

两棵 Π -型树同谱的求解算法^①

王义宗¹, 李敬文¹, 文 飞²

1. 兰州交通大学 电子与信息工程学院, 兰州 730070; 2. 兰州交通大学 应用数学研究所, 兰州 730070

摘要: Π -型树是最大度为 3 的且恰有 2 个顶点的树. 针对 Π -型树与自身的同谱特征设计了一种同谱偶求解算法. 确切地, 根据 Π -型树生成算法生成所有给定阶数的非同构 Π -型树, 然后利用同谱特征寻找同谱偶, 直到找出 Π -型树内部所有的同谱偶为止. 通过该算法得到了给定点数的 Π -型树内部的所有同谱偶, 并给出了算法的详细描述和结果.

关键词: Π -型树; 同谱图; 算法

中图分类号: O157.6; TP301

文献标志码: A

文章编号: 1673-9868(2018)08-0095-07

图谱理论是图论研究的一个重要分支, 广泛地应用于复杂网络、聚类算法、机器学习、人脸表情识别及网络可靠性等领域的研究, 同时在物理、化学等领域中也有广泛的应用. 因此图谱理论的研究就显得尤为重要^[1-2].

图谱理论主要通过图矩阵的数量特征来研究图的组合结构, 所涉及的图矩阵主要包括邻接矩阵、关联矩阵、拉普拉斯矩阵、广义邻接矩阵、距离矩阵等^[3-4]. 设图 G 为简单连通图, 其邻接矩阵定义为 $A = [a_{ij}]_{n \times n}$, 其中 $a_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$. 令 $P_G(\lambda) = |\lambda I - A|$ 为 A 的邻接特征多项式, 其中 I 为单位矩阵. 方程 $|\lambda I - A| = 0$ 的所有值以及重数称为图的谱, 具有相同谱的图称为同谱图, 同谱但不同构的图称为同谱偶. 对于给定的图 G , 若“任意的图 H 与 G 同谱”蕴含着“ H 与 G 同构”, 则称 G 是谱确定的^[5-6].

早在 20 世纪, Gunthard 和 Primas 在研究化学中的 Huckel 理论时提出了“哪些图是谱确定的?”, 近年来, 这一问题引起了学者们的广泛关注. 如果直接从谱确定的定义出发来回答这一问题, 显然是困难的. 相反地, 对于某个给定的图, 如果我们能找到它的一个同谱偶, 则说明这个图一定不是谱确定的, 因此关于谱确定的研究主要围绕两个问题展开: (a) 判断哪些图是谱确定的; (b) 如果不是谱确定的, 寻找其所有的同谱偶. 对于同谱偶的研究, 从目前已知的结果来看, 常用方法有: GM-变换^[7]和 Schwenk-方法^[8]. 遗憾的是, 通过设计算法来寻找同谱偶的研究甚少. 文献[9-12]主要研究了谱确定性问题, 提到了“同谱”, 同时给了相关证明, 但没有具体涉及同型图内部同谱偶的研究. 文献[13]针对 Π -型树的谱做了研究, 将其分为 6 个类型, 分别研究每个类型的特殊性质, 同时给出了与 Π -型树同谱的其它图的结构以及相关的数学证明. 文献[14-15]给出了类似于 Π -型树的 H-型树和 T-型树, 结论与文献[13]的结论类似.

以上文献都没有研究在点边数相同的情况下 Π -型树、H-型树之间的性质. 本文针对此情况设计了一种新的算法, 此算法设计生成了 Π -型树, 并求得了给定点数的 Π -型树内部的所有同谱偶, 同时给出了算法的详细描述和实验结果.

① 收稿日期: 2018-01-03

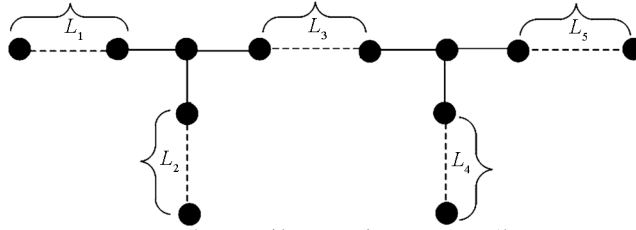
基金项目: 国家自然科学基金项目(11461038); 兰州交通大学青年基金项目(2016014).

