

# 等能量六角系统的算法设计<sup>①</sup>

顾彦波, 李敬文, 孙 帅

兰州交通大学 电子与信息工程学院, 兰州 730070

**摘要:** 针对一类特殊的六角系统图, 设计了一种算法, 该算法可以得出该类图中是否含有等能量的图. 结果表明: 利用该算法, 当  $sum \geq 29$  时, 能找到能量相等的异构六角系统图. 该结论在化学图论领域中具有实际应用意义.

**关键词:** 六角系统图; 等能量图; 谱; 邻接矩阵

**中图分类号:** O157.5

**文献标志码:** A

**文章编号:** 1000-5471(2019)12-0017-07

随着计算机科学的飞速发展, 图论中一些复杂问题得以解决, 同时图论的应用也拓展到了复杂网络、大数据和生物基因工程等领域. 图论在化学中也有着重要应用. 在量子化学中, 共轭分子以离域的  $\pi$ -键为特征, 具有极其特殊的物理化学性质. 图论化学家们发现,  $\pi$ -电子的总能量  $E_\pi$  用 HMO 法与其图的邻接特征根的绝对值之和一致, 即  $E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$ ,  $E_\pi$  是共轭分子热力学稳定的重要衡量指标<sup>[1]</sup>. 目前, 在该领域中, 图的能量方面已经取得了很多成果. 文献[2]研究得到了总  $\pi$ -电子能量的上下界. 文献[3]给出了图谱理论在化学方面的应用范围. 文献[4]研究了两棵  $\Pi$ -型树同谱的求解算法. 文献[5]用计算机实现了对扩展网格图能量的精确计算. 文献[6]提出了极小能量图的猜想, 该猜想在文献[7]中得到了部分验证. 文献[8]证明了六角形晶体(Hexagonal lattices)的能量界限. 文献[9]给出了一些图的能量及能量的上下界. 六角系统是一个 2-连通的平面图, 且其内部面是由单位长度为 1 的正六边形结合而成. 文献[10-11]给出了几类六角系统图的特征多项式及其应用, 文献[12]研究了 T-型六角系统的染色问题.

本文主要研究一类特殊的六角系统图的能量相等问题. 此类六角系统图是在一个正六边形的基础上, 对正上方、右上方、右下方动态增加正六边形个数, 形成新的该类型的六角系统图. 算法生成该类六角系统图的邻接矩阵, 并求出等能量图. 实验结果表明, 对于一组参数总和相等的异构六角系统图, 是存在能量相等的图形的.

## 1 等能量六角系统的算法

### 1.1 算法的基本思想

1) 根据参数总和相同, 且排除图形对称这些条件, 生成该类型的所有非同构的六角系统图对应的邻接矩阵.

2) 求每个邻接矩阵对应的图谱, 并求其绝对值之和, 作为该六角系统图的能量.

3) 对一类六角系统图的能量进行比较, 如果相等则输出结果.

参数  $L_1, L_2, L_3$  分别表示在基础六边形的正上方、右上方、右下方增加的正六边形的个数.  $L_1, L_2, L_3 \in \{0, 1, 2, \dots, sum\}; L_1 + L_2 + L_3 = sum$ , 3 个方向的参数确定之后就唯一确定了一个六角系统图, 记  $n$  为图

① 收稿日期: 2019-04-10

基金项目: 国家自然科学基金项目(11461038, 11961041).

作者简介: 顾彦波(1994-), 男, 硕士研究生, 主要从事图论算法及其应用的研究.

的总顶点个数.

## 1.2 算法的描述

算法分为 3 部分来解决该类型的六角系统图问题, 以下对其进行详细描述.

**算法 1** 分解参数总和  $sum$ .

算法中出现的参数说明:

$T$ : 三元组集合,  $T = \{t_i; i = 1, 2, \dots, r\}$ , 其中  $t_i$  为集合  $T$  中第  $i$  个三元组  $\{x, y, z; x, y, z \in \mathbb{N}\}$ .

输入: 参数总和  $sum$ .

输出: 一个包含 3 个扩展分支的参数的三元组  $T$ .

