《离散数学》

9-图的基本概念 (Basic concepts of graph)

杨启哲

上海师范大学信机学院计算机系

2024 年 11 月 11 日

主要内容

- 图的基本概念
- 图的基本性质
- 图的代数表示

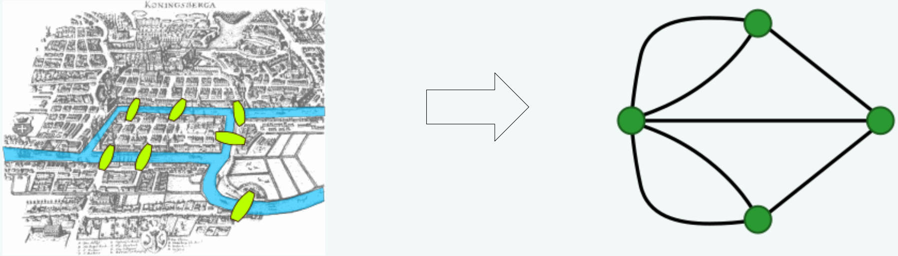
图的基本概念

图的历史

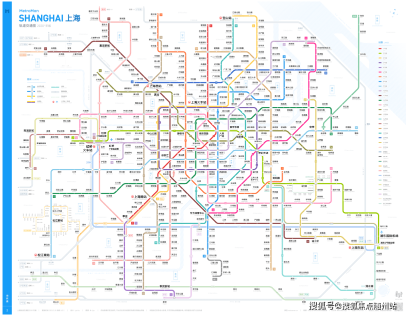
一般认为，欧拉于 1736 年出版的关于哥尼斯堡七桥问题的论文是图论领域的第一篇文章。

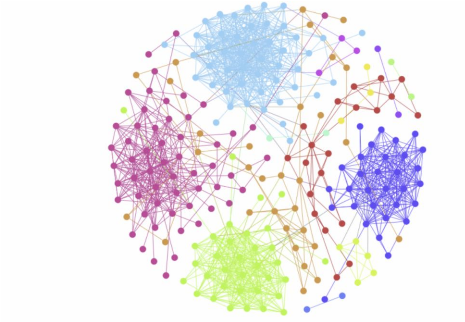
哥尼斯堡七桥问题 (königsberg Bridge Problem)

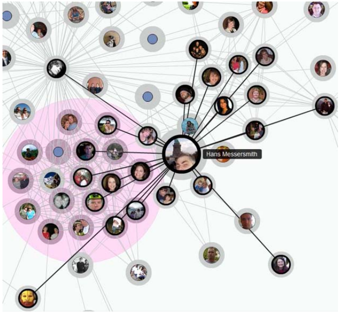
在 18 世纪，东普鲁士柯尼斯堡（今日俄罗斯加里宁格勒）市区跨普列戈利亚河两岸，河中心有两个小岛。小岛与河的两岸有七条桥连接。在所有桥都只能走一遍的前提下，如何才能把这个地方所有的桥都走遍?

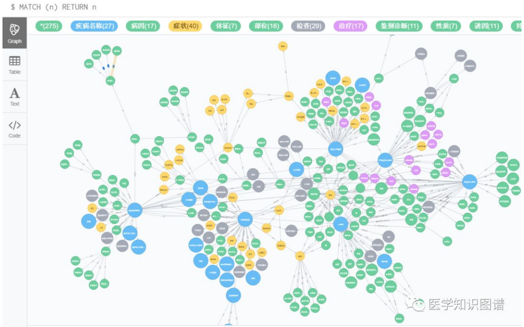


图无处不在！


MetroMan
SHANGHAI 上海
搜狐号@搜狐焦点随州站




Hans Messersmith


$ MATCH (n) RETURN n
*(275)
疾病名称(27)
病因(17)
症状(40)
体征(7)
部位(16)
检查(29)
治疗(17)
鉴别诊断(11)
性质(7)
诱因(11)
Graph
Table
Text
Code
医学知识图谱

图的基本定义

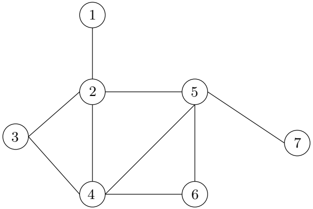
上海师范大学 Shanghai Normal University

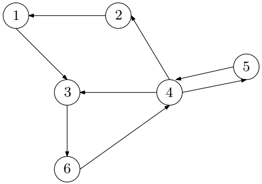
定义 1 **[图].**

一个图由一个顶点集合 V 和边集合 E 组成，记作 $G = (V, E)$，其中 $E \subseteq V \times V$ 是一个多重子集，也就是说允许有重复的元素出现。

