Математические
структуры и моделирование
2004, вып. 14, с. 13–18

УДК 519.175.1

А.В. Пролубников

ОБ ОДНОЙ ЭВРИСТИКЕ И ВОССТАНОВИМЫХ С ЕЕ ПОМОЩЬЮ ГРАФАХ

В данной работе рассматривается эвристика, использующая спектральные свойства графов, которая может быть применена при решении задачи проверки изоморфизма графов [1, 2]. Некоторый граф считается восстановимым при помощи данной эвристики, если она полностью характеризует этот граф. А именно, если значения функций, при помощи которых дается значение эвристики на отдельном графе, совпадает для двух графов, то эти графы изоморфны, то есть им соответствует один и тот же непомеченный граф. Рассматриваются модифицированные до положительно определенных матрицы смежности графов. Модифицированные матрицы, представляющие графы, обратимы. По сути, данная эвристика представляет собой значения элементов обратных матриц графов и то, как эти элементы изменяются при изменениях диагональных элементов исходных матриц.

Определение 1. Даны неориентированные графы $G_A = \langle V_A, E_A\rangle$ и $G_B = \langle V_B, E_B\rangle$, где V_A, V_B – множества вершин графов, E_A, E_B – множества ребер графов. $|V_A| = |V_B|, |E_A| = |E_B|$. Графы $G_A = \langle V_A, E_A\rangle$ и $G_B = \langle V_B, E_B\rangle$ изоморфны (обозначается $G_A \cong G_B$) тогда и только тогда, когда существует такое биективное отображение $\psi : V_A \to V_B$, что $(i, j) \in E_A \Leftrightarrow (\psi(i), \psi(j)) \in E_B$. ■

В данной работе матрицы, представляющие графы, являются видоизмененными матрицами смежности графов, используя которые можно эквивалентным образом переформулировать определение изоморфных графов так же, как оно может быть переформулировано с помощью матриц смежности графов.

Определение 2. Даны неориентированные графы $G_A = \langle V_A, E_A\rangle$ и $G_B = \langle V_B, E_B\rangle$. $|V_A| = |V_B|$, $|E_A| = |E_B|$. Графы G_A и G_B изоморфны тогда и только тогда, когда существует матрица перестановки P такая, что $A = PBP^{-1}$. ■

В этом определении A, B – видоизмененные матрицы смежности графов G_A, G_B. Матрицы видоизменяются до положительно определенных так же, как

E-mail: prolubnikov@univer.omsk.su
Омский государственный университет

это делалось в работе [2]. Пусть A_0 – матрица смежности графа $G_A = \langle V_A, E_A \rangle$. В соответствии с матрицей A_0 строим диагональную матрицу D_{A_0}:

$$\begin{pmatrix} d_{11}^A & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_{22}^A & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_{nn}^A \end{pmatrix}$$

со следующими элементами на диагонали:

$$d_{ii}^A = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^0 + d = d_i + d,$$

где d – максимальная степень вершин в графе G_A, а d_i – степень вершины $i \in V_A$. Аналогично по матрице B_0 строится матрица D_{B_0}.

Матрицы, с которыми работает алгоритм, имеют следующий вид:

$$A = A_0 + D_{A_0},\ B = B_0 + D_{B_0}. \tag{1}$$

Введем следующие обозначения. $A_{(i,j)}$ – подматрица матрицы A, получаемая из нее вычеркиванием i-й строки и j-го столбца. $A(i_1, \dots, i_k)$ – подматрица A, получаемая из нее вычеркиванием рядов с номерами $i_1, \dots, i_k$ такими, что $i_p \neq$ $\neq i_q$, если $p \neq q$. Под i-м рядом матрицы понимаются элементы i-й строки и i-го столбца матрицы. $A_{(i,j)}(i_1, \dots, i_k)$ – подматрица матрицы A, получаемая из нее вычеркиванием i-й строки и j-го столбца и рядов с номерами $i_1, \dots, i_k$ таких, что $i, j \neq i_p,\ p = \overline{1,k}$. Пусть

$$A^{i_1,\dots,i_k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) = A + \sum_{j=1}^{k} \varepsilon_j E^{i_j},$$

где

$$E^j = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} - \ 1 \\ \vdots \\ - \ j \\ \vdots \\ - \ n \end{array},$$

$\varepsilon_j \in \mathbb{R}$, $\varepsilon_j > 0$, $j = \overline{1,k}$.
$G_A^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ – граф с матрицей смежности $A^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$.
$\overline{a}_{ij}^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ – элемент обратной к $A^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ матрицы.