算法执行步骤如下:

1) 设置一个三元组  $t_i(x, y, z)$ , 通过循环变量控制  $x, y, z$  的值, 使得  $x + y + z = sum$ ;

2) 控制三元组中变量  $y$  的值, 使得  $y$  的值从 0 开始增长,  $x$  和  $y$  不能同时为 0, 并且控制  $x \leq y$ , 得到待排除同构图的三元组;

3) 当三元组中的第一个元素  $x = 0$  时, 在三元组中查找其它三元组的  $z$  和  $y$  与该三元组中  $y$  和  $z$  分别相等的三元组, 然后删除该三元组, 最终得到不含有同构图的三元组;

4) 将所有满足条件的三元组加入到集合  $T$  中, 返回集合  $T$ .

图 1 给出了不同三元组形成的同构图  $H_{(L_1, L_2, L_3)}$ , 参数分别为  $L_1, L_2, L_3$  的六角系统图, 下文如同.

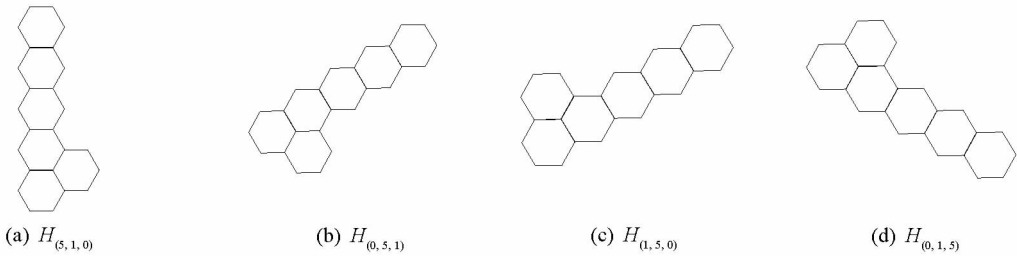


图 1 一组同构图

算法 1 生成的集合  $T$  中的三元组中的每个元素表示后续生成的六角系统图的 3 个参数, 通过算法 1 中的步骤可以保证生成的六角系统图中没有同构图.

**算法 2** 生成六角系统图的邻接矩阵.

算法中出现的参数说明:

$M$ : 矩阵集合,  $M = \{M_i; i = 1, 2, \dots, s\}$ ,  $M_i$  为集合  $M$  中第  $i$  个  $n$  阶矩阵.

输入:  $L_1, L_2, L_3$ .

输出:  $M[n][n]$ .

算法执行步骤如下:

1) 从集合  $T$  中依次取出三元组, 作为算法 2 的输入, 如果集合为空, 则终止运算;

2) 根据输入的参数, 按照规则 1 判断六角系统图的形状, 计算  $n$  的值;

3) 根据得到的  $n$  值, 新建二维数组  $M[n][n]$  来存储六角系统图的邻接矩阵;

4) 根据输入的参数, 按照规则 2 和规则 3 对图中各顶点进行标号, 根据规则生成邻接矩阵  $M[n][n]$ , 若  $(i, j) \in E_H$  (图  $H$  的边集), 则有  $M[i][j] = 1, M[j][i] = 1$ ;

5) 将邻接矩阵  $M$  加入到邻接矩阵  $M_1$  中, 并输出该矩阵, 返回步骤 1), 直到三元组全部取完, 算法终止.

算法 2-规则 1—— $n$  值计算:

1) 如果  $L_2 = 0$  或  $L_1, L_3 = 0$ , 则  $n = (L_1 + L_2 + L_3) + 6$ ;

2) 当 3 个参数不满足步骤 1) 时, 如果  $L_1, L_2, L_3 \neq 0$ , 则  $n = (L_1 + L_2 + L_3) + 4$ ;

3) 当 3 个参数不满足以上规则时,  $n = (L_1 + L_2 + L_3) + 5$ .

算法 2-规则 2——建立顶点的点集数组:

1) 用  $L_1$  行 4 列、 $L_2$  行 4 列和  $L_3$  行 4 列的二维数组来分别存储基础六边形的 3 个分支上的顶点, 用一个全局变量  $count$  来记录六边形的顶点个数;

2) 对  $L_1$  方向上的顶点建立点集数组, 二维数组大小为  $L_1$  行 4 列, 共有  $L_1 * 4$  个顶点, 每一行的 4 个元素代表一个扩展六边形顶部需要扩展的 4 个顶点, 当每次对一个新的顶点标号时, 则全局变量  $count + 1$ , 并将  $count$  的值赋值给二维数组中顶点的位置;

