

简单无向图的同构判定方法

王卓¹ 王成红²

摘 要 给出了矩阵同构变换、简单无向图距离矩阵、距离矩阵列和向量以及图的距离谱的定义, 将基于邻接矩阵的同构判定条件推广到简单无向图距离矩阵. 针对简单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的同构判定条件; 进一步, 为避免计算误差对判定结果的影响, 给出了基于距离矩阵的秩与列和向量的同构判定条件. 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.

关键词 简单无向图, 同构判定条件, 距离矩阵列和向量, 图的距离谱, 特征多项式

引用格式 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

DOI 10.16383/j.aas.c230025

Isomorphism Determination Methods for Simple Undirected Graphs

WANG Zhuo¹ WANG Cheng-Hong²

Abstract This work gives the definitions of matrix isomorphic transformation, distance matrix of the simple undirected graph, column sum vector of the distance matrix, and distance spectrum of the graph, which extend the adjacency matrix-based isomorphism determination conditions to the distance matrix-based ones for simple undirected graphs. For the isomorphism determination problem of simple undirected connected graphs: One determination condition based on the characteristic polynomial of distance matrix is proposed; Further, another determination condition based on the rank and the column sum vector of distance matrix is proposed to avoid the influence of calculation error on the determination result. These two determination conditions are both necessary and sufficient conditions and both have polynomial time complexity.

Key words Simple undirected graphs, isomorphism determination conditions, column sum vector of distance matrix, distance spectrum of graph, characteristic polynomial

Citation Wang Zhuo, Wang Cheng-Hong. Isomorphism determination methods for simple undirected graphs. *Acta Automatica Sinica*, 2023, 49(9): 1878–1888

图的同构判定在化学分析、计算机科学、人工智能以及智能决策与控制等领域有着广泛的应用^[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及其性质、邻接矩阵 (拉普拉斯矩阵) 特征值及其应用展开^[4], 取得了若干重要的理论成果和一大批应用成果.

上世纪 70 年代, Karp、Garey 和 Johnson 等认为图的同构判定问题是少数几个既不能归类为 P , 也不能归类为 NP 的问题^[1, 3]. 自此之后, 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 使用有限群等数学工具给出了一个当时最好的两图同构判定算法, 该算法的时间复杂度是 $\exp(O(\sqrt{n \log n}))$ (n 为图的顶点数)^[5–6]. 此后 40 年来, 图的同构判定问题引起了众多学者的关注, 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 在 Luks 算法的基础上, 利用群作用下轨道间的局部关系和群的正则分解技术, 给出了两图同构判定问题的拟多项式算法, 该算法的时间复杂度是 $\exp((\log n)^{O(1)})$ ^[5]. 上述算法的目的在于给出同构判定问题的复杂度上界, 并不能直接用于具体图的同构判定^[6]. 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].

图的同构判定问题的另一研究路径是设计可执行的具体判定算法, 大致可以分为传统判定算法和非传统判定算法两种情况. 传统判定算法有两类: 1) 针对一些特殊图 (如树和极大外平面图等)^[7–8] 的同构判定算法 (如 Ullman 算法、Schmidt 算法、

收稿日期 2023-01-18 录用日期 2023-07-22

Manuscript received January 18, 2023; accepted July 22, 2023

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 孙健

Recommended by Associate Editor SUN Jian

1. 北京航空航天大学仪器科学与光电工程学院 北京 100191 2. 国家自然科学基金委员会 北京 100083

1. School of Instrumentation and Optoelectronic Engineering, Beihang University, Beijing 100191 2. National Natural Science Foundation of China, Beijing 100083

Falkenhainer 算法和 Messmer 算法等)^[9]. 这些算法主要使用“搜索、标号和回溯”技术且被证明具有多项式时间复杂度; 2) 针对一般简单图的判定算法, 如一些放在因特网上用于测试两图是否同构的程序 (如 Nauty、Saucy、Bliss、Conauto 和 Traces 等)^[3, 5]. 这些程序运行速度很快, 但算法的时间复杂度分析和正确性证明却没有公开报道. 非传统判定算法也有两类: 1) 基于遗传算法、神经网络和粒子群算法等的智能同构判定算法. 这些算法将图的同构判定问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) 基于生物 (DNA) 计算^[9] 和量子计算的判定算法. 这类算法虽然高效, 但实现比较困难而且也不能回答图的同构判定是 P 还是 NP 问题.

本文的主要思路和贡献是: 1) 给出了矩阵同构变换和简单无向图距离矩阵的定义, 将基于邻接矩阵的同构判定条件推广到简单无向图距离矩阵. 2) 针对简单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的同构判定条件. 因用数值方法求解特征多项式会产生计算误差, 故该判定条件仅适合中小规模简单无向连通图的同构判定^[10-11]. 3) 为避免计算误差对判定结果的影响, 给出了简单无向连通图距离矩阵列和向量与图的距离谱的定义, 并进而给出了基于距离矩阵的秩与列和向量的同构判定条件. 该判定条件不产生计算误差, 因而适合大规模简单无向连通图的同构判定. 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, 将这些条件用于简单无向不连通图的各个连通子图, 就可解决简单无向不连通图的同构判定问题.

1 相关概念和预备知识

1.1 相关概念

若仅考虑顶点间的邻接关系和拓扑结构, 则图可视为由若干个顶点和若干条边连接成的网络.

定义 1^[4, 12-13]. 图 G 是一个二元组, 记作 $G = \langle V, E \rangle$, 其中:

- 1) $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n \mid |V| = n, n \geq 1\}$, $v_i \in V$ 称为 G 的顶点, V 称为 G 的顶点集;
- 2) $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m \mid |E| = m, m \geq 0\}$, $e_j \in E$ 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) 连接同一个顶点的边称为自环, 两个顶点间的多条无向边或多条方向相同的有向边称为重边.

无自环和重边的图称为简单图, 否则称为复杂图.

本文分析和讨论的图均是顶点和边为有限数的无向图.

定义 2^[12-14]. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 为无向图, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. 若顶点 v_i 和 v_j ($1 \leq i, j \leq n$) 之间有 k ($k \geq 0$ 为非负整数) 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.

在定义 2 中, $k = 0$ 表示无边, $a_{ii} = k$ 表示顶点 v_i 有 k 个自环. 如此, 定义 2 既适合简单无向图也适合复杂无向图.

定义 3^[4, 12-14]. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 为无向图, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ ($n \geq 2$), $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ ($m \geq 1$). 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 中的任意两个顶点, 当 v_i 和 v_j 之间有 s 条路 W_p ($1 \leq p \leq s$) 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 $d(v_i, v_j) = \infty$. 3) 称 $d(G) = \max\{d(u, v) \mid u, v \in V\}$ 为 G 的直径.

图的同构问题可以这样表述: 给定两个图, 当忽略图中顶点的标号、顶点间的相对位置、边的长短和曲直信息时, 问这两个图是否具有相同的结构? 现有文献中关于简单图的同构定义已有多^[4, 13-14], 这些定义虽然表述略有不同但彼此等价. 下面, 我们给出一个既适合简单图又适合复杂图的同构定义.

定义 4^[4]. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个无向 (有向) 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 条无向 (有向) 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 条无向 (有向) 边, 则称 G_1 和 G_2 同构, 记作 $G_1 \cong G_2$.