图的种类

- 无向图：任何一条边都是无向的，即 $(u, v) \in E$ 和 $(v, u) \in E$ 等价。特别的，此时我们将其看成一个元素。
- 有向图：边存在方向，即 $(u, v) \in E$ 表示一条从 u 到 v 的边。





图应用-程序分析

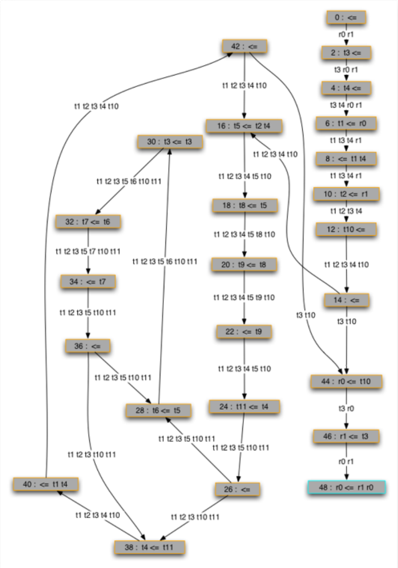
上海师范大学 Shanghai Normal University

一个程序实际上可以看成一张有向图：

- 顶点：程序中的语句。
- 边：程序中的跳转。

程序分析

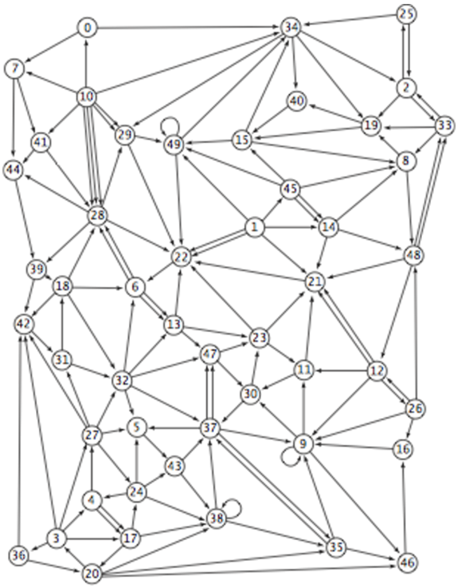
- 死码删除 (Dead-code elimination)
  寻找到无法遍历的点即可。
- 死循环检测 (Loop detection)
- 判断程序是否会终止?



图应用-网络爬虫

利用 BFS 爬取

- 用某个网页作为根节点
- 维护一个需要屈访问的队列
- 维护一个已经访问过网页的集合
- 弹出下一个待访问的网页并将其里面未访问的链接全部扔进队列里。



图的基本概念 (I)

给定一个图 $G=(V,E)$，V 是顶点集合，E 是边集合。

- 顶点数 $|V|$ 成为图的阶 (order)。
- 令 $e=(v_i,v_j)$ 表示 G 中的一条边，v_i 和 v_j 称为 e 的端点，并称 e 与 v_i,v_j 相关联。
  - 如果 G 是有向图，则进一步称 v_i 为 e 的始点，v_j 为 e 的终点。
  - 如果 $v_i=v_j$，则称其为一个自环 (自圈)。
- 如果两个有序顶点对之间存在多条边，即存在多个 $(u,v)\in E$，则称这些边是平行边，其数目称为图的重数。如果不存在平行边也不包含自环，则称这样的图为简单图。
- 如果 G 是一个有向图，将其所有边改为无向边，得到的图称为 G 的基图。

图顶点个数和边个数的记号

我们会用 $|V|,|E|$ 来表示图的顶点个数和边个数；在没有特别说明的情况下，我们也会使用 n,m 来表示图的顶点个数和边个数，即 $n=|V|$，$m=|E|$.

定义 2 **[节点的度数].**

给定图 $G = (V, E)$

- 若 G 是无向图，则称将边 v 作为端点的边的数目为 v 的度数 (degree)，记作 $d(v)$，特别的的如果 v 上有个自环，则该边对于度数的贡献为 2.
- 若 G 是有向图，则称将边 v 作为始点的边的数目为 v 的出度 (out-degree)，记作 $d^+(v)$；将边 v 作为终点的边的数目为 v 的入度 (in-degree)，记作 $d^-(v)$，v 的度数 $d(v)$ 则是出度与入度之和，即 $d(v) = d^+(v) + d^-(v)$。

没有边与 v 相关联的顶点称为孤立点，其度数为 0。

一些其他记号

对于无向图 G，我们用 $\Delta(G)$, $\delta(G)$ 分别表示 G 中最大和最小的度数，即:

$$\Delta(G) = \max_{v\in V} d(v),\ \delta(G) = \min_{v\in V} d(v)$$

有向图中我们也用 $\Delta^+(G)$, $\delta^+(G)$, $\Delta^-(G)$, $\delta^-(G)$ 分别表示最大和最小的出度和入度。

