非常困难。因此，一方面，我们继续对同构问题从图的性质入手研究。另一方面，对于解空间非常大的 NP 问题，智能算法有其不可替代的优势，智能算法是一种借鉴和利用自然界中自然现象或生物体的各种原理和机理而开发的并具有自适应环境能力的计算方法，衡量智能计算的智能程度的关键在于其处理对象时所表现出的学习能力的强弱。由于智能算法时建立在生物智能或物理现象的基础上的随机搜索算法，鉴于其自身的启发式随机运算，具有比现代数学规划方法更优越的特性，因此这类方法的研究也是最优化领域研究的重点。其优点是：（1）具有一般性及易于应用；（2）搜索最优解的速度快且易于获得满意结果。而这也正是本论文采用不同算法来求解同构问题的意义之所在。对于同构问题，本文并未对其理论进行深入探究，而是就实际应用中，同构问题的判定求解方法予以探讨，给出一些常规算法对问题进行求解的同时，结合智能算法的仿生优势，给出了几种智能算法在图同构问题中的应用。旨在通过这种探究，尝试寻找一种有效的、能够在实际应用中予以实现、应用的图同构问题的求解算法。图同构问题遗传算法在尚未找到多项式求解算法的情况下，智能算法的出现无疑为我们求解图同构问题开辟了一条新的途径，遗传算法便是其一，其内在的并行性，以及全局搜索能力 为我们求解组合优化问题提供了一个有力的工具，在本章，我们利用遗传算法的这一特性，提出了一种基于遗传算法的图同构判定算法，并对遗传算子进行有效的改进，最后我们针对不同问题使用该算法进行测试和分析。

2.1图的基本概念

所谓图是指有序三元组(V, E,ψ) ，其中V 非空，称为顶点集, E 称为边集,而ψ 是E 到V 中元素有序对或无序对族V ×V 的函数，称为关联函数。V 中元素称为顶点, E中元素称为边, ψ 刻划了顶点与边之间的关联关系。 在简单图(V, E,ψ) 中，由于起点为 x 且终点为 y 的边至多有一条，因此，边中可以直接用顶点对来表示，而关联函数ψ 就可以直接表示在其边集中，故可简记为(V, E )。设(V, E,ψ) 是图，V 中元素的个数v 和 E 中元素的个数ε 。图的矩阵表示：用图形表示图的方法，虽然直观、形象、便于理解，但是如果图比较复杂，从图形上分析图是不方便的。一般都用矩阵表示图，这种方法简单，使用方便，特别是它将图的问题变成了矩阵运算的问题，更适用于计算机进行计算和处理，所以矩阵法是分析图的一个最有力的工具。由于研究问题的出发点不同，图的矩阵表示也有多种形式。 阶方阵由定义可知：无向图的邻接矩阵为对称方阵，其对角线元素全为“0”(因为是简单图无自环)，每一行(列)中“1”的个数是对应顶点的度数。如果所有元素全为“0”，对应的是零图；除对角线外如所有元素全为“1”，则对应的是完全图。如果改变顶点的排列次序，相当于矩阵的行、列置换，矩阵的性质不变，因而所表示的图是不变的，所以我们可以选定顶点的一种排列次序，由它得到的邻接矩阵作为图的邻接矩阵。

2.2最大外平面图同构算法

定义 1：给定图G(V, E) ,若G 能画在一个平面上，使得除在顶点处外任意两条边不相交，且所有顶点都分布在图的外侧，则称图G 为外平面图。

定义 2：对外平面图 H ，若在图中加入任何一条边，都会使新图'H 为非外平面图，那么称图 H 为最大外平面图（Maximal Outerplanar Graph）,简记为 MOP 图。 MOP 图与三角形分平面凸多边形存在一一对应关系，因此我们可以把 MOP 图同构问题转述为三角形分凸多边形同构问题。三角形分凸多边形是一类计算几何问题，意味着在多边形内部添加非交叉斜线，将其分割为多个三角形。

2.3树图同构算法

树是带有一个根结点的图。两棵树的同构，当且仅当这两棵树根结点的孩子之间存在一一对应关系，并且以孩子结点为根的子树也同构，判定两棵树的同构问题可以转化成两个相关问题的判定，即：“图的同构”问题和“两颗树结点之间的对应关系”问题[7]。本章节提出的自底向上层次遍历结点（Bottom-Up Layer Traversing）的树同构问题判定算法（下面简称 BULT 算法）就是通过解决上述两个问题得到。