作者简介: 王义宗(1990-), 男, 硕士研究生, 主要从事图论算法及应用的研究.

通信作者: 李敬文, 教授.

1 Π -型树的相关概念

定义 1 对于一棵树, 如果最大度为 3, 且最大度顶点个数为 2, 则称该树为 Π -型树, 简记为 $\Pi(L_1, L_2, L_3, L_4, L_5)$, 其结构为:



下面给出 3 个重要引理, 这些引理对本文的算法设计起到重要作用.

引理 1^[13] 假设 H 是与 Π -型树同谱的图, 那么 H 最多有 2 部分含圈.

引理 2^[12] 对于图 G , 可以从其邻接谱推导出如下结论: (a) 图的点数; (b) 图的边数; (c) 特征多项式; (d) 特征值; (e) 图是否正则; (f) 图是否具有固定围长.

引理 3^[4] Π -型树 $\Pi_{22} = \Pi(L_1, 1, L_3, 1, 1)$ 是由它的谱确定的, 其中 $L_1 > 1, L_3 > 0$.

2 算法的详细描述

针对 Π -型树设计了算法. 在算法中, 首先按照目标生成不同的 Π -型树, 然后求解出树对应矩阵的特征值, 最后将所有的特征值进行两两比较, 找出相等的特征值所对应的树图.

本算法包含算法 1、算法 2 和算法 3. 算法 1 是 Π -型树的生成算法, 算法 2 是求 Π -型树对应矩阵的特征值的算法, 算法 3 是比较矩阵特征值并找出对应相等的参数 $L_p (p=1, 2, 3, 4, 5)$ 的值的算法.

算法 1 Π -型树生成算法

输入: 总点数 N

输出: 点数为 N 的所有非同构 Π -型树图的邻接矩阵

当给定总点数时, 通过循环变量依次控制 $L_p (p=1, 2, 3, 4, 5)$ 的值, 使得其满足条件, 最终输出 Π -型树的矩阵 $A[][]$. 算法伪代码如下所示:

Begin

For $i=1$ to N

For $j=1$ to N

If $\sum L_p = N$ /* 保证生成树图的点数为 N */

and $L_1 \leq L_2$ and $L_4 \leq L_5$ and $L_1 \leq L_4$ and $L_2 \leq L_5$ /* 保证生成的树与已有的不同 */

Then 开始生成图

If $(L_p! = 0)$

Then $A[][] = 1$

For $j = \text{start } L_p$ to $\text{end } L_p$ /* $\text{start } L_p$ 和 $\text{end } L_p$ 分别表示开始点和结束点 */

$A[j][j+1] = A[j+1][j] = 1$

Else break

End If

memset(A) /* 对 $A[][]$ 清零, 保证树图中不出现环 */

If $A[][]$ 中有对应的树图同构

Then 不生成

Else Then 生成

End For

End For

算法 2 求矩阵的特征值的算法

输入: 矩阵 $A[][]$

输出: $A[][]$ 的特征值

首先对 $A[][]$ 进行三角化(triangle(A)), 对三角化后的矩阵按照 QR 分解法求其特征值, 并将特征值分为实部和虚部存储在矩阵 $tzz[][]$ 中. 求的过程中设置一定的迭代次数 L , 保证求得解满足预设精度. 同时求出 $A[][]$ 矩阵的所有特征值. 算法伪代码如下所示:

```
Begin
L: 迭代次数: 2 000
预设精度: ac = 1.0e-12
M = N - 1
triangle(A)/* 对矩阵进行三角化 */
For i = 0 to N - 1
    For j = 0 to 1
        tzz[i][j] = 0
    End for
End for
For k = 0 to L
    If (fabs(A[M][M - 1] <= ac))
        Then tzz[][0] = A[M][M] M = M - 1
    Else if (M = 0) Then tzz[][0] = A[0][0]
    Else if (M = 1)
        Then a = 1, b = -(A[m - 1][m - 1] + A[m][m]),
            c = A[m - 1][m - 1] * A[m][m] - A[m - 1][m] * A[m][m - 1]
            root(a, b, c)/* 求解一元二次方程 */
    If (fabs(A[M - 1][M - 2] <= ac))
        Then root(a, b, c)
    Else Then
        For i = 0 to N - 1
            For j = 0 to N - 1
                If ((i >= m + 1) || (j >= m + 1))
                    Then A[i][j] = 0
                End for
            End for
        End for
    QR(M)/* 求矩阵全部特征值的方法 */
End for
```