一些特殊的图

1. 零图：不含任何边的图，n 个顶点的空图记为 N_n。
2. 空图：不含任何点和任何边的图，记作 $\emptyset$。
3. 完全图：每对顶点之间都有边的无向图，n 个顶点的完全图记为 K_n。
4. 竞赛图：基图为完全图的有向图。
5. 正则图：每个顶点的度数都相同的无向图，特别的，如果度数为 k，则称其为 k-正则图。

上海师范大学 Shanghai Normal University

接下来我们来介绍图论的基本定理。

定理 3 **[握手定理].**

设 $G=(V,E)$ 是一个无向图，所有顶点度数之和等于边数的两倍，即：

$$\sum_{v\in V} d(v) = 2|E|$$

证明. 对于每条边 $e=(u,v)$，计算度数时 u 和 v 的度数都会 $+1$，因此每条边会贡献 2 的度数，所以总和为 $2|E|$。 □

推论 4.

任何一个无向图中度数为奇数的顶点的数目一定是偶数。

同样的，有向图中也可以得到类似的结论：

定理 5 **[有向图的握手定理].**

设 $G = (V, E)$ 是一个有向图，所有顶点的出度之和等于所有顶点的入度之和，即：

$$\sum_{v \in V} d^{+}(v) = \sum_{v \in V} d^{-}(v) = |E|$$

从而上述推论在有向图中也成立，即

推论 6.

任何一个图中度数为奇数的顶点的数目一定是偶数。

现在考虑一个 n 阶无向图 $G=(V,E)$，记 $V=\{v_1,...,v_n\}$，称 $(d(v_1),...,d(v_n))$ 为其的一个度数列：

- 显然，对于任意的无向图 G，我们可以产生一个非负整数组成的度数列。
- 给定一个非负整数的度数列，是否可以构造相应的无向图？

定理 7.

给定一个非负整数的度数列 $d=(d_1,...,d_n)$，则存在一个无向图 G，其度数列为 $(d_1,...,d_n)$ 当且仅当：

$$\sum_{i=1}^{n} d_i \equiv 0 \pmod 2$$

特别的如果存在相应的无向图，我们称 d 是可图化的，如果产生的图是简单图，则称 d 是可简单图化的。

可图化的充要条件证明. 必要性由握手定理直接可得。因此我们只需要证明充分性。由 $\sum_{i=1}^{n} d_i \equiv 0 \pmod 2$ 可知度数为奇数的顶点的数目一定是偶数，不妨假设为 $d_1, \dots d_{2k}$，现在我们构造一个图 $G = (V, E)$:

- $V = \{v_1, \dots, v_n\}$
- 对于前 2k 个顶点，我们先添加一条 (V_{2i}, v_{2i+1}) 的边。
- 对于 V 中的每个顶点 v_i，我们添加 $\lceil \frac{d_i}{2} \rceil$ 个自环。

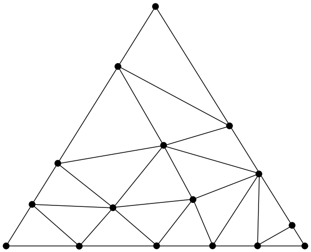
可以验证，这样构造的图的度数列为 $(d_1, \dots, d_n)$。 □

定理 8 **[可简单图化的必要条件].**

令 G 是一个简单无向图，则 $\Delta(G) \leqslant n - 1$.

握手定理的应用-2 维 Sperner 引理 (I)

我们来考虑这样一个问题：给定一个大的三角形，我们将其进行三角化，这里三角化是指将其分成若干个小三角形，使得每个小三角形的边要么落在大三角形边上，要么是其他小三角形的边，如下图所示：



现在考虑对其顶点染色，满足下列条件：

- 大三角形的三个顶点染成不同的颜色，分别标记为 $1, 2, 3$。
- 大三角形顶点倍染成 i 和 j 的那条边的其他顶点只能使用 i 和 j 两种颜色。
- 不在边上的顶点可以随意染色。

我们的问题是，可不可能存在一种染色方案，使得图中没有一个三角形是三个顶点颜色都不同的?

答案是不可以!