1.2 预备知识

定义 5^[15]. 设 $I_n \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为单位矩阵, 交换 I_n 的第 i 行与第 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^[15]. 对换矩阵和置换矩阵具有如下性质:

- 1) $\det(P(i, j)) = -1$, $P^{-1}(i, j) = P(i, j)$;
- 2) 置换矩阵的乘积仍是置换矩阵;
- 3) 设 Q 是置换矩阵, 则 $\det(Q) = \pm 1$;
- 4) 设 Q 是置换矩阵, 则 Q^T 和 Q^{-1} 也是置换矩阵, 且 $Q^T = Q^{-1}$;
- 5) 置换矩阵是正交矩阵;
- 6) 置换矩阵是幂等矩阵, 即若 Q 是置换矩阵, 则 $Q^m = I_n$, m 是自然数.

由引理 1 中的性质 2) 和性质 6) 可知, 对换矩阵和 I_n 也是置换矩阵.

定义 6. 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.

任给一个无向 (有向) 图 $G = \langle V, E \rangle$, $|V| = n \geq 2$. 对 V 中每个顶点指定一个 $1 \sim n$ 的标号, 可以得到一个标号向量 $\pi_i^T = [\sigma_{i1} \ \sigma_{i2} \ \cdots \ \sigma_{in}] \in \mathbf{R}^{1 \times n}$ ($\{\sigma_{i1}, \cdots, \sigma_{in}\}$ 是 $\{1, 2, \cdots, n\}$ 的一个置换) 和一个邻接矩阵 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$. 设 π_1 和 π_2 是 V 的任意两个标号向量, A 与 B 分别是图 G 相应于 π_1 和 π_2 的邻接矩阵. 当 $\pi_1 = \pi_2$ 时, $A = B$; 当 $\pi_1 \neq \pi_2$ 时, $A \neq B$ (或 $A = B$).

设 $\pi_1 \neq \pi_2$. 逐次不重复地对调 π_1 中两个分量的位置 (对换两个顶点的标号), 经有限次对调就可将 π_1 变成 π_2 , 同时将 A 变成 B . 对调顶点 v_i 与 v_j 的标号, π_1 将变为 $P(i, j)\pi_1$ ($P(i, j)$ 为对换矩阵), A 将变为 $P(i, j)AP^T(i, j)$. 其中, $P(i, j)AP^T(i, j)$ 是对调 A 的第 i 行和第 j 行之后, 再对调第 i 列和第 j 列所得的矩阵. 设顶点标号经 m ($m \geq 1$) 次对调之后 π_1 变成 π_2 , 并且第 s ($1 \leq s \leq m$) 次对调所对应的对换矩阵为 P_s , 则 $\pi_2 = P_m P_{m-1} \cdots P_1 \pi_1 = Q \pi_1$ ($Q = P_m P_{m-1} \cdots P_1$), $B = P_m P_{m-1} \cdots P_1 A P_1^T \cdots P_m^T \times P_m^T = Q A Q^T$. 由引理 1 可知, $Q \in \Omega$ 为置换矩阵. 如此, $\pi_1 = Q^T \pi_2$, $A = Q^T B Q$.

由上述分析和定义 6 可知: 任给无向图 G , 若 A 和 B 是 G 的两个邻接矩阵, 则存在置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A = Q^T B Q$, 即同一图的任意两个邻接矩阵彼此同构; 邻接矩阵的行列同时互换是同构变换, 邻接矩阵的同构变换还是邻接矩阵.

引理 2^[12]. 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 $A = Q^T B Q$, 或 $A = Q^{-1} B Q$.

证明. 设存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A = Q^T B Q$. 由定义 6 可知, $Q^T B Q$ 是对 B 的同构变换. 因邻接矩阵的同构变换还是同一图的邻接矩阵, 故 $A = Q^T B Q$ 是 G_2 的邻接矩阵. 如此, G_1 和 G_2 有相同的邻接矩阵 A , 即 G_1 和 G_2 是同一个图; 换言之, $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 当 G_1 和 G_2 同构时, B 可经有限次行列同时互换转化为 A , 即存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $A = Q^T B Q$. $\square$

引理 2 表明, 两个图同构当且仅当该两图的邻接矩阵同构; 若两个图有相同的邻接矩阵, 则这两

个图同构. 容易证明, 引理 2 中的 Q 是唯一的.

2 简单无向图的同构判定方法

由定义 3 可知, 复杂无向图中的自环和多重边中的重边对顶点间的距离没有影响. 为区分起见, 本节仅讨论简单无向图.

定义 7. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 是简单无向图, $V = \{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$, $d_{ij} = d(v_i, v_j)$ 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 $D(d_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为简单无向图 G 的顶点距离矩阵, 简称 G 的距离矩阵.

因 $i \neq j$ 时, $d(v_i, v_j) = d(v_j, v_i)$, 所以 $d_{ij} = d_{ji}$, 简单无向图 G 的距离矩阵 D 是对称矩阵. 与邻接矩阵一样, 顶点标号不同时, G 的距离矩阵通常也互不相同.

定理 1. 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 $G_1 \cong G_2$ 的充要条件是存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $D_1 = Q^T D_2 Q$, 或 $D_1 = Q^{-1} D_2 Q$.

证明. 设存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $D_1 = Q^T D_2 Q$. 因 $Q \in \Omega$, 由定义 6 可知, $Q^T D_2 Q$ 是对 D_2 的同构变换. 因 $Q^T D_2 Q$ 只改变 D_2 行与列的排列而不改变 D_2 的元素, 故 $Q^T D_2 Q = D_1$ 也是 G_2 的距离矩阵. 同理, $D_2 = Q D_1 Q^T$ 也是 G_1 的距离矩阵. 如此, D_1 和 D_2 既是 G_1 的距离矩阵也是 G_2 的距离矩阵. 设 G_1 的顶点标号向量为 π_1 , 相应的距离矩阵和邻接矩阵分别是 D_1 和 A_1 ; G_2 的顶点标号向量为 π_2 , 相应的距离矩阵和邻接矩阵分别是 D_2 和 A_2 . 因 D_1 和 D_2 均是 G_1 的距离矩阵, 类似第 1.2 节的分析可得, 当 $D_1 = Q^T D_2 Q$ 时, $\pi_1 = Q^T \pi_2$, $A_1 = Q^T A_2 Q$. 如此, 若存在 $Q \in \Omega$, 使得 $D_1 = Q^T D_2 Q$, 则 $A_1 = Q^T A_2 Q$. 由引理 2 可知, $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 由引理 2 可知, 存在 $Q \in \Omega$, 使得 $A_1 = Q^T A_2 Q$. 同上分析可得, 当 $A_1 = Q^T A_2 Q$ 时, $\pi_1 = Q^T \pi_2$, $D_1 = Q^T D_2 Q$. 这表明, 若 $G_1 \cong G_2$, 则存在 $Q \in \Omega$, 使得 $D_1 = Q^T D_2 Q$, 或 $D_1 = Q^{-1} D_2 Q$. $\square$

定理 1 表明, 两个简单无向图同构当且仅当这两个图的距离矩阵同构; 距离矩阵的同构变换还是距离矩阵; 距离矩阵的同构性与邻接矩阵的同构性保持一致.

不难理解, 定理 1 即是引理 2 在简单无向图距

离矩阵上的推广.

设 $G = \langle V, E \rangle$ 是简单无向连通图, $|V| = n \geq 2$, $D(d_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是 G 的距离矩阵. 由定义 7 可知, D 是对角线元素均为零而其他元素全为正整数的对称矩阵. 由定义 3 和定义 7 可知, G 的直径可由 D 的元素求取, 即 $d(G) = \max \{d_{ij} | 1 \leq i, j \leq n\}$. 此外, 由 D 的元素还可求出 G 中各顶点的离心率和 G 的半径^[4, 13].