算法 3 比较矩阵特征值并找出对应相等的参数 L_p 的算法

输入: 矩阵特征值

输出: 对应矩阵的参数对

将求出的矩阵特征值进行排序处理, 然后对应比较, 当出现两个矩阵的特征值相等时, 输出矩阵对应的参数值 L_p . 算法伪代码如下:

```
Begin
For i = 1 to N
    For w = 1 to N - 1 - i
        sort(tzz[i][w])
```

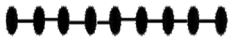
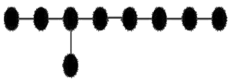
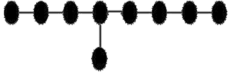
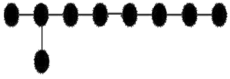
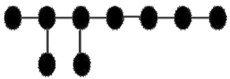
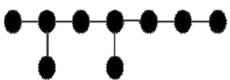
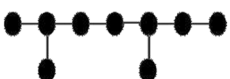
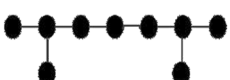
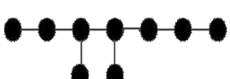
```
End for
End for
For i=i to s/* s 表示  $\Pi$ -型树的个数 */
  For k=i+1 to s
    For j=1 to N
      If (tzz[k][j] == tzz[i][j])
        Then output  $L_p$  对
      End for
    End for
  End for
End for
```

3 算法求解结果

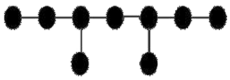
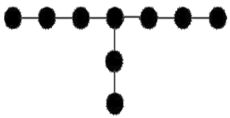
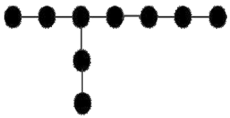
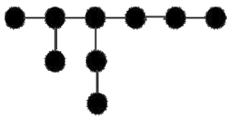
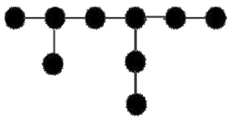
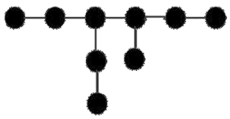
本文采用算法针对 $n(n=30)$ 个点以内的所有 Π -型树进行求解.

- (a) 当 $n \leq 8$ 时, Π -型树内部没有同谱偶.
- (b) 当 $n=9$ 时, Π -型树及特征值如表 1 所示.

表 1 图结构以及对应特征值

图序号	图 结 构		特 征 值			
图 1		$r1-r3$	-1.902 11	-1.618 03	-1.175 57	
		$r4-r6$	-0.618 03	0	0.618 03	
		$r7-r9$	1.175 57	1.618 03	1.902 11	
图 2		$r1-r3$	-2	-1.618 03	-1	
		$r4-r6$	-0.618 03	0	0.618 03	
		$r7-r9$	1	1.618 03	2	
图 3		$r1-r3$	-2.015 32	-1.548 01	-1.142 88	
		$r4-r6$	-0.485 78	0	0.485 78	
		$r7-r9$	1.142 88	1.548 01	2.015 32	
图 4		$r1-r3$	-1.961 57	-1.662 94	-1.111 14	
		$r4-r6$	-0.390 18	0	0.390 18	
		$r7-r9$	1.111 14	1.662 94	1.961 57	
图 5		$r1-r3$	-2.083 97	-1.571 84	-1	
		$r4-r6$	-0.431 73	0	0.431 73	
		$r7-r9$	1	1.571 84	2.083 97	
图 6		$r1-r3$	-2.060 82	-1.598 42	-1.094 56	
		$r4-r6$	0	0	0	
		$r7-r9$	1.094 56	1.598 42	2.060 82	
图 7		$r1-r3$	-2.035 65	-1.690 69	-0.884 13	
		$r4-r6$	-0.464 76	0	0.464 76	
		$r7-r9$	0.884 13	1.690 69	2.035 65	
图 8		$r1-r3$	-2	-1.732 05	-1	
		$r4-r6$	0	0	0	
		$r7-r9$	1	1.732 05	2	
图 9		$r1-r3$	-2.111 99	-1.496 37	-1	
		$r4-r6$	-0.548 06	0	0.548 06	
		$r7-r9$	1	1.496 37	2.111 99	