引理 9 **[2 维 Sperner 引理].**

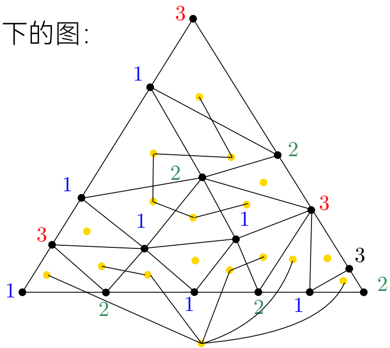
在任一种染色方案下，都存在一个三角形，其三个顶点颜色都不同。

证明. 假设存在一种染色方案使得不存在三色小三角形，即任何一个三角形的顶点至多只有两个颜色，考察其中异色边的数目:

- 任何一个三角形的异色边数目为 2 或者 0，因此总的异色边数目应该是偶数。
- 大三角形上边的异色边数目为奇数，而内部的异色边由于会被计算两次，因此总的异色边数目为偶数；从而所有异色边的数目为奇数，矛盾。

□

我们现在用握手定理给出一个巧妙的证明。我们构造一张如下的图：



- 在大三角形染色为 $1, 2$ 的边外构造一个点。
- 每个小三角形内部构造一个点。
- 如果两个点相连会与一条染色 $1, 2$ 的边相交，则将其相连。

我们有如下的事实：

事实 10.

如果一个内部点的度数是奇数，则其对应的三角形的三个顶点颜色都不同。

注意到外面的顶点度数一定是奇数，因此由握手定理一定存在一个内部点的度数是奇数，引理得证。 □

图的基本性质

定义 11 **[子图].**

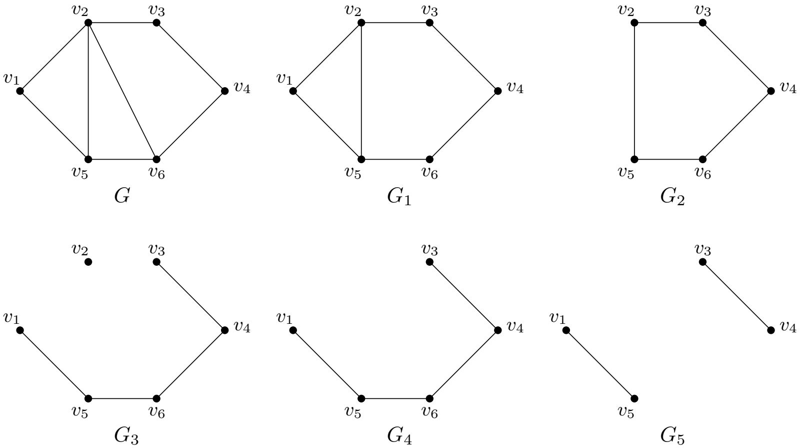
给定图 $G=(V,E)$，如果存在图 $G'=(V',E')$ 满足：$V'\subseteq V$，$E'\subseteq E$，则称 G' 是 G 的一个子图。

不同的子图

令 $G'=(V',E')$ 是 $G=(V,E)$ 的子图：

- G' 是 G 的平凡子图，如果 $G'=G$ 或 $G'=\emptyset$。
- G' 是 G 的真子图，如果其不是平凡的。
- G' 是 G 的生成子图 (支撑子图)，如果 $V'=V$。
- G' 是 G 的导出子图，如果 $E'=\{(u,v)\in E\mid u,v\in V'\}$，即 G' 蕴含了 G 中由 V' 产生的所有的边。

子图举例



- G_1，G_3 是 G 的生成子图。
- G_4，G_5 是 G 的导出子图。

图可以看成是顶点和边的集合，因此我们可以对图进行一些集合运算:

定义 12.

给定两个图 $G_1 = (V_1, E_1)$ 和 $G_2 = (V_2, E_2)$，定义如下的运算:

- 并 (union): $G_1 \cup G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$
- 交 (intersection): $G_1 \cap G_2 = (V_1 \cap V_2, E_1 \cap E_2)$
- 对称差 (symmetric difference): $G_1 \oplus G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \oplus E_2)$

图的运算 (II)

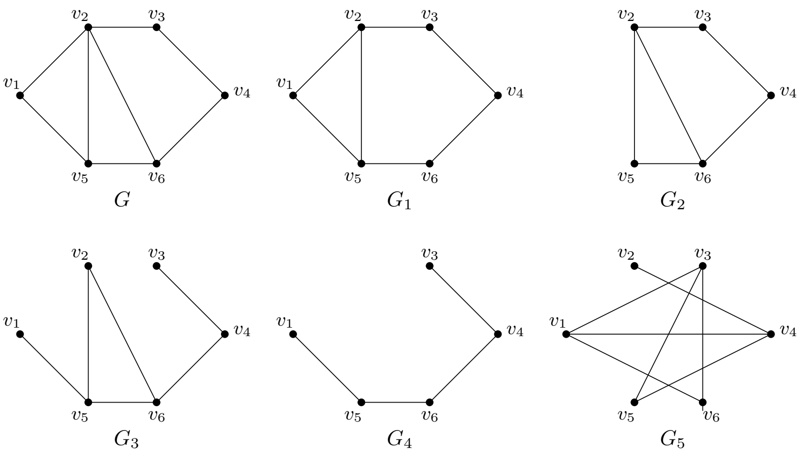
更常用的则是对于图上顶点和边进行增删的操作:

定义 13.