定义 8. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 是简单无向连通图, $D(d_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是 G 的距离矩阵, $d_j = \sum_{i=1}^n d_{ij}$ ($1 \leq j \leq n$); 对 d_j 进行升序排列, 可得 $d_o(D) = [\bar{d}_1 \ \bar{d}_2 \ \cdots \ \bar{d}_n]$ ($\bar{d}_1 \leq \bar{d}_2 \leq \cdots \leq \bar{d}_n$), 则 $d_o(D)$ 是 D 的列元素之和按升序排列所得的向量, 简称 $d_o(D)$ 是 D 的列和向量.

推论 1. 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; 若 $d_o(D_1) \neq d_o(D_2)$, 则 G_1 和 G_2 不同构.

证明. 设 $d_o(D_1) \neq d_o(D_2)$ 时, $G_1 \cong G_2$. 由定理 1 可知, 当 $G_1 \cong G_2$ 时, 存在 n 阶置换矩阵 $Q \in \Omega$, 使得 $D_1 = Q^T D_2 Q$. 设 $E_1 = \{d_1^{(1)}, d_2^{(1)}, \dots, d_n^{(1)}\}$ 与 $E_2 = \{d_1^{(2)}, d_2^{(2)}, \dots, d_n^{(2)}\}$ 分别是 D_1 和 D_2 列元素之和构成的集合. 因同构变换只改变矩阵列的排序而不改变列元素之和, 故在不考虑 E_2 元素的排序时, $Q^T D_2 Q$ 列元素之和构成的集合仍是 E_2 . 如此, 当 $G_1 \cong G_2$ 时, $D_1 = Q^T D_2 Q$, $E_1 = E_2$ (两集合相等当且仅当它们的元素一一对应相等), E_1 和 E_2 元素的升序排列相等, 即 $d_o(D_1) = d_o(D_2)$, 与推论 1 条件矛盾, 则 $G_1 \cong G_2$ 的假设不成立. 综上所述, 当 $d_o(D_1) \neq d_o(D_2)$ 时, G_1 和 G_2 不同构. $\square$

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; $\Omega^- = \{-S | S \in \Omega\}$ 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 $Q \neq EP^T$, $QP, PQ \in \Theta$.

引理 3^[15]. 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 2. 设 $A(a_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$) 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 $\forall P \in \Theta$, $P^T A P$ 不是正整数矩阵 ($P^T A P$ 的元素不全是正整数).

证明. 当 $n = 2$ 时, 设

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a \\ a & 1 \end{bmatrix}, P = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

其中, a 为正整数, $\theta \in \mathbf{R}$. 如此,

$$P^T A P = \begin{bmatrix} 1 - a \sin 2\theta & a \cos 2\theta \\ a \cos 2\theta & 1 + a \sin 2\theta \end{bmatrix}$$

当 $\theta \neq \pm l\pi$ ($l = 0, 1, 2, \dots$) 时, $P \in \Theta$, $P^T A P$ 不是正整数矩阵. 当 $P \in \Theta$ 时, 由定义 9 和引理 3 可知, 对一切 2 阶正交矩阵 $E \in \Phi$, $C \in T$ 且 $C \neq EP^{-1}$, 则: 1) $Q_1 = CP \in \Theta$, $Q_2 = PC \in \Theta$, $Q_3 = C^T PC \in \Theta$; 2) $Q_1^T A Q_1$, $Q_2^T A Q_2$ 和 $Q_3^T A Q_3$ 均不是正整数矩阵. 故对一切 2 阶正交矩阵 $Q \in \Theta$, $Q^T A Q$ 不是正整数矩阵.

当 $n = 3$ 时, 设

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a_1 & a_2 \\ a_1 & 1 & a_3 \\ a_2 & a_3 & 1 \end{bmatrix}, P = \begin{bmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

其中, a_1, a_2, a_3 为正整数, $\delta = \pm 1$, $\theta \in \mathbf{R}$. 如此,

$$P^T A P = \begin{bmatrix} 1 & \alpha_1(\theta)\delta & \alpha_2(\theta)\delta \\ \alpha_1(\theta)\delta & 1 - \alpha_3(\theta) & \alpha_3 \cos 2\theta \\ \alpha_2(\theta)\delta & \alpha_3 \cos 2\theta & 1 + \alpha_3(\theta) \end{bmatrix}$$

其中, $\alpha_1(\theta) = a_1 \cos \theta - a_2 \sin \theta$, $\alpha_2(\theta) = a_1 \sin \theta + a_2 \cos \theta$, $\alpha_3(\theta) = a_3 \sin 2\theta$. 当 $\delta = 1$ 且 $\theta \neq \pm 2l\pi$ ($l = 0, 1, 2, \dots$), 或 $\delta = -1$ 且 $\theta \neq \pm h\pi$ (h 为奇数) 时, $P \in \Theta$, $P^T A P$ 不是正整数矩阵. 类似 $n = 2$ 时的分析可得, 对一切 3 阶正交矩阵 $Q \in \Theta$, $Q^T A Q$ 不是正整数矩阵.

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, $A_{11} \in \mathbf{R}^{s \times s}$, $A_{22} \in \mathbf{R}^{t \times t}$, $A_{33} \in \mathbf{R}^{2k \times 2k}$ 均是

对角线元素为 1 而其他元素为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; P_θ 和 H_θ 为形如引理 3 中的矩阵, $s+t+2k=n$, $\theta_j \in \mathbf{R}$ ($1 \leq j \leq k$) 为实数. 如此,

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

当 $s=n$ 或 $1 \leq s < n$, $t=0$ 且所有的 $\theta_j = \pm 2l\pi$ ($1 \leq j \leq k$, $l=0, 1, 2, \dots$), 或 $s=t=0$ 且所有的 $\theta_j = \pm 2l\pi$ ($1 \leq j \leq k$, $l=0, 1, 2, \dots$) 时, $P_\theta = I_n \in \Omega$; 当 $t=n$, 或 $1 \leq t < n$, $s=0$ 且所有的 $\theta_j = \pm h\pi$ ($1 \leq j \leq k$, h 为奇数), 或 $t=s=0$ 且所有的 $\theta_j = \pm h\pi$ ($1 \leq j \leq k$, h 为奇数) 时, $P_\theta = -I_n \in \Phi$. 当 s, t, k 和 θ_j ($1 \leq j \leq k$) 的取值不是前两种情况时, $P_\theta \in \Theta$, $P_\theta^T A P_\theta$ 不是正整数矩阵. 当 $P \in \Theta$ 时, 由定义 9 和引理 3 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: 1) $Q_1 = ZP \in \Theta$, $Q_2 = PZ \in \Theta$, $Q_3 = Z^T PZ \in \Theta$; 2) $Q_1^T A Q_1$, $Q_2^T A Q_2$, $Q_3^T A Q_3$ 均不是正整数矩阵. 如此, 对一切 $n \geq 4$ 阶正交矩阵 $Q \in \Theta$, $Q^T A Q$ 不是正整数矩阵.

综合上述各种情况可得, 当 $n \geq 2$ 时, $\forall P \in \Theta$, $P^T A P$ 不是正整数矩阵. $\square$

此外, 不难证明, 当 $n \geq 2$ 时, $\forall Q \in \Phi$, $Q^T A Q$ 是正整数矩阵.