续表 1

图序号	图 结 构	特 征 值			
图 10		$r1-r3$	-2.074 31	-1.618 03	-0.835
		$r4-r6$	-0.618 03	0	0.618 03
		$r7-r9$	0.835	1.618 03	2.074 31
图 11		$r1-r3$	-2.052 88	-1.414 21	-1.208 64
		$r4-r6$	-0.569 97	0	0.569 97
		$r7-r9$	1.208 64	1.414 21	2.052 88
图 12		$r1-r3$	-2.042 08	-1.520 23	-1
		$r4-r6$	-0.720 28	0	0.720 28
		$r7-r9$	1	1.520 23	2.042 08
图 13		$r1-r3$	-2.119 17	-1.414 21	-1.159 04
		$r4-r6$	-0.407 13	0	0.407 13
		$r7-r9$	1.159 04	1.414 21	2.119 17
图 14		$r1-r3$	-2.083 97	-1.571 84	-1
		$r4-r6$	-0.431 73	0	0.431 73
		$r7-r9$	1	1.571 84	2.083 97
图 15		$r1-r3$	-2.135 78	-1.414 21	-1
		$r4-r6$	-0.662 15	0	0.662 15
		$r7-r9$	1	1.414 21	2.135 78

根据表 1 的结果, 可以得出图 5 和图 14 的特征值相同.

c) 当 $10 \leq n \leq 30$ 时, Π -型树的同谱偶结果见表 2.

表 2 $10 \leq n \leq 30$ 时 Π -型树的同谱对

点数	Π -型树的同谱对
10	$\Pi(1, 1, 0, 1, 5)$ 和 $\Pi(1, 2, 1, 1, 3)$, $\Pi(1, 1, 0, 2, 4)$ 和 $\Pi(1, 3, 0, 1, 3)$
11	$\Pi(1, 1, 0, 1, 6)$ 和 $\Pi(1, 1, 2, 2, 3)$, $\Pi(1, 2, 0, 1, 5)$ 和 $\Pi(1, 2, 1, 2, 3)$
12	$\Pi(1, 1, 0, 2, 6)$ 和 $\Pi(1, 3, 1, 2, 3)$, $\Pi(1, 1, 2, 2, 4)$ 和 $\Pi(1, 2, 1, 1, 5)$, $\Pi(1, 1, 2, 3, 3)$ 和 $\Pi(1, 3, 1, 1, 4)$, $\Pi(1, 1, 3, 2, 3)$ 和 $\Pi(1, 3, 2, 1, 3)$, $\Pi(1, 1, 4, 2, 2)$ 和 $\Pi(1, 2, 3, 1, 3)$, $\Pi(1, 2, 1, 3, 3)$ 和 $\Pi(1, 3, 0, 1, 5)$
13	$\Pi(1, 1, 0, 1, 8)$ 和 $\Pi(1, 1, 3, 2, 4)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 6)$ 和 $\Pi(1, 1, 2, 3, 4)$, $\Pi(1, 2, 0, 3, 5)$ 和 $\Pi(1, 4, 0, 2, 4)$, $\Pi(1, 2, 1, 3, 4)$ 和 $\Pi(1, 4, 0, 1, 5)$, $\Pi(1, 3, 0, 1, 6)$ 和 $\Pi(1, 3, 1, 2, 4)$
14	$\Pi(1, 1, 0, 1, 9)$ 和 $\Pi(1, 3, 2, 1, 5)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 7)$ 和 $\Pi(1, 4, 1, 1, 5)$, $\Pi(1, 1, 5, 2, 3)$ 和 $\Pi(1, 3, 3, 1, 4)$, $\Pi(1, 2, 0, 1, 8)$ 和 $\Pi(1, 2, 2, 3, 4)$, $\Pi(1, 2, 0, 2, 7)$ 和 $\Pi(2, 3, 1, 2, 4)$, $\Pi(1, 2, 1, 3, 5)$ 和 $\Pi(1, 5, 0, 1, 5)$
15	$\Pi(1, 1, 0, 1, 10)$ 和 $\Pi(1, 1, 4, 2, 5)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 8)$ 和 $\Pi(1, 1, 3, 4, 4)$, $\Pi(1, 1, 3, 3, 5)$ 和 $\Pi(1, 3, 1, 1, 7)$, $\Pi(1, 2, 1, 3, 6)$ 和 $\Pi(1, 5, 0, 1, 6)$, $\Pi(1, 4, 0, 1, 7)$ 和 $\Pi(1, 4, 1, 2, 5)$
16	$\Pi(1, 1, 0, 2, 10)$ 和 $\Pi(1, 3, 2, 3, 5)$, $\Pi(1, 1, 0, 5, 7)$ 和 $\Pi(1, 3, 1, 4, 5)$, $\Pi(1, 1, 4, 2, 6)$ 和 $\Pi(1, 3, 2, 1, 7)$, $\Pi(1, 2, 1, 2, 8)$ 和 $\Pi(1, 2, 2, 4, 5)$, $\Pi(1, 2, 5, 3, 3)$ 和 $\Pi(1, 3, 4, 2, 4)$