3 基于矩阵变换的同构算法

在上一节中，我们对具体的图的同构问题，给出了不同的多项式算法，但是这些方法都是针对有特定条件限制的图，对于一般意义上的图的同构问题，并不适用，因此在本节，我们给出一种基于矩阵变换的图的同构问题的判定算法，通过对矩阵的一系列操作，得到能够区分图顶点之间关系的权值，以此作为判定同构的条件，首先给出矩阵变换的定义。

3.1矩阵变换算法步骤

(1) 根据定义，求出同型矩阵GAA ，'GAA 。

(2) 根据同或异或距离计算方法求解两矩阵的行间同或矩阵',GGRA RA ，行间异或矩阵',GGRX RX 。

(3) 以图G =(V, E) 行间异或矩阵为参照(也可以是行间同或矩阵)，对GRX 的每一行，搜索'GRX 的所有行，找到一个匹配。若不存在相应匹配，则两图不同构。若匹配，转步骤（4）。

(4) 判断在邻接矩阵GA ，'GA 、行间同或矩阵',GGRX RX 中，是否存在同样的匹配，若匹配存在，则调整相应的矩阵中的行列，转步骤（3）搜索下一行匹配.若不成立，不同构，停止。

(5) 若所有行存在行行变换，则继续寻找顶点之间的一一对应关系。若顶点之间存在一一对应，则相应的同或、异或矩阵元素应相同。对行间异或矩阵的每一列，以行行交换后的GA 为基准参照，比较'GA ，寻找上三角矩阵中相同的列，然后交换对应的行列，最终得到矩阵的一一对应关系。

4 图同构问题遗传算法

虽然第三章提出的基于矩阵变换的图同构算法可以快速有效的判定两个图是否同构，但是该算法只是从矩阵变换的角度得到了区分不同矩阵特征的一个综合特征矩阵，并未从根本上在多项式时间内求得同构问题的解。 在尚未找到多项式求解算法的情况下，智能算法的出现无疑为我们求解图同构问题开辟了一条新的途径，遗传算法便是其一，其内在的并行性，以及全局搜索能力 为我们求解组合优化问题提供了一个有力的工具，在本章，我们利用遗传算法的这一特性，提出了一种基于遗传算法的图同构判定算法，并对遗传算子进行有效的改进，最后我们针对不同问题使用该算法进行测试和分析。

4.1 基本原理及步骤

遗传算法是一类借鉴生物界自然选择和自然遗传机制的随机化搜索算法，是根据生物进化思想而启发得出的一种全局优化算法。由于算法的简单通用、鲁棒性强、适用于并行处理以及应用范围广等显著特点，已成为智能计算的一个重要组成。 由于遗传算法是由进化论和遗传学机理而产生的直接搜索优化法，故而在这个算法中要用到各种进化和遗传学的概念。

4.2同构算法流程

结合两表不难看出，整个程序不但遗传算子内嵌有交叉、变异和两个逆转操作，而且遗传算法中还嵌有逆转操作。 交叉操作如前所述，该操作在进化初期起主要作用。使顶点映射编码尽快归于有序，体现在初期最优值迅速减小。但在后期作用不大。 在参考文献[14]中，将逆转操作归为一项变异技术，我们借用这一说法，那么，整个程序出现了四种变异，但各不相同。进化逆转操作是借鉴文献，随机选择逆转位，进行多次循环，多次逆转，这一操作能有效地提高搜索效率，但很容易使种群过早收敛，且十分耗时间。因此我们在程序中较少的使用，通过设定一个标定值 x，只有当运行多代后，种群没有改进时，才运行。小范围逆转操作中，逆转操作的字符串长度由 rc N 和一个设定常数 y 控制。rc N 越大，说明种群在大范围越趋于最佳状态。但在小范围上有待改进，因此通过设定常数 y, rc N 越大，逆转片断越小，进化也越有效。小范围逆转操作下限是近邻操作。近邻操作：任意选定一个逆转位，将该位与其相邻位逆转。这一操作越到进化后期，作用越明显。 变异操作：如前所述作用于进化初期，使种群多样化，扩大搜索空间。