引理 4^[15]. 设 $A, B \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为对称矩阵, 则 $\det(\lambda I_n - A) = \det(\lambda I_n - B)$ 的充要条件是存在正交矩阵 $P \in T$, 使得 $A = P^T B P = P^{-1} B P$.

基于定理 1、定理 2 和引理 4, 下面给出两个简单无向连通图是否同构的判定条件.

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 $\det(\lambda I_n - D_1) = \det(\lambda I_n - D_2)$.

证明. 设 $\det(\lambda I_n - D_1) = \det(\lambda I_n - D_2)$. 因 D_1 和 D_2 均是实对称矩阵, 由引理 4 可知, 当 $\det(\lambda I_n - D_1) = \det(\lambda I_n - D_2)$ 时, 存在 n 阶正交矩阵 $P \in T$, 使得 $D_1 = P^T D_2 P$. 下面证明, $\forall n \geq 2$, $P \in \Omega$ (或 $P = -S$, $S \in \Omega$). 假设存在一个 $P \in \Theta$, 使得 $D_1 = P^T D_2 P$, 则 $I_n + D_1 = P^T P + P^T D_2 P = P^T (I_n + D_2) P$. 因 $I_n + D_1$ 和 $I_n + D_2$ 均是正整数矩阵, 故 $P^T (I_n + D_2) P$ 也是正整数矩阵, 这与定理 2 的结论矛盾. 如此, $P \notin \Theta$. 因 $\Theta \cap \Phi = \emptyset$, $\Theta \cup \Phi = T$, 故当 $P \in T$ 且 $P \notin \Theta$ 时, 必有 $P \in \Phi$. 换言之, $\forall n \geq 2$, 当 D_1 和 D_2 均是距离矩阵且 $\det(\lambda I_n - D_1) = \det(\lambda I_n - D_2)$ 时, 一定存在 $P \in \Omega$ (或 $P = -S$, $S \in \Omega$), 使得

$D_1 = P^T D_2 P$. 由定理 1 可知, $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 由定理 1 可知, 存在 n 阶置换矩阵 $P \in \Omega$, 使得 $D_1 = P^T D_2 P$. 如此, $\det(\lambda I_n - D_1) = \det(\lambda I_n - D_2)$. $\square$

需要强调的是, 距离矩阵特征多项式和邻接矩阵特征多项式是两种完全不同的多项式; 邻接矩阵特征多项式相等并不总能确定两个简单无向连通图 (特别是无向树) 同构^[4, 16]. 设 $B \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是简单无向连通图的邻接矩阵, 因 $I_n + B$ 一般不是正整数矩阵 (完全图除外, 完全图的邻接矩阵等于其距离矩阵), 故定理 3 的充分性证明方法不能用于邻接矩阵.

因求解距离矩阵 D ^[13-14] 和特征多项式 $\det(\lambda I_n - D)$ ^[10-11] 均有多项式时间算法, 故定理 3 的判定条件具有多项式时间复杂度.

因用数值方法求解特征多项式会产生计算误差^[10-11], 故当图的规模很大时, 这种计算误差可能会对定理 3 的判定结果产生影响. 因此, 寻找一种无误差判定条件无疑具有重要的应用价值.

推论 2. 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; 若 $r(D_1) \neq r(D_2)$ ($r(D)$ 表示 D 的秩), 则 G_1 和 G_2 不同构.

证明. 因 D_1 和 D_2 均是实对称矩阵, 故 D_1 和 D_2 的特征值均是实数^[15, 17]. 设 D_1 和 D_2 的非零特征值个数分别是 r_1 和 r_2 , λ_i ($1 \leq i \leq r_1$) 和 μ_j ($1 \leq j \leq r_2$) 分别是 D_1 和 D_2 的非零特征值, 则存在 n 阶正交矩阵 $P_1, P_2 \in T$, 使得

$$P_1^T D_1 P_1 = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{r_1}, 0, \dots, 0\}$$

$$P_2^T D_2 P_2 = \text{diag}\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{r_2}, 0, \dots, 0\}$$

如此可得, $r(D_1) = r(P_1^{-1} D_1 P_1) = r_1$, $r(D_2) = r(P_2^{-1} D_2 P_2) = r_2$. 当 $r(D_1) \neq r(D_2)$ 时, D_1 和 D_2 的非零特征值个数不相等, $\det(\lambda I_n - D_1) \neq \det(\lambda I_n - D_2)$. 由定理 3 可知, G_1 和 G_2 不同构. $\square$

定义 10. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 是简单无向连通图, $|V| = n \geq 2$, $D(d_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是 G 的距离矩阵, $d(G) = \max\{d_{ij}\}$ 是 G 的直径, m_s 是 $d_{ij} = s$ ($1 \leq s \leq d(G)$, $1 \leq i, j \leq n$) 的元素总数; 称 $d_s(D) = [m_1 \ m_2 \ \dots \ m_{d(G)}]$ 是 G 的距离谱向量, 简称 G 的距离谱.

由定义 7 和定义 10 可知: m_s 均是正整数, $\sum_{i,j} d_{ij} = \sum_{s=1}^{d(G)} m_s s$, $\sum_{i,j} d_{ij}^2 = \sum_{s=1}^{d(G)} m_s s^2$.

推论 3. 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; 若 $d_s(D_1) \neq d_s(D_2)$, 则 G_1 和 G_2 不同构.

证明. 设 $d_s(D_1) \neq d_s(D_2)$ 时, $G_1 \cong G_2$. 由定理

1 可知, 当 $G_1 \cong G_2$ 时, 存在 $Q \in \Omega$, 使得 $D_1 = Q^T \times D_2 Q$. 因同构变换不改变图的距离谱, 故 $d_s(D_1) = d_s(Q^T D_2 Q) = d_s(D_2)$, 即 $d_s(D_1) = d_s(D_2)$, 与推论 3 的条件矛盾, $G_1 \cong G_2$ 的假设不成立. 换言之, 当 $d_s(D_1) \neq d_s(D_2)$ 时, G_1 和 G_2 不同构. $\square$

由推论 1 ~ 3 可知, $d_o(D_1) = d_o(D_2)$, $r(D_1) = r(D_2)$, $d_s(D_1) = d_s(D_2)$ 均是两个简单无向连通图同构的必要条件.

定义 11^[17]. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$), 若存在 n 阶置换矩阵 $P \in \Omega$, 使得

$$P^T A P = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$$

其中, A_{11} 是 $k \times k$ ($1 \leq k \leq n-1$) 阶子矩阵, A_{22} 是 $(n-k) \times (n-k)$ 阶子矩阵, 则称 A 是可约矩阵; 否则, 称 A 是不可约矩阵.

由定义 7 和定义 11 可知, 简单无向连通图的距离矩阵 D 是非负不可约矩阵.

定义 12^[17]. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是非负不可约矩阵且有 k 个模等于 $\rho(A)$ 的特征值: 若 $k=1$, 则称 A 是素矩阵; 若 $k>1$, 则称 A 是指数为 k 的循环矩阵.

引理 5^[17]. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是非负不可约矩阵, 则 A 为素矩阵的充要条件是存在某正整数 m , 使得 $A^m > 0$ (A^m 的所有元素大于零).

容易证明, 当 $n \geq 3$ 时, 一切距离矩阵 D 均是素矩阵 ($D^2 > 0$).

引理 6^[17]. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 是素矩阵, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 是 A 的特征值, 则谱半径 $\rho(A) > 0$ 是 A 的单特征值, 且对一切 $|\lambda_i| \neq \rho(A)$, 均有 $|\lambda_i| < \rho(A)$.