续表 2

点数	Π -型树的同谱对
17	$\Pi(1, 1, 0, 1, 12)$ 和 $\Pi(1, 1, 5, 2, 6)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 10)$ 和 $\Pi(1, 1, 4, 4, 5)$, $\Pi(1, 1, 2, 3, 8)$ 和 $\Pi(1, 1, 3, 4, 6)$
18	$\Pi(1, 2, 0, 1, 12)$ 和 $\Pi(1, 2, 3, 4, 6)$
19	$\Pi(1, 1, 0, 1, 14)$ 和 $\Pi(1, 1, 6, 2, 7)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 12)$ 和 $\Pi(1, 1, 5, 4, 6)$, $\Pi(1, 1, 2, 3, 10)$ 和 $\Pi(1, 1, 4, 5, 6)$
20	无
21	$\Pi(1, 1, 0, 1, 16)$ 和 $\Pi(1, 1, 7, 2, 8)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 14)$ 和 $\Pi(1, 1, 6, 4, 7)$, $\Pi(1, 1, 2, 3, 12)$ 和 $\Pi(1, 1, 5, 6, 6)$, $\Pi(1, 1, 3, 4, 10)$ 和 $\Pi(1, 1, 4, 5, 8)$
22	无
23	$\Pi(1, 1, 0, 1, 18)$ 和 $\Pi(1, 1, 8, 2, 9)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 16)$ 和 $\Pi(1, 1, 7, 4, 8)$, $\Pi(1, 1, 2, 3, 14)$ 和 $\Pi(1, 1, 6, 6, 7)$, $\Pi(1, 1, 3, 4, 12)$ 和 $\Pi(1, 1, 5, 6, 8)$
24	无
25	$\Pi(1, 1, 0, 1, 20)$ 和 $\Pi(1, 1, 9, 2, 10)$, $\Pi(1, 1, 1, 2, 18)$ 和 $\Pi(1, 1, 8, 4, 9)$, $\Pi(1, 1, 2, 3, 16)$ 和 $\Pi(1, 1, 7, 6, 8)$, $\Pi(1, 1, 3, 4, 14)$ 和 $\Pi(1, 1, 6, 7, 8)$, $\Pi(1, 1, 4, 5, 12)$ 和 $\Pi(1, 1, 5, 6, 10)$
26	无
27	$\Pi(1, 1, 2, 3, 18)$ 和 $\Pi(1, 1, 8, 6, 9)$, $\Pi(1, 1, 3, 4, 16)$ 和 $\Pi(1, 1, 7, 8, 8)$, $\Pi(1, 1, 4, 5, 14)$ 和 $\Pi(1, 1, 6, 7, 10)$
28	无
29	$\Pi(1, 1, 5, 6, 14)$ 和 $\Pi(1, 1, 6, 7, 12)$
30	无

从上述运行结果来看,特殊的 Π -型树 $\Pi(L_1, 1, L_3, 1, 1)$ 内部不存在同谱偶,显然与引理 3 的结果相符.

4 算法时间复杂度分析

本算法是在 Windows 64 位操作系统、4G 内存、VS2010 的环境下,针对 Π -型树专门设计的.