给定图 $G = (V, E)$，定义如下的运算:

- 增加边: 对我们可以添加一条边 (u, v)，这样得到的图记作 $G + (u, v)$。
- 删除顶点: 对于任意的 $u \in V$，我们可以删除顶点 u，以及所有与 u 相关联的边，这样得到的图记作 $G - u$。
- 删除边: 对于任意的 $u, v \in V$，如果 $(u, v) \in E$，则我们可以删除边 (u, v)，这样得到的图记作 $G - (u, v)$。
- 删除子图: 令 H 是 G 的子图，我们可以删除 H，即删去 H 中所有的边，这样得到的图记作 $G - H$。特别的，对于 n 阶简单图，定义 $K_n - G$ 为其补图。

图的增删举例



- $G_1 = G - (v_2, v_6)$, $G_2 = G - v_1$
- $G_3 = G - \{(v_2, v_6), (v_1, v_3)\}$, $G_4 = G - v_2$, $G_5 = K_6 - G$

我们再来刻画一下与一个顶点相关联的边的集合:

定义 14.

给定一个无向图 $G = (V, E)$，对于其中的一个顶点 $v \in V$，我们定义 v 的邻点集为:

$$N(v) = \{u \in V \mid (u, v) \in E\}$$

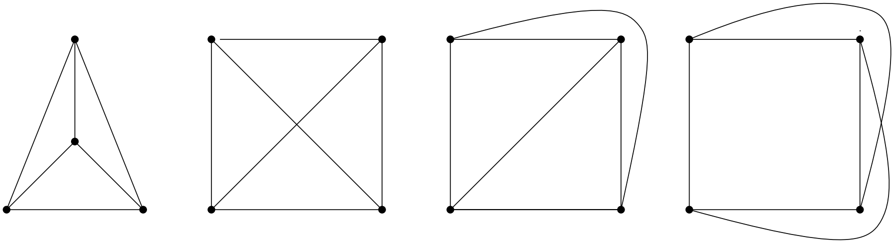
定义 15.

给定一个有向图 $G = (V, E)$，对于其中的一个顶点 $v \in V$，

- 定义 v 的后继元集为: $\Gamma^+(v) = \{u \mid (v, u) \in E \wedge u \neq v\}$。
- 定义 v 的先驱元集为: $\Gamma^-(v) = \{u \mid (u, v) \in E \wedge u \neq v\}$。

v 的邻点集$N(v)$ 则定义为 $\Gamma^+(v) \cup \Gamma^-(v)$。

下列图是不一样的么?

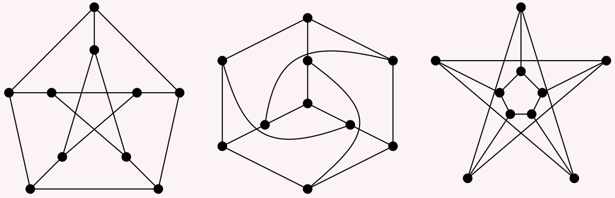


实际上它们是一样的，因为它们的边和点可以一一的对应起来。

定义 16 [图的同构 (Graph Isomorphism)].

给定两个图 $G_1 = (V_1, E_1)$ 和 $G_2 = (V_2, E_2)$，如果存在一个双射 $\phi : V_1 \to V_2$，使得对于任意的 $u, v \in V_1$，$(u, v) \in E_1$ 当且仅当 $(\phi(u), \phi(v)) \in E_2$，则称 G_1 和 G_2 是同构的，记作 $G_1 \simeq G_2$。