引理 7^[17]. 设 $A(a_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 为正规矩阵 ($A^T A = A A^T$), $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 是 A 的特征值, 则 $\sum_{i=1}^n a_{ij}^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2$.

设 $r(D) = k$, $\Delta_k = \Delta_{r(D)}$ 表示 D 的所有 k 阶主子式的和. 使用符号 Δ_k 并依据引理 5 ~ 7, 可以得到简单无向连通图的另一个同构判定条件.

定理 4. 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 $d_s(D_1) = d_s(D_2)$, $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)}$.

证明. 当 $n=2$ 时, 定理 4 的结论显然成立. 设 $D_1 = D(a_{ij})$, $D_2 = D(b_{ij})$, 下面证明 $n \geq 3$ 时, 定理 4 的结论也成立.

设 $d_s(D_1) = d_s(D_2)$, $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)}$. 当 $d_s(D_1) = d_s(D_2)$ 时, 由定义 10 可得, $d(G_1) = d(G_2)$, $\sum_{s=1}^{d(G_1)} m_s s^2 = \sum_{i,j} a_{ij}^2$, $\sum_{s=1}^{d(G_2)} m_s s^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2$, $\sum_{i,j} a_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2$. 因 D_1 和 D_2 均是对称

矩阵和素矩阵, 故当 $r(D_1) = r(D_2) = m$ 且 $\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)} = \Delta$ 时, 可设 D_1 的非零特征值和特征多项式分别为

$$\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{m-1} < \lambda_m \quad (\lambda_m = \rho(D_1) > 0)$$

$$f_1(\lambda) = 0^{n-m} (\lambda^m + \dots + a_1 \lambda + (-1)^m \Delta)$$

D_2 的非零特征值和特征多项式分别为

$$\mu_1 \leq \dots \leq \mu_{m-1} < \mu_m \quad (\mu_m = \rho(D_2) > 0)$$

$$f_2(\mu) = 0^{n-m} (\mu^m + \dots + b_1 \mu + (-1)^m \Delta)$$

由 $\sum_{i,j} a_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2$ 和引理 7 可得, $\sum_{i=1}^m \lambda_i^2 = \sum_{i=1}^m \mu_i^2$. 因 D_1 和 D_2 的对角线元素全为零, 故由特征值和特征多项式系数之间的关系可得, $\sum_{i=1}^m \lambda_i = \sum_{i=1}^m \mu_i = 0$, $\prod_{i=1}^m \lambda_i = \prod_{i=1}^m \mu_i = \Delta$. 如此,

$$\sum_{i=1}^m (\lambda_i - \mu_i) (\lambda_i + \mu_i) = 0 \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^m (\lambda_i - \mu_i) = 0 \quad (2)$$

$$\prod_{i=1}^m \lambda_i = \prod_{i=1}^m \mu_i = \Delta \quad (3)$$

不难发现, $\lambda_i = \mu_i$ ($1 \leq i \leq m$) 是上述 3 个方程的一组公共解. 下面分 4 步证明该组解是唯一解.

1) $\forall n \geq 3$ 和 $1 \leq i \leq m$, 设 $\bar{\lambda}_i = -\mu_i$. 因已假设 $\mu_1 \leq \dots \leq \mu_{m-1} < \mu_m$ ($\mu_1 < 0$), 且 $\forall i \neq m, |\mu_i| < \mu_m = \rho(D_2) > 0$; 故 $\bar{\lambda}_1 \geq \dots \geq \bar{\lambda}_{m-1} > \bar{\lambda}_m$, $\bar{\lambda}_1 > 0$ 且 $\bar{\lambda}_m < 0$. 因 $\bar{\lambda}_1 = |\mu_1| < \mu_m = |\bar{\lambda}_m|$, 即 $\bar{\lambda}_1 < |\bar{\lambda}_m|$, 由引理 6 可知, $\bar{\lambda}_i$ ($1 \leq i \leq m$) 不是或不全是对称素矩阵 D_1 的特征值. 如此, $\bar{\lambda}_i = -\mu_i$ ($1 \leq i \leq m$) 不可能是式 (1), (2), (3) 的公共解.

2) $\forall n \geq 3$ 和 $\forall l \in \{1, \dots, m-1\}$, 若设 $\bar{\lambda}_i = -\mu_i$ ($1 \leq i \leq l$), $\bar{\lambda}_j = \mu_j$ ($l+1 \leq j \leq m$), 则 $\bar{\lambda}_i$ 和 μ_i 是式 (1) 的解, $\sum_{i=1}^m \bar{\lambda}_i = \sum_{i=1}^m \mu_i - 2 \sum_{i=1}^l \mu_i$. 因 $\sum_{i=1}^m \mu_i = 0$ 且 $l < m$, 故 $\sum_{i=1}^l \mu_i \neq \sum_{i=1}^m \mu_i$, $\sum_{i=1}^m \bar{\lambda}_i = -2 \sum_{i=1}^l \mu_i \neq 0$. 如此, $\bar{\lambda}_i$ ($1 \leq i \leq m$) 不是或不全是 D_1 的特征值, 式 (2) 和式 (3) 均不成立.

3) $\forall \varepsilon \in \mathbf{R}$ 且 $\varepsilon \neq 0$; $\forall i \neq j$, $t \neq i$ 且 $t \neq j$; 设 $\bar{\lambda}_t = \lambda_t$, $\bar{\lambda}_i = \lambda_i - \varepsilon$, $\bar{\lambda}_j = \lambda_j + \varepsilon$, $\bar{\mu}_t = \mu_t$, $\bar{\mu}_i = \mu_i - \varepsilon$, $\bar{\mu}_j = \mu_j + \varepsilon$, 则 $\bar{\lambda}_t$ 和 $\bar{\mu}_t$ ($1 \leq t \leq m$) 满足式 (2), 但不能同时满足式 (1) 和式 (3).

4) 若有奇数个 $|\lambda_i| \neq |\mu_i|$ ($1 \leq i \leq m$), 则式 (1) ~ (3) 均不成立; 若有偶数个 $|\lambda_i| \neq |\mu_i|$ (如 $\lambda_i = \alpha \mu_i$, $\lambda_j = \alpha^{-1} \mu_j$, $\alpha \neq 1$) 使得式 (3) 成立, 则式 (1) 和式 (2) 均不成立.

综合上述 4 种情况可知, $\lambda_i = \mu_i$ ($1 \leq i \leq m$)

是同时满足式 (1) ~ (3) 的一组唯一解. 如此, $\forall n \geq 3$, $\det(\lambda I_n - D_1) = \det(\lambda I_n - D_2)$.

总之, $\forall n \geq 2$, 当 $d_s(D_1) = d_s(D_2)$, $r(D_1) = r(D_2)$ 并且 $\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)}$ 时, $\det(\lambda I_n - D_1) = \det(\lambda I_n - D_2)$. 由定理 3 可知, $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 由定理 1 可知, 当 $G_1 \cong G_2$ 时, 存在 n 阶置换矩阵 $P \in \Omega$, 使得 $D_1 = P^T D_2 P$. 因 $d_s(D)$, $r(D)$ 和 $\Delta_{r(D)}$ 均在矩阵同构变换下保持不变, 故当 $D_1 = P^T D_2 P$ 时, $d_s(D_1) = d_s(D_2)$, $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)}$. $\square$

当图的顶点数 n 很大且 $r(D)$ 接近 $0.5n$ 时, 求解 $\Delta_{r(D)}$ 的计算量将异常大. 因此, 还需寻找更易计算的同构判定条件.