1) 生成图. 用 $n \times n$ 的矩阵来存储生成图,所以对于 n 个点的树而言,时间复杂度只与点数有关:
 $T_1(\Pi) = O(n^2)$;

2) 求谱. 是针对矩阵进行的,需要双层循环,同时令最大迭代次数为 L ,时间复杂度为 $T_2(\Pi) = O(L * n^2)$;

3) 比较特征值. 由于每个矩阵有 n 个特征值且要进行两两比较,所以设置 3 层循环比较对应的值,时间复杂度为 $T_3(\Pi) = O(n^3)$;

综上分析,此算法的时间复杂度只与点数有关,所以为 $T(\Pi) = O(n^3)$.

5 结束语

本算法具有创新性和实用性,在之前的图论研究中没有类似的算法,可以用来解决化学领域的同分异构问题. 由于计算机计算能力限制,本文求解得到了 30 个点以内的 Π -型树内部的同谱偶,如果增加计算能力,可以利用本算法求解得到更大点数的 Π -型树的同谱偶,为以后的图论研究提供可靠的数据. 同时可以利用本算法思想,设计针对其它特殊图的同谱偶算法. 但是仍然有一个问题,就是本算法的复杂度随着点数的增大而增大,希望以后的读者给予改进.

参考文献:

- [1] BONDY J A, MURTY U S R. Graph Theory with Application [M]. North-Holland: Amsterdam, 1976.
- [2] 方富贵. 图论的算法和应用研究 [J]. 计算机与数字工程, 2012, 40(2): 115—117.
- [3] 文 飞. 若干图类的谱特征问题研究 [D]. 乌鲁木齐: 新疆大学, 2015.
- [4] 刘奋进. 图邻接谱确定问题的一些研究 [D]. 乌鲁木齐: 新疆大学, 2012.
- [5] 汪小玲. 点圈并图的匹配等价图数 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2016, 38(8): 35—39.
- [6] 王文霞. 无向无权图同构判别算法 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2017, 42(3): 141—145.
- [7] GODSIL C D, MCKAY B D. Constructing Cospectral Graphs [J]. Aequa Math 1982, 25(1): 257—268.
- [8] SCHWENK A J. Almost All Trees Are Cospectral [J]. New Directions in the Theory of Graphs, 1973(1): 275—307.
- [9] 王 卫, 徐成贤. T-型树 $T(1, l, m)$ 可由其谱唯一决定 [J]. 应用数学, 2005(S1): 34—38.
- [10] 王 忠. 一种由邻接谱确定的树 [J]. 青海师范大学学报(自然科学版), 2011, 27(3): 5—9.
- [11] 刘翼举, 侯耀平. 一些由它的邻接谱和角确定的图 [J]. 邵阳学院学报(自然科学版), 2009, 6(2): 5—7.
- [12] DAM E R V, HAEMERS W H. Which Graphs Are Determined by Their Spectrum [J]. Linear Algebra Appl, 2002, 373: 241—272.
- [13] LIU F J, HUANG Q X. On the Spectral Characterization of-Shape Trees [J]. Linear and Multilinear Algebra, 2013, 61(3): 355—367.
- [14] HU S B. On the Spectral Characterization of H-Shape Trees [J]. Advances in Linear Algebra & Matrix Theory, 2014, 4(2): 79—86.
- [15] 王 卫, 徐成贤. T-型树谱唯一性的一个简单刻画 [J]. 数学研究, 2006, 39(1): 68—76.

A Solution Algorithm for the Same Spectrum of Two Π -Shaped Trees

WANG Yi-zong¹, LI Jing-wen¹, WEN Fei²

1. School of Electronic & Information Engineering, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China;

2. Institute of Applied Mathematics, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China

Abstract: A Π -shaped tree is a tree with a maximum degree of 3 and two vertices. In this paper, an algorithm for the same spectrum is proposed for the characteristics of the Π -shaped tree with its own spectrum. Exactly, the Π -shaped tree generation algorithm is employed to generate all the given order of non-isomorphic Π -shaped trees, and then the same spectrum characteristics are used to search for the same spectrum couple until all the internal spectrum couples of the Π -shapes trees are found. We give all the same spectrum couples of a given number of points of the Π -shaped trees, and give a detailed description of the algorithm and study results.

Key words: Π -shaped tree; cospectral graph; algorithm

责任编辑 廖 坤
崔玉洁