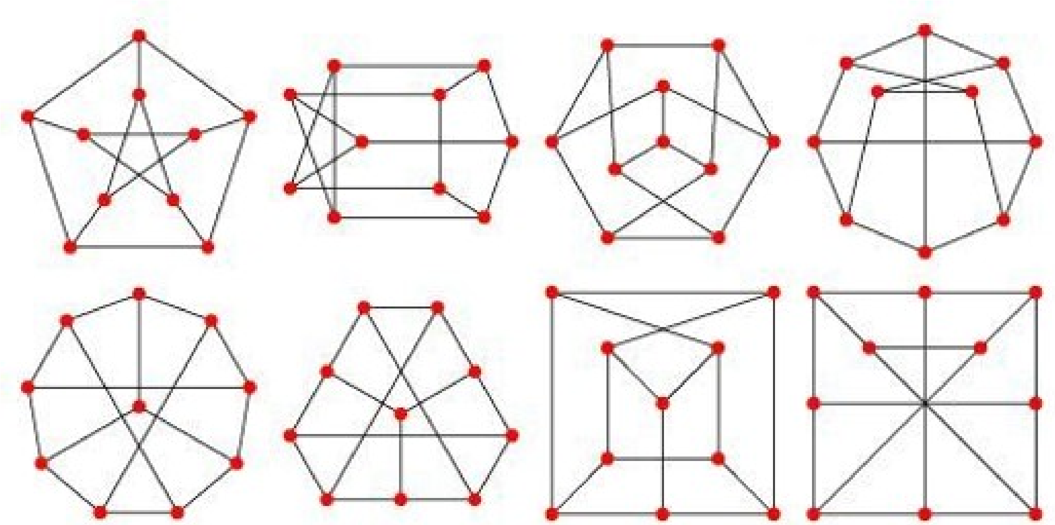
Peterson 图



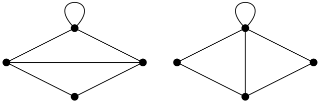
上述三个图是同构的，都被称为是 Peterson 图。

更多的 Peterson 图

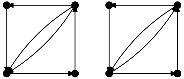
下面的图也全都是跟 Peterson 图同构的:



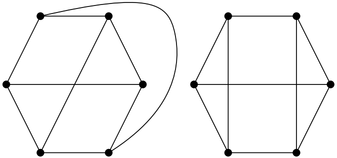
一些例子



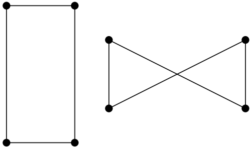
(1)



(2)



(3)



(4)

只有第 (4) 组是同构的!

图同构的判断

可以看到，如果两个图要同构，其要满足很多条件，比如：

- 顶点数相同，边数相同。
- 顶点的度数列相同。
- 存在同构的导出子图。

但是这些条件都不是充分条件，也就是说，如果两个图满足上述条件，它们不一定是同构的。

图同构的判断是困难的！

事实上目前还没有一个多项式时间的算法可以判断两个图是否同构。

- 目前最快的算法是匈牙利科学家 Babai 在 2015 年提出的拟多项式时间算法。
- 它的一个推广问题，即子图同构问题，判断是否存在一个图的子图和另一个图同构，是一个 NP 完全问题。

图的代数表示

我们首先用矩阵来表示图结点之间的邻接关系：

定义 17 **[邻接矩阵].**

给定 n 阶图 $G=(V,E)$，其中 $|V|=\{v_1,\ldots,v_n\}$。我们定义其邻接矩阵 $A(G)=(A_{ij})_{n\times n}$ 为：

- A_{ij} 表示 (v_i,v_j) 这条边的数量。
- 如果 G 是无向图，则 A_{ii} 表示 (v_i,v_i) 数目的两倍。

定义的解释

定义的第二点是为了统一：

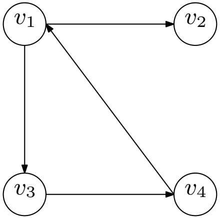
- 直观上我们希望 A_{ij} 表示从 i 到 j 的边的数目。对于无向图，(v_i,v_i) 是一个环，为了统一因此要计算两次。

简单图的邻接矩阵

定义 18 **[简单图的邻接矩阵].**

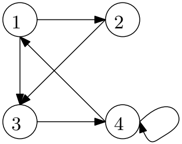
给定一个 n 阶简单图 $G=(V,E)$，我们定义其邻接矩阵 $A(G)=(A_{ij})_{n\times n}$ 为:

$$A_{ij}=\begin{cases}1 & \text{如果 } (v_i,v_j)\in E\\ 0 & \text{如果 } (v_i,v_j)\notin E\end{cases}$$

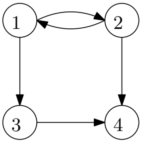


$$\begin{bmatrix}0&1&1&0\\0&0&0&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\end{bmatrix}$$

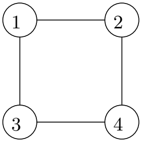
邻接矩阵的例子 (I)



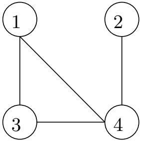
$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

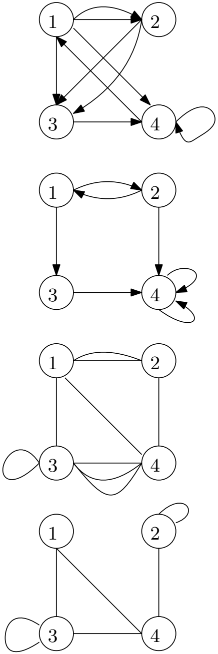


$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

邻接矩阵的例子 (II)



$$
\begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}
$$

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

$$
\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}
$$

事实 19.