定理 5. 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 $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $d_o(D_1) = d_o(D_2)$.

证明. 当 $n = 2$ 时, 定理 5 的结论显然成立. 下面证明 $n \geq 3$ 时, 定理 5 的结论也成立. 为方便起见, 下面仍使用证明定理 4 时所用的符号和术语.

设 $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $d_o(D_1) = d_o(D_2)$, 但 G_1 和 G_2 不同构. 由定理 4 的证明可知, 若 $r(D_1) = r(D_2) = m$ 且 $d_o(D_1) = d_o(D_2)$ 时, G_1 和 G_2 不同构, 则对称素矩阵 D_1 与 D_2 的非零特征值的绝对值 $|\lambda_i|$ 和 $|\mu_i|$ ($1 \leq i \leq m$) 不全部相等, $\sum_{i=1}^m \lambda_i^2 \neq \sum_{i=1}^m \mu_i^2$. 由引理 7 可知, 当 $\sum_{i=1}^m \lambda_i^2 \neq \sum_{i=1}^m \mu_i^2$ 时, $\sum_{i,j}^n a_{ij}^2 \neq \sum_{i,j}^n b_{ij}^2$. 由定义 7 和定义 10 可知, 当 $\sum_{i,j}^n a_{ij}^2 \neq \sum_{i,j}^n b_{ij}^2$ 时, $\sum_{s=1}^{d(G_1)} m_s s^2 \neq \sum_{t=1}^{d(G_2)} m_t t^2$, $d_s(D_1) \neq d_s(D_2)$, $\sum_{i,j}^n a_{ij} \neq \sum_{i,j}^n b_{ij}$. 如此, $d_o(D_1) \neq d_o(D_2)$, 与假设矛盾, G_1 和 G_2 不同构的假设不成立. 换言之, 若 $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $d_o(D_1) = d_o(D_2)$, 则 $G_1 \cong G_2$.

设 $G_1 \cong G_2$. 由定理 1 可知, 当 $G_1 \cong G_2$ 时, 存在 n 阶置换矩阵 $P \in \Omega$, 使得 $D_1 = P^T D_2 P$. 因 $r(D)$ 和 $d_o(D)$ 均是矩阵同构变换下的不变量, 故当 $D_1 = P^T D_2 P$ 时, $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $d_o(D_1) = d_o(D_2)$. $\square$

因距离矩阵 D 是非负整数矩阵, 故求解 $r(D)$ 和 $d_o(D)$ 均不会产生计算误差. 如此, 定理 5 为无误差判定条件. 此外, 因求解 $\det(\lambda I_n - D)$ 比求解 $r(D)$ 和 $d_o(D)$ 困难得多, 故定理 5 比定理 3 在计算便利性方面更具优势. 上述两个优点表明, 定理 5 更适合大规模简单无向连通图的同构判定.

定理 5 主要涉及 3 种运算, 求解距离矩阵 $D \in \mathbf{R}^{n \times n}$, $r(D)$ 以及 $d_o(D)$. 现对定理 5 的算法复杂度做一些简要说明: 1) 用 Floyd 算法^[14] 求解 D 的算法复杂度是 $O(n^4)$, 用 Warshall 算法^[14] 求解 D 的算法复杂度是 $O(n^3)$; 2) 求解 $r(D)$ 的算法复杂度

是 $O(n^3)$ ^[11]; 3) 由定义 8 和排序算法可知, 求解 $d_o(D)$ 的算法复杂度是 $O(1.5n^2)$; 4) 比较 $d_o(D_1)$ 和 $d_o(D_2)$ 是否相等的算法复杂度是 $O(n)$. 总之, 使用定理 5 判定两个简单无向连通图是否同构的算法复杂度不会超过 $O(2n^4)$.

引理 8^[8]. 设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$) 具有如下分块形式:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

其中, A_{11} 是 $k \times k$ ($1 \leq k \leq n-1$) 阶子矩阵, A_{22} 是 $(n-k) \times (n-k)$ 阶子矩阵. 若 A_{11} 可逆, 则 $\det(A) = \det(A_{11}) \det(A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12})$.

定理 6. 设 $G = \langle V, E \rangle$ 是无向树, $|V| = n \geq 2$, D 是 G 的距离矩阵, 则 $\det(D) = (-1)^{n-1} (n-1) 2^{n-2}$.

证明. 1) 设 $D_k \in \mathbf{R}^{k \times k}$ ($k \geq 2$) 为无向树的距离矩阵. 经直接验证可得^[16]: $n = 2$ 时, $r(D_2) = 2$, $\det(D_2) = -1$; $n = 3$ 时, $r(D_3) = 3$, $\det(D_3) = 4$ (2 顶点和 3 顶点无向树只有 1 个自同构类); $n = 4$ 时, $r(D_4) = 4$, $\det(D_4) = -12$ (4 顶点无向树有 2 个自同构类). 上述结果表明, $2 \leq n \leq 4$ 时, $\det(D) = (-1)^{n-1} (n-1) 2^{n-2}$, $r(D) = n$ 且与树的拓扑结构无关.

2) 设 $n = k$ ($k \geq 5$) 时, $r(D_k) = k$, $\det(D_k) = (-1)^{k-1} (k-1) 2^{k-2}$ 且与树的拓扑结构无关; 下面证明, $n = k+1$ 时, $r(D_{k+1}) = k+1$, $\det(D_{k+1}) = (-1)^k k \times 2^{k-1}$ 且与树的拓扑结构无关. 设 $n = k+1$ 时, G 的距离矩阵为

$$D_{k+1} = \begin{bmatrix} D_k & \varsigma \\ \varsigma^T & 0 \end{bmatrix}$$

其中, $\varsigma^T = [\varsigma_1 \ \varsigma_2 \ \cdots \ \varsigma_k]$, ς_i ($1 \leq i \leq k$) 为正整数. 因已假设 $r(D_k) = k$, 故 $\det(D_k) \neq 0$, D_k 可逆. 由引理 8 可得, $\det(D_{k+1}) = -\det(D_k) \det(\varsigma^T D_k^{-1} \varsigma)$. 因 ς 为正整数向量并且 $D_k^{-1} \neq 0$, 故 $\det(\varsigma^T D_k^{-1} \varsigma) \neq 0$, $\det(D_{k+1}) = (-1)^k k \times 2^{k-1}$, $r(D_{k+1}) = k+1$, 且与树的拓扑结构无关.

由归纳步骤 1) 和步骤 2) 可得, 对一切无向树的距离矩阵 $D \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ($n \geq 2$), $\det(D) = (-1)^{n-1} (n-1) 2^{n-2}$. $\square$

推论 4. 设 $G_1 = \langle V_1, E_1 \rangle$ 和 $G_2 = \langle V_2, E_2 \rangle$ 是两个无向树, $|V_1| = |V_2| = n \geq 2$, 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 $d_s(D_1) = d_s(D_2)$.

证明. 因 G_1 和 G_2 均为无向树且 $|V_1| = |V_2| = n \geq 2$, 故由定理 6 可知, $r(D_1) = r(D_2) = n$, 且

$$\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)} = (-1)^{n-1} (n-1) 2^{n-2}$$

恒成立, 即 $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)}$ 恒成立.