综上所述，各种操作在整个进化过程中协同作用，但是交叉操作主要作用于进化初期；小范围逆转主要作用于进化中期；近邻操作主要作用于进化后期；而进化逆转操作主要作用于进化过于迟缓的阶段。在遗传算子中，我们先进行的是逆转变异操作，作所以这样选择，是考虑到：交叉、变异操作判断计算适应度变化时计算量较大，而小范围逆转、近邻逆转计算量较小， 图 4.4 图同构 GA 算法 故而对后者，如果有改进，我们保存其中间量；而对前者在“update”操作中，一起计算。这样，如果先进行交叉，在后期，由于对积累模式影响较大，又没有判定是否有所改进，势必会影响后面逆转操作的效果；而如果先逆转，后交叉，则不会有影响，即便交叉无效，逆转接过仍后交叉，则不会有影响，即便交叉无效，逆转接过仍会体现在下一代中。

全文总结

图同构问题作为图论组合中的一个重要问题，在机械设计、模式识别、电路设计等方面有着广泛而重要的应用，尤其是模式识别中的广泛应用，使得图的同构判定问题的求解显得尤为重要，作为一个著名的图论组合命题，现有的关于同构问题矩阵的研究进展，大多是针对某一特殊图进行的研究，在本文的撰写过程中，尚未看到相关的关于图同构问题的有效算法。本文所研究的内容主要体现在以下几个方面：

（1）在本文中，首先给出了一些特殊图，如最大外平面图、树图的同构问题的求解算法，这些算法已经被证明是可以在多项式时间内予以求解的，我们在给出证明的同时，也给出了其中的改进算法。

（2）给出了精确图同构的一种基于矩阵变换的算法，或者说常规算法，旨在通过算法的特殊操作求得问题的解，这一部分给出的算法可以有效的判定一些图的同构问题，但是，首先我们没有给出这些算法的充分性证明，其次，这些算法并不能作为解决同构问题的一个真正的多项式算法，我们给出该算法的目的，在于其在同构问题中的应用，可以在较少的时间，达到应用目的的判定。

（3） 为了弥补同构问题由于其在理论上的不能通过确定性图灵机在多项式时间内给出结果的缺陷，我们结合智能计算对同构问题进行一些有意义的探讨，首先给出了同构问题的遗传算法求解，结合遗传算法的内在并行性，对随机生成的规模解空间进行进化求解，并给出了改进算法，以及实验分析，该算法对于一般的图同构问题可以给出有效的结论，较之改进前的算法，求解质量上有着明显的改进。

（4）神经网络作为智能算法的一个重要组成部分，在本文中也给出了很好的求解方案，我们主要给出了一种基于 Hopfield 网络改进的模型，将神经网络与遗传算法有机结合起来，并给出了求解及其数据分析。

（5最后我们给出了最新的一种智能算法－粒子群算法在同构问题的应用，作为一种借鉴鸟儿觅食模型的新型算法，本文给出了它的离散粒子群模型，并结合同构问题的特殊性，给出了一种行之有效的基于离散粒子群模型的图同构算法。

参考文献

[1] Toran J. On the hardness of graph isomorphism. In: Proc. 41st Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS). Redondo Beach, CA, 2000. 180~186

[2] Beyer T., Jones W., Nitche S. Linear algorithms for isomorphism of maximal outer planar graph. Assoc. Comput., 1979, 26: 603~610

[3] Cole R., Crochemore M., Galil Z., et al. Optimally fast parallel algorithms for preprocessing and pattern matching in one and two dimensions. In: Proceedings of the 34th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS). 1993. 248~258

[4] Sen Gupta S., Sinha B. P. A simple O(log n) time parallel algorithm for testing isomorphism of maximal outerplanar graphs. Parallel Distrib.Comput., 1999, 144~155

[5] Buss S. R. A logtime algorithm for tree isomorphism, comparison and canonization . In: Proceedings of the 5th Kurt Codel Colloquium on Computational Logic and Proof Theory. 1997. 18~33

[6] Grossi R. A note on the subtree isomorphism for ordered tree and related problems. Information and processing letters, 1991, 49(2): 81~84

[7] Lindell S. A logspace algorithm for tree canonization. In: Proceedings of the 24th Annual ACM symposium on theory of computing. 1992. 400~404

[8] Reingold E. N., Nievergelt J., Deo N. Combinatorial algorithms: Theory and practice. New Jersey: Prentice Hall Inc. 1977

[9] Chachra V., Ghare V. P. Applications of graph theory algorithms. Elsevier: North Holland, 1979