对于图 $G=(V,E)$，$|V|=n$，$|E|=m$，其邻接矩阵 A 满足:

- 如果 G 是有向图，则对任意的 $i\in\{1,2,\ldots,n\}$ 有:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}=d^{+}(v_i),\ \sum_{j=1}^{n} a_{ji}=d^{-}(v_i)$$

- 如果 G 是无向图，则 A 是对称矩阵，特别的如果 G 是简单图，则对于任意的 $i\in\{1,2,\ldots,n\}$ 有:

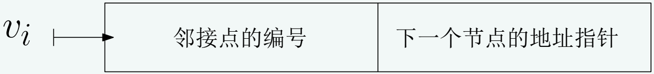
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}=\sum_{j=1}^{n} a_{ji}=d(v_i)$$

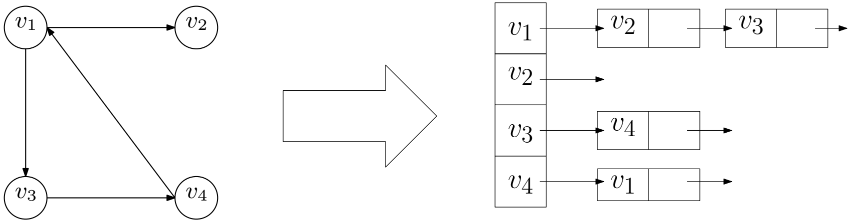
邻接表

在计算机中，还有一种方式来表示图，即邻接表：

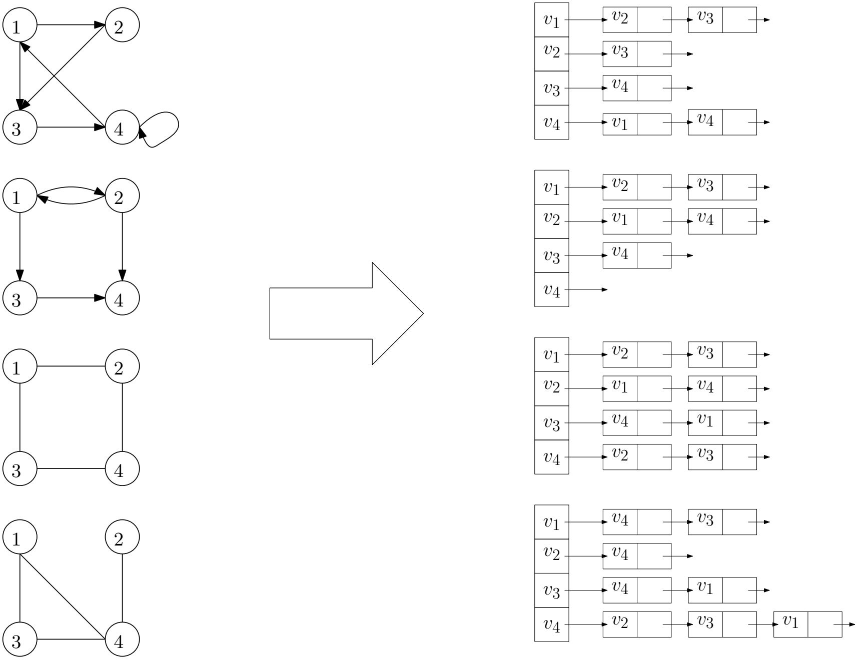
定义 20 **[邻接表].**

给定一个 n 阶图 $G=(V,E)$，其中 $|V|=\{v_1,\ldots,v_n\}$。我们定义其邻接表表示为每个顶点的一个链表组成的数组，链表中包含了所有与该顶点相关联的边。



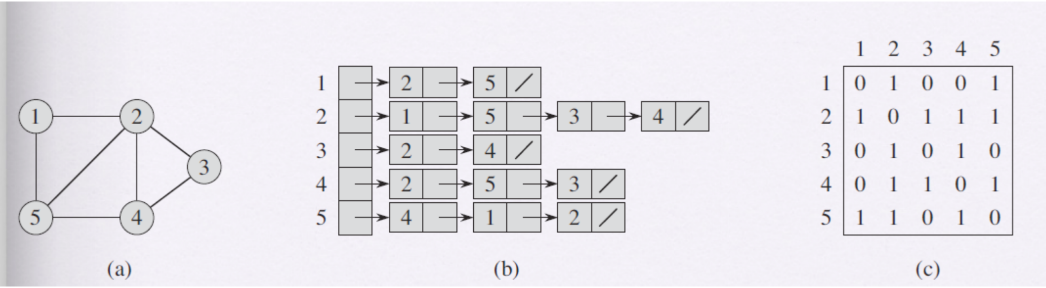


邻接表的例子



$v_1 \to v_2 \to v_3 \to$
$v_2 \to v_3 \to$
$v_3 \to v_4 \to$
$v_4 \to v_1 \to v_4 \to$
$v_1 \to v_2 \to v_3 \to$
$v_2 \to v_1 \to v_4 \to$
$v_3 \to v_4 \to$
$v_4 \to$
$v_1 \to v_2 \to v_3 \to$
$v_2 \to v_1 \to v_4 \to$
$v_3 \to v_4 \to v_1 \to$
$v_4 \to v_2 \to v_3 \to$
$v_1 \to v_4 \to v_3 \to$
$v_2 \to v_4 \to$
$v_3 \to v_4 \to v_1 \to$
$v_4 \to v_2 \to v_3 \to v_1 \to$

邻接矩阵 or 邻接列表?