如此, “ $d_s(D_1) = d_s(D_2)$ 、 $r(D_1) = r(D_2)$ 且 $\Delta_{r(D_1)} = \Delta_{r(D_2)}$ ”与“ $d_s(D_1) = d_s(D_2)$ ”等价. 因无向树是简单无向连通图, 由定理 4 立即可得, 无向树 $G_1 \cong G_2$ 的充要条件是 $d_s(D_1) = d_s(D_2)$. $\square$

有了推论 4, 两个无向树的同构判定问题就变为一个简单的算术问题.

不难理解, 将定理 3 特别是定理 5 用于简单无向不连通图的各个连通子图或将推论 4 用于无向森林的各个无向树, 就可解决任意简单无向不连通图的同构判定问题.

例 1. 试判定下列各对应图 (如图 1 所示) 是否同构.

解. 1) G_1 和 G_2 均是无向树 (毛虫形^[4, 16, 19]), 按图中顶点标号, 经计算可得 G_1 和 G_2 的距离矩阵分别为

$$D_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 2 & 1 & 1 & 3 & 3 & 2 & 4 & 3 \\ 1 & 2 & 0 & 3 & 3 & 1 & 1 & 4 & 2 & 5 \\ 2 & 1 & 3 & 0 & 2 & 4 & 4 & 1 & 5 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 2 & 0 & 4 & 4 & 3 & 5 & 4 \\ 2 & 3 & 1 & 4 & 4 & 0 & 2 & 5 & 1 & 6 \\ 2 & 3 & 1 & 4 & 4 & 2 & 0 & 5 & 3 & 6 \\ 3 & 2 & 4 & 1 & 3 & 5 & 5 & 0 & 6 & 1 \\ 3 & 4 & 2 & 5 & 5 & 1 & 3 & 6 & 0 & 7 \\ 4 & 3 & 5 & 2 & 4 & 6 & 6 & 1 & 7 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 3 & 3 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 2 & 1 & 3 & 1 & 2 & 2 & 4 & 5 \\ 1 & 2 & 0 & 3 & 1 & 3 & 4 & 4 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 & 0 & 4 & 2 & 1 & 1 & 5 & 6 \\ 2 & 3 & 1 & 4 & 0 & 4 & 5 & 5 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 2 & 4 & 0 & 3 & 3 & 5 & 6 \\ 3 & 2 & 4 & 1 & 5 & 3 & 0 & 2 & 6 & 7 \\ 3 & 2 & 4 & 1 & 5 & 3 & 2 & 0 & 6 & 7 \\ 3 & 4 & 2 & 5 & 1 & 5 & 6 & 6 & 0 & 1 \\ 4 & 5 & 3 & 6 & 2 & 6 & 7 & 7 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

由 D_1 和 D_2 可得,

$$d_s(D_1) = [18 \quad 20 \quad 18 \quad 16 \quad 10 \quad 6 \quad 2]$$

$$d_s(D_2) = [18 \quad 20 \quad 18 \quad 12 \quad 10 \quad 8 \quad 4]$$

因 $d_s(D_1) \neq d_s(D_2)$, 由推论 3 或推论 4 均可判定 G_1 和 G_2 不同构.

此外, G_1 和 G_2 的邻接矩阵同谱, 即 $\phi(G_1, \lambda) = \phi(G_2, \lambda) = \lambda^{10} - 9\lambda^8 + 26\lambda^6 - 27\lambda^4 + 8\lambda^2$. 若将邻接矩阵特征多项式相等作为判据来判定 G_1 和 G_2 是否同构^[16, 19], 就会得出错误的结果.

2) G_3 和 G_4 均是 3 正则无向图 (Wagner 图^[1, 20]). 按图中顶点标号, 经计算可得 G_3 和 G_4 的距离矩阵分别为

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

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

因为 $\det(\lambda I_8 - D_3) = \det(\lambda I_8 - D_4) = (\lambda - 11)(\lambda + 1)(\lambda + 3)^2(\lambda^2 + 2\lambda - 1)^2$, 故由定理 3 可以判定 $G_3 \cong G_4$.

另一方面, 因 $r(D_3) = r(D_4) = 8$; $d_o(D_3) = [11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11]$, $d_o(D_4) = [11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11 \quad 11]$, $d_o(D_3) = d_o(D_4)$; 由定理 5 可轻松判定 $G_3 \cong G_4$.

3) G_5 和 G_6 均是 3 正则简单无向连通图^[3]. 按图中顶点标号, 经计算可得 G_5 和 G_6 的距离矩阵分别为

$$D_5 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 1 & 2 & 3 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 3 & 1 & 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 3 & 1 & 3 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 0 & 2 & 1 & 3 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 1 & 2 & 0 & 3 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 3 & 1 & 3 & 0 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 1 & 3 & 2 & 2 & 0 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 3 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_6 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 1 & 3 & 3 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 1 & 3 & 1 & 3 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 3 & 1 & 3 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 1 & 3 & 0 & 2 & 2 & 2 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 3 & 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 3 & 2 & 2 & 0 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 2 & 2 & 1 & 3 & 1 & 1 & 0 & 2 \\ 3 & 2 & 2 & 2 & 3 & 1 & 1 & 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

经计算可得, $\det(D_5) = 0$, $\det(D_6) = -4352$. 因 $\det(D_5) \neq \det(D_6)$, 由定理 3 可以判定 G_5 和 G_6 不同构.

因 $d_s(D_5) = d_s(D_6) = [30 \quad 40 \quad 20]$, 但 $r(D_5) \neq$

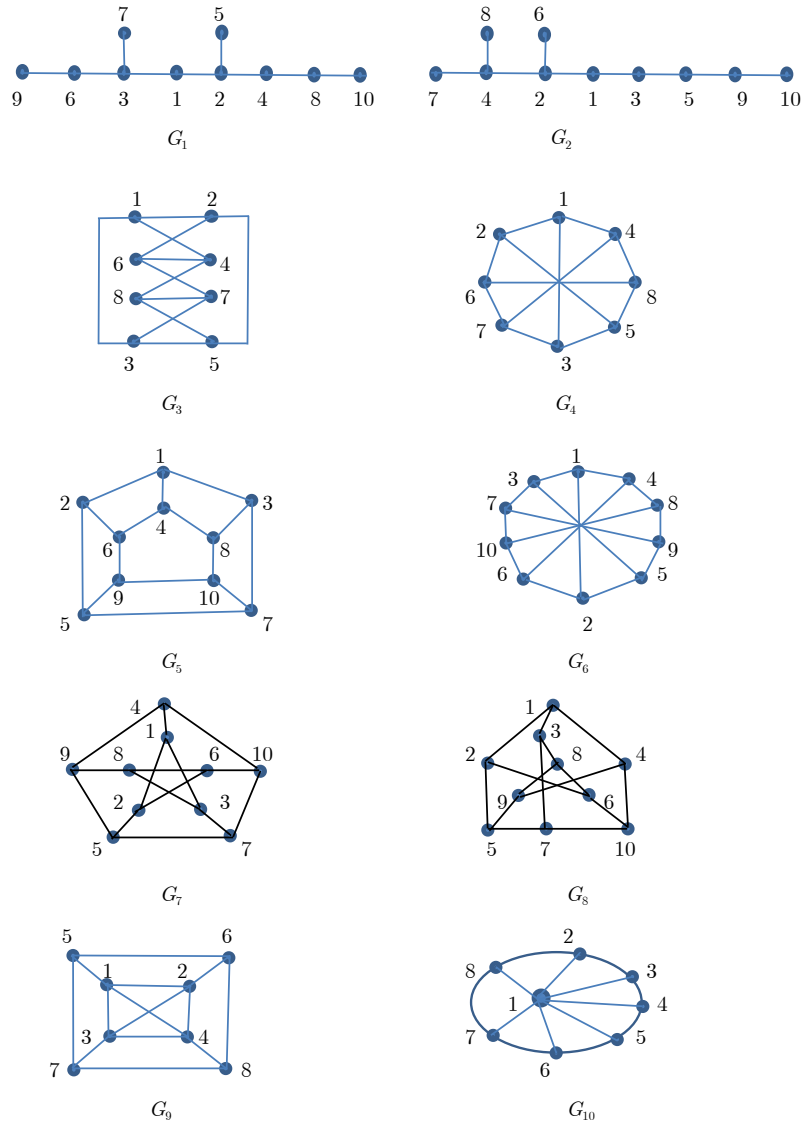


图 1 例 1 各对应图

Fig.1 Corresponding figures of Example 1

$r(D_6)$, 故由推论 2 或定理 5 亦可判定 G_5 和 G_6 不同构.