3) 对  $L_2$  方向上的顶点建立点集数组, 二维数组的大小为  $L_2$  行 4 列, 共有  $L_2 * 4$  个顶点, 第一行的第一个顶点标号是  $L_1$  方向上的二维数组中第一行第四列的元素, 对其它顶点标号时, 每对一个顶点标号, 则  $count + 1$ , 并将  $count$  对应的值赋值给二维数组中顶点的位置;

4) 对  $L_3$  方向上的顶点建立点集数组, 二维数组的大小为  $L_3$  行 4 列, 共有  $L_3$  个顶点, 第一行的第一个顶点的标号是  $L_2$  方向上的二维数组中第一行第四列的元素, 对其它顶点标号时, 每对一个顶点标号, 则全局变量  $count + 1$ , 并将  $count$  对应的值赋值给二维数组中顶点的位置;

5) 得到 3 个存储了 3 个分支上的顶点标号的数组.

算法 2-规则 3——连接相关联顶点:

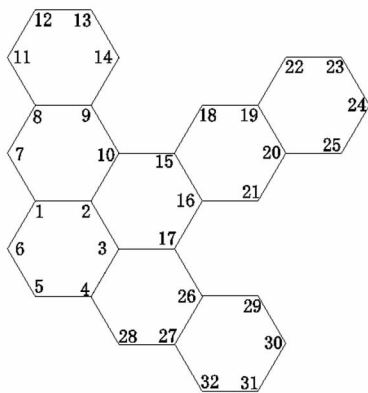
1) 将  $L_1$  分支的二维数组中的第一行第一列的元素与  $L_1$  分支的第一个顶点连接(即在邻接矩阵中将两个顶点对应的位置元素置为 1, 并将其对称位置处的元素置为 1), 将第一行第四列的顶点编号与  $L_1$  分支的第二个顶点连接, 再将二维数组第一行内的顶点依次连接, 以此形成第一个扩展六边形;

2) 如果  $L_1 > 1$ , 则将二维数组第二行第一列的顶点与第一行第二列的顶点连接, 将二维数组第二行第四列的顶点与第一行第三列的顶点连接, 再将第二行内的顶点依次连接;

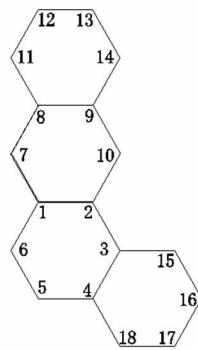
3) 依次连接  $L_1$  内的顶点, 直到二维数组的第  $L_1$  行第一分支连接完毕;

4)  $L_2, L_3$  分支的连接与  $L_1$  相同.

标号示例(图 2), 以参数  $(2, 3, 2), (2, 0, 1)$  示例  $H_{(2,3,2)}, H_{(2,0,1)}$ .



(a)  $H_{(2,3,2)}$



(b)  $H_{(2,0,1)}$

图 2 标号示例

算法 3 求六角系统图能量.

输入: 矩阵特征值  $R[n]$ .

输出: 六角系统图能量  $E(H)$ .

算法执行步骤如下:

1) 算法 3 执行完毕会生成矩阵特征值集合  $EV$ , 依次从集合中取出元素作为算法 4 的输入, 若集合为空, 则算法终止;

2) 对特征值取绝对值, 求和, 作为该图的能量  $E_H$ , 将能量值加入能量集合  $E$  中;

3) 重复执行步骤 1), 直到特征值集合  $EV$  元素全部取完, 算法终止.

## 2 算法分析

影响算法时间复杂度的因素主要有以下 3 个方面:

- (a) 生成参数总和为  $sum$  的邻接矩阵集合,  $T_1 = o(n^2)$ ;  
 (b) 求矩阵集合中每个矩阵的特征值,  $T_2 = o(n^2)$ ;  
 (c) 比较两个图的能量是否相等,  $T_3 = o(n * \log_2 n)$ .

### 3 算法测试结果

本算法计算矩阵特征值时精度设为  $10^{-9}$ , 因此在比较两个图的能量过程中, 能量分别记为  $E1, E2$ , 当能量差  $|E1 - E2| \leq 10^{-9} * n$  时, 就可以认为这两个图是等能量的.