图的两种表示:

- 邻接表: i 所对应的列表包含了所有 i 指向的边。
  - 无向图: $n + 2m$
  - 有向图: $n + m$
- 邻接矩阵: $G[i][j]$ 表示顶点 i 和顶点 j 之间是否有边。
  - 无向图: n^2
  - 有向图: n^2

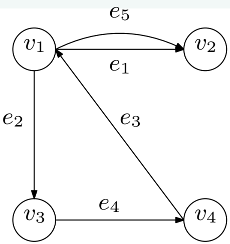
有向图关联矩阵

我们再用关联矩阵来表示图节点和边的关系:

定义 21 **[有向图的关联矩阵].**

给定一个无自环环的有向图 $G=(V,E)$，其中 $V=\{v_1,\dots,v_n\}$，$E=\{e_1,\dots,e_m\}$。我们定义其关联矩阵 $M(G)=(m_{ij})_{n\times m}$ 为:

$$m_{ij}=\begin{cases}1 & \text{如果 } e_j \text{ 的始点是 } v_i\\ -1 & \text{如果 } e_j \text{ 的终点是 } v_i\\ 0 & \text{如果 } e_j \text{ 与 } v_i \text{ 无关}\end{cases}$$



$$\begin{bmatrix}1 & 1 & -1 & 0 & 1\\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1\\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0\end{bmatrix}$$

事实 22.

给定一个无自环环的有向图 $G=(V,E)$，其中 $V=\{v_1,\ldots,v_n\}$，$E=\{e_1,\ldots,e_m\}$，其关联矩阵 $M(G)$ 满足:

- e_i 与 e_j 相同当且仅当其为平行边。
- 每一列恰好一个 1 和一个 -1，其余为 0。
- 定义如下两个集合:

$$M_+=\{m_{ij}\mid m_{ij}=1\},\ M_-=\{m_{ij}\mid m_{ij}=-1\}$$

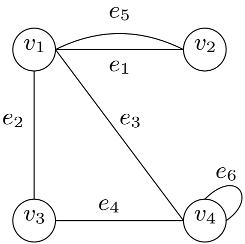
  则我们有: $|M_+|=|M_-|=m$.
- 对于任意的 $i\in\{1,2,\ldots,n\}$，有:
  1. $\sum_{m_{ij}>0} m_{ij}=d^+(v_i)$
  2. $\sum_{m_{ij}<0}(-m_{ij})=d^-(v_i)$

无向图的关联矩阵

定义 23 **[无向图的关联矩阵].**

给定一个无向图 $G=(V,E)$，其中 $V=\{v_1,\ldots,v_n\}$，$E=\{e_1,\ldots,e_m\}$。我们定义其关联矩阵 $M(G)=(m_{ij})_{n\times m}$ 为：

$$m_{ij}=\begin{cases}2 & \text{如果 } e_j=(v_i,v_i)\\ 1 & \text{如果 } e_j=(v_i,v_j) \text{ 或者 } (v_j,v_i)\\ 0 & \text{如果 } e_j \text{ 与 } v_i \text{ 无关}\end{cases}$$



$$\Rightarrow \begin{bmatrix}1&1&1&0&1&0\\1&0&0&0&1&0\\0&1&0&1&0&0\\0&0&1&1&0&2\end{bmatrix}$$

Shanghai Normal University

事实 24.

给定一个无向图 $G = (V, E)$，其中 $V = \{v_1, \ldots, v_n\}$，$E = \{e_1, \ldots, e_m\}$，其关联矩阵 $M(G)$ 满足：

- e_i 与 e_j 相同当且仅当其为平行边。
- 对任意的 $j \in \{1, 2, \ldots, m\}$ 有 $\sum_{i=1}^{n} m_{ij} = 2$.
- 对任意的 $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$ 有 $\sum_{j=1}^{m} m_{ij} = d(v_i)$.
- $\sum_{i=1}^{n} d(v_i) = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n} m_{ij} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} m_{ij} = 2m$
- $\sum_{j=1}^{m} m_{ij} = 0$ 当且仅当 v_i 是一个孤立点。

本章总结

- 图的基本概念
    - 有向图、无向图
    - 握手定理
- 图的基本性质
    - 子图、图的运算
    - 图的同构
- 图的代数表示
    - 邻接矩阵、邻接表
    - 关联矩阵