4) G_7 和 G_8 均是 3 正则简单无向连通图 (Petersen 图^[4, 13]). 按图中顶点标号, 经计算可得 G_7 和 G_8 的距离矩阵为

$$D_7 = D_8 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 0 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 2 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 & 1 & 0 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

因 $D_7 = D_8$, 由定理 1、定理 3 或定理 5 均可判定 $G_7 \cong G_8$.

此外, 因图的距离谱不同, 故由定理 5 可轻松判定 G_7 和 G_8 与 G_5 或 G_6 不同构.

5) G_9 和 G_{10} 均是简单无向连通图, 按图中标号可得 G_9 和 G_{10} 的距离矩阵分别为

$$D_9 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 0 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_{10} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

经计算可得, $\det(D_9) = 37$, $\det(D_{10}) = -7$. 因 $\det(D_9) \neq \det(D_{10})$, 故 $\det(\lambda I_8 - D_9) \neq \det(\lambda I_8 - D_{10})$. 由定理 3 可以判定 G_9 和 G_{10} 不同构.

此外, 经计算还可得, $d_o(D_9) = [10 \ 10 \ 10 \ 10 \ 11 \ 11 \ 11 \ 11]$, $d_o(D_{10}) = [7 \ 11 \ 11 \ 11 \ 11 \ 11 \ 11 \ 11]$, $d_o(D_9) \neq d_o(D_{10})$. 由推论 1 或定理 5 亦可判定 G_9 和 G_{10} 不同构.

3 结束语

图的同构关系是一种等价关系. 图论在自然科学和社会科学的诸多领域中有着广泛的应用, 凡与图的结构相关的分类、聚类、识别与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.

本文给出了简单无向图距离矩阵的定义, 将基于邻接矩阵的同构判定条件推广到简单无向图距离矩阵. 由简单无向连通图的距离矩阵很容易求得该图的直径 (求图的直径是图论中的难题^[13])、半径和离心率等^[4], 而这些整体性结构参数不可能由邻接矩阵得到. 此外, 距离矩阵是素矩阵而邻接矩阵一般不是素矩阵. 正是利用了这些邻接矩阵所没有的整体结构性质, 本文给出了基于距离矩阵特征多项式的同构判定条件 (定理 3). 距离矩阵特征多项式不同于邻接矩阵特征多项式, 邻接矩阵特征多项式相等仅是两个简单无向连通图同构的必要条件. 就无向树而言, 随着顶点数趋于无穷大, 几乎没有树可被它的邻接矩阵特征值唯一确定^[4]. 为避免特征多项式计算误差对判定结果的影响, 本文率先给出了简单无向连通图距离矩阵列和向量与图的距离谱的定义, 并进一步给出了基于距离矩阵的秩与列和向量的同构判定条件 (定理 5). 该条件易于验证且不产生计算误差, 故更适合大规模简单无向连通图的同构判定. 定理 3 和定理 5 均是充要条件且均具有多项式时间复杂度. 针对无向树的同构判定问题, 本文还给出了基于距离谱的判定条件 (推论 4). 容易理解, 将定理 3 特别是定理 5 用于简单无向不连通图的各个连通子图或将推论 4 用于无向森林的各个无向树, 就可解决任意简单无向不连通图的同构判定问题. 最后, 本文用一些典型例图说明了定理 3、

定理 5、推论 4 及其他相关结论的使用方法, 其中部分例图 (如 Wagner 图和 Petersen 图) 曾被多位学者深入研究或引用过.

本文的主要创新点和贡献可概括为: 1) 给出了简单无向图的同构判定条件, 这些条件均具有多项式时间复杂度, 间接地证明了简单无向图的同构判定问题是 P 问题; 2) 不同于现有的图上操作算法 (搜索-标号-回溯算法), 本文所给的同构判定条件均是数学方程式, 不仅便于分析和应用而且便于计算机编程; 3) 因简单无向图是一大类常见的图且无向树和极大无向外平面图均是简单无向图的真子集, 故本文的主要结果是现有工作的一个重要进展. 需要说明的是, 虽然本文在简单无向图的同构判定问题上有较大进展, 但一般 (任意) 无向或有向图的同构判定是 P 还是 NP 问题仍然没有得到解决.

今后, 我们将针对简单有向强连通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, 2nd Edition*. Pearson Education, Inc., 2018.
- Babai L. Graph isomorphism in quasipolynomial time. arXiv preprint arXiv: 1512.03547v2 [cs. DS], 2016.
- 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
- Beyer T, Jones W, Mitchell S. Linear algorithms for isomorphism of maximal outerplanar graphs. *Journal of the ACM*, 1979, **26**(4): 603–610
- Buss S R. Alogtime algorithms for tree isomorphism, comparison, and canonization. In: *Proceedings of the 5th Kurt Gödel Colloquium on Computational Logic and Proof Theory*. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 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
- 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 Chao-Rui. *Graph Theory, 2nd 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.)

- 13 Wang Shu-He. *Graph Theory*. Beijing: Science Press, 2004.
(王树禾. 图论. 北京: 科学出版社, 2004.)
- 14 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.)
- 15 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.)
- 16 Mowshowitz A. The characteristic polynomial of a graph. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 1972, **12**(2): 177–193
- 17 Chen Jing-Liang, Chen Xiang-Hui. *Special Matrices*. Beijing: Tsinghua University Press, 2001.
(陈景良, 陈向晖. 特殊矩阵. 北京: 清华大学出版社, 2001.)
- 18 Wang Song-Gui, Jia Zhong-Zhen. *Inequalities in Matrix Theory*. Hefei: Anhui Education Publishing House, 1994.
(王松桂, 贾忠贞. 矩阵论中的不等式. 合肥: 安徽教育出版社, 1994.)
- 19 Wu Ting-Zeng. Construction of cospectral graphs. *Journal of Shandong University (Natural Science)*, 2011, **46**(6): 60–63
(吴廷增. 同谱图的构造. 山东大学学报 (理学版), 2011, **46**(6): 60–63)
- 20 Diestel R [Author], Yu Qing-Lin [Translator]. *Graph Theory, 5th Edition*. Beijing: Science Press, 2020.
(Diestel R [著], 于青林 [译]. 图论, 第 5 版. 北京: 科学出版社, 2020.)



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, 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 国家自然科学基金委员会研究员. 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** Research Fellow of National Natural Science Foundation of China. He received

his Ph.D. degree in 1997. His research interest covers operational research and cybernetics, and graph theory and its applications.)