本文选取参数总和为  $sum \in [0, 38]$  的所有该类型的六角系统图进行算法测试, 可以得出, 当  $sum \geq 29$  时, 有等能量图出现. 以  $sum = 29$  为例,  $H_{5,11,13}$  与  $H_{5,13,11}$ ,  $H_{3,13,13}$  与  $H_{3,14,12}$  等能量, 具体步骤如下:

1) 输入 29, 得到三元组集合, 三元组中的 3 个元素分别为该类型六角系统图的 3 个参数, 该集合中无同构图. 部分集合如下:

$\{0, 0, 29\}, \{1, 0, 28\}, \{2, 0, 27\}, \{3, 0, 26\}, \{4, 0, 25\}, \{5, 0, 24\}, \{6, 0, 23\}, \{7, 0, 22\}, \{8, 0, 21\}, \{9, 0, 20\}, \{10, 0, 19\}, \{11, 0, 18\}, \{12, 0, 17\}, \{13, 0, 16\}, \{14, 0, 15\}, \{0, 1, 28\}, \{1, 1, 27\}, \{2, 1, 26\}, \{3, 1, 25\}, \{4, 1, 24\}, \{5, 1, 23\}, \{6, 1, 22\}, \{7, 1, 21\}, \{8, 1, 20\}, \{9, 1, 19\}, \{10, 1, 18\}, \{11, 1, 17\}, \{12, 1, 16\}, \{13, 1, 15\}, \{14, 1, 14\}, \{0, 2, 27\}, \{1, 2, 26\}, \{2, 2, 25\}, \{3, 2, 24\} \dots$

2) 当  $sum = 29$  时, 图的顶点个数有 3 种情况, 分别为: 120, 121, 122, 对应的邻接矩阵的阶数分别为 120, 121, 122. 分别比较在阶数相同时的能量值. 由于数据量较大, 故不列出矩阵.

3) 比较 3 种情况下的能量值, 只有当  $n = 120$  时,  $H_{(5,11,13)}$  与  $H_{(5,13,11)}$ ,  $H_{(3,13,13)}$  与  $H_{(3,14,12)}$  能量相等, 且能量值分别为:  $E(H_{(5,11,13)}) = E(H_{(5,13,11)}) = 168.956\ 429\ 6$ ,  $E(H_{(3,13,13)}) = E(H_{(3,14,12)}) = 168.941\ 396\ 6$ , 由于数据量较大, 故只列出其中一个等能量图的数据. 图  $H_{(5,11,13)}, H_{(5,13,11)}$  的邻接矩阵对应的特征值如表 1 和表 2 所示.

表 1 图( $H_{(5,11,13)}$ )的邻接矩阵对应的部分特征值数据

序号	$r[1]$	$r[2]$	$r[3]$	$r[4]$	$r[5]$	$r[6]$
特征值	2.677 477 899	-2.677 477 899	2.548 064 794	-2.548 064 794	2.540 042 496	-2.540 042 496
序号	$r[7]$	$r[8]$	$r[9]$	$r[10]$	$r[11]$	$r[12]$
特征值	2.510 806 720	-2.510 806 720	2.485 288 890	-2.485 288 890	2.472 555 728	-2.472 555 728
序号	$r[13]$	$r[14]$	$r[15]$	$r[16]$	$r[17]$	$r[18]$
特征值	2.433 815 768	-2.433 815 768	2.381 568 834	-2.381 568 834	2.356 148 393	-2.356 148 393
序号	$r[19]$	$r[20]$				
特征值	2.282 724 943	-2.282 724 943				

表 2 图( $H_{(5,13,11)}$ )的邻接矩阵对应的部分特征值数据

序号	$r[1]$	$r[2]$	$r[3]$	$r[4]$	$r[5]$	$r[6]$
特征值	2.677 477 915	-2.677 477 915	2.546 738 708	-2.546 738 708	2.542 391 389	-2.542 391 389
序号	$r[7]$	$r[8]$	$r[9]$	$r[10]$	$r[11]$	$r[12]$
特征值	2.503 247 293	-2.503 247 293	2.497 138 141	-2.497 138 141	2.467 017 458	-2.467 017 458
序号	$r[13]$	$r[14]$	$r[15]$	$r[16]$	$r[17]$	$r[18]$
特征值	2.430 566 126	-2.430 566 126	2.393 938 936	-2.393 938 936	2.336 291 351	-2.336 291 351
序号	$r[19]$	$r[20]$				
特征值	2.306 903 446	-2.306 903 446				

表 3—表 11 分别为  $sum \in [30, 38]$  范围内的等能量图, 由于数据量较大, 故在此只列出此范围内的等能量图. 其中每个表中的第一列为组数, 代表在当前点数下所确定的该类六角系统图中有多少组等能量六角系统图, 第二列为对应确定的某一个图, 第三列为该图的能量值. 由于邻接矩阵及特征值数据量较大, 故在此列出图的能量值.

表 3  $sum=30, n=124$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(10,9,11)}$	174.570 931
1	$H_{(10,10,10)}$	174.570 931

表 4  $sum=31, n=128$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(3,12,16)}$	180.164 078
1	$H_{(3,17,11)}$	180.164 078

表 5  $sum=32, n=132$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(8,10,14)}$	185.793 420
1	$H_{(8,13,11)}$	185.793 420
2	$H_{(3,12,17)}$	185.775 419
2	$H_{(3,18,11)}$	185.775 419

表 6  $sum=33, n=136$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(3,12,18)}$	191.386 762
1	$H_{(3,19,11)}$	191.386 762
2	$H_{(2,16,15)}$	191.357 231
2	$H_{(2,17,14)}$	191.357 231

表 7  $sum=34, n=140$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(3,18,15)}$	197.016 299
1	$H_{(9,10,15)}$	197.016 299
2	$H_{(4,14,16)}$	197.008 890
2	$H_{(4,17,13)}$	197.008 890
3	$H_{(4,15,15)}$	197.008 892
3	$H_{(4,16,14)}$	197.008 892
4	$H_{(3,16,15)}$	196.998 113
4	$H_{(4,17,14)}$	196.998 113

表 8  $sum=35, n=144$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(4,14,17)}$	202.620 233
1	$H_{(4,18,13)}$	202.620 233
2	$H_{(4,15,16)}$	202.620 234
2	$H_{(4,17,14)}$	202.620 234
3	$H_{(3,16,16)}$	202.609 456
3	$H_{(3,18,14)}$	202.609 456
4	$H_{(2,17,16)}$	202.579 917
4	$H_{(2,18,15)}$	202.579 917

表 9  $sum=36, n=148$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$	组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(11,11,14)}$	208.239 161	4	$H_{(4,15,17)}$	208.231 578
1	$H_{(11,12,13)}$	208.239 161	5	$H_{(2,17,17)}$	208.191 259
2	$H_{(4,14,18)}$	208.231 575	5	$H_{(2,19,15)}$	208.191 259
2	$H_{(4,19,13)}$	208.231 575	6	$H_{(3,17,16)}$	208.220 798
3	$H_{(3,16,17)}$	208.220 798	6	$H_{(3,18,15)}$	208.220 798
3	$H_{(3,19,14)}$	208.220 798	7	$H_{(1,18,17)}$	208.096 705
4	$H_{(4,16,16)}$	208.231 578	7	$H_{(1,19,16)}$	208.096 705

表 10  $sum=37, n=152$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$	组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(12,10,15)}$	213.850 523	6	$H_{(5,17,15)}$	213.847 188
1	$H_{(12,13,12)}$	213.850 523	7	$H_{(2,17,18)}$	213.802 601
2	$H_{(10,12,15)}$	213.850 460	7	$H_{(2,20,15)}$	213.802 601
2	$H_{(10,13,14)}$	213.850 460	8	$H_{(3,17,17)}$	213.832 141
3	$H_{(4,14,19)}$	213.842 917	8	$H_{(3,18,16)}$	213.832 141
3	$H_{(4,20,13)}$	213.842 917	8	$H_{(3,19,15)}$	213.832 141
4	$H_{(6,15,16)}$	213.848 987	9	$H_{(4,17,16)}$	213.842 602
4	$H_{(6,16,15)}$	213.848 987	9	$H_{(4,18,15)}$	213.842 602
5	$H_{(3,16,18)}$	213.832 140	10	$H_{(2,18,17)}$	213.802 602
5	$H_{(3,20,14)}$	213.832 140	10	$H_{(2,19,16)}$	213.802 602
6	$H_{(5,16,16)}$	213.847 188			

表 11  $sum=38, n=156$  时的等能量图

组数	图 $H$	能量 $E$	组数	图 $H$	能量 $E$
1	$H_{(13,10,15)}$	219.461 886	7	$H_{(3,17,18)}$	219.443 483
1	$H_{(12,11,15)}$	219.461 886	7	$H_{(3,20,15)}$	219.443 483
2	$H_{(4,14,20)}$	219.454 250	8	$H_{(4,17,17)}$	219.454 261
2	$H_{(4,21,13)}$	219.454 250	8	$H_{(4,18,16)}$	219.454 261
3	$H_{(6,15,17)}$	219.460 330	8	$H_{(4,19,15)}$	219.454 261
3	$H_{(6,17,15)}$	219.460 330	9	$H_{(2,18,18)}$	219.413 944
4	$H_{(3,16,19)}$	219.443 482	9	$H_{(2,19,17)}$	219.413 944
4	$H_{(4,21,14)}$	219.443 482	9	$H_{(2,10,16)}$	219.413 944
5	$H_{(5,16,17)}$	219.458 530	10	$H_{(3,18,17)}$	219.443 483
5	$H_{(5,18,15)}$	219.458 530	10	$H_{(3,19,16)}$	219.443 483
6	$H_{(2,17,19)}$	219.413 944	11	$H_{(1,19,18)}$	219.319 390
6	$H_{(2,21,15)}$	219.413 944	11	$H_{(1,20,17)}$	219.319 390

## 4 结 语

综上所述,当参数总和  $sum \geq 29$  时,有等能量图出现.利用该算法通过大量数据实验分析,可以得出,在该类六角系统图中等能量的图逐渐增加,并且在能量值相等的情况下,等能量的图越来越多.随着参数的增大,生成的六角系统图的邻接矩阵的阶数随之增加,其特征值的求解以及等能量的判定会耗费更多时间,以后将给予相应的改进.

### 参考文献:

- [1] DALAPATI S. The Energy of a Graph [D]. Bhubane Swar: InDian Institute of Technology, 1978.
- [2] MCCLELLAND B J. Properties of the Latent Roots of a Matrix: The Estimation of  $\pi$ -Electron Energies [J]. Journal of the Chemical Physics, 1971, 54(2): 640-643.
- [3] BROUWER A E, HAEMERS W H. Spectra of Graphs [M]. New York: Springer, 1980.

- [4] 王义宗, 李敬文, 文 飞. 两棵  $\Pi$ -型树同谱的求解算法 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2018, 40(8): 95-101.
- [5] SUDING P N, ZIFF R M. Site Percolation Thresholds and Universal Formulas for the Archimedean Lattices [J]. *Disordered System and Neural Networks*, 1998, 60(1): 1-33.
- [6] CAPOROSSI G, GUTMAN I, HANSEN P, et al. Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs [J]. *Computers & Chemistry*, 1999, 23(5): 469-477.
- [7] 计省进. 关于图能量的若干问题的研究 [D]. 天津: 南开大学, 2012.
- [8] WIERMAN J C. An Improved Upper Bound for the Hexagonal Lattice Site Percolation Critical Probability [J]. *Combinatorics, Probability and Computing*, 2002, 11(6): 629-643.
- [9] MILOVANOVIĆ I, MILOVANOVIĆ E, GUTMAN I. Upper Bounds for Some Graph Energies [J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2016, 289: 435-443.
- [10] ZHENZHEN L, HUANG Q X. On the Characteristic Polynomial of a Hexagonal System and Its Application [J]. *Journal of Mathematical Research with Applications*, 2014, 34(3): 265-277.
- [11] 江 蓉, 任海珍. 一类 2-共振六角系统的性质与构造 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2007, 32(3): 1-5.
- [12] 王文杰, 黄丽娜, 李沐春. T-型六角系统的点可区别边染色 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2018, 40(10): 77-82.

## On Algorithm Design of Equal Energy Hexagonal System

GU Yan-bo, LI Jing-wen, SUN Shuai

*School of Electronic and Information Engineering, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China*

**Abstract:** In this paper, an algorithm is designed for a special kind of hexagonal system graphs and can figure out whether the graphs contain iso-energy graphs. The results show that, with this algorithm, heterogeneous hexagonal system graphs with equal energy can be found when  $\text{sum} \geq 29$ . The conclusion has practical significance in the field of chemical graph theory.

**Key words:** hexagonal system graphs; iso-energy graphs; spectrum; adjacency matrix

责任编辑 廖 坤