Определение 3. Будем называть графы $G_A^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ и $G_B^{i_1,\dots,i_k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ *подобными* ($k = \overline{0,n}$), если существуют такие биективные отображения $\psi,\ \varphi_i : V_A \to V_B,\ i = \overline{1,n}$, что

$$\forall i, j :\ \overline{a}_{ij}^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) \equiv \overline{b}_{\psi(i)\varphi_i(j)}^{\psi(1),\dots,\psi(k)}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k).$$

■

Подобие графов $G_A^{1,\ldots,k}(\varepsilon_1,\ldots,\varepsilon_k)$ и $G_B^{i_1,\ldots,i_k}(\varepsilon_1,\ldots,\varepsilon_k)$ будем обозначать как

$$G_A^{1,\ldots,k}(\varepsilon_1,\ldots,\varepsilon_k) \sim G_B^{i_1,\ldots,i_k}(\varepsilon_1,\ldots,\varepsilon_n).$$

Будем называть отображение ψ из определения подобия графов c-отображением, отображения φ – r-отображениями.

Определение подобия графов является ослаблением определения изоморфизма графов, поскольку для определения подобия графов вместо одного отображения ψ, задающего изоморфизм графов, мы требуем лишь существования одного c-отображения и не более n каких-либо r-отображений φ_i, необязательно совпадающих с ψ. При этом c-отображение задает отображение i-го столбца обратной матрицы одного графа в соответствующий $\psi(i)$-й столбец обратной матрицы второго графа, равный ему с точностью до перестановки его элементов, задаваемой при помощи соответствующего r-отображения φ_i. При $\psi \equiv \varphi_i$, $i = \overline{1,n}$ определение подобия графов эквивалентно определению изоморфизма графов.

Определение подобия графов тесно связано со спектральными свойствами самих графов и ассоциированных с ними графов. Графы ассоциируются следующим образом: G_A^{ij}, $i,j = \overline{1,n}$ – графы, матрицы смежности $A_{(i,j)}$ которых являются подматрицами матрицы A графа вида (1), получаемыми удалением из нее i-й строки и j-го столбца. Матрица $A_{(i,j)}$ при $i \neq j$, вообще говоря, несимметрическая, этой матрице соответствует некоторый ориентированный граф с петлями G_A^{ij}. G_A^{ii} $(i = \overline{1,n})$ – граф, получаемый из G_A отбрасыванием вершины i и всех инцидентных ей ребер, за исключением петель. Аналогично определяются графы G_B^{ij}, $i,j = \overline{1,n}$.

Пусть

$$\Lambda_A^{ij} = \prod_{k=1}^{n-1} \lambda_k(G_A^{ij}),\ \ \Lambda_B^{ij} = \prod_{k=1}^{n-1} \lambda_k(G_B^{ij}),$$

$$\Lambda_A = \prod_{k=1}^{n} \lambda_k(G_A),\ \ \Lambda_B = \prod_{k=1}^{n} \lambda_k(G_B),$$

где $\lambda_k(G_A^{ij})$ – k-е собственное значение матрицы $A_{(i,j)}$, $\lambda_k(G_B^{ij})$ – k-е собственное значение матрицы $B_{(i,j)}$, $\lambda_k(G_A)$ – k-е собственное значение матрицы A, $\lambda_k(G_B)$ – k-е собственное значение матрицы B.

$$\overline{a}_{ij} = \frac{A_{ij}}{|A|} = \frac{\Lambda_A^{ij}}{\Lambda_A}, \quad \overline{b}_{ij} = \frac{B_{ij}}{|B|} = \frac{\Lambda_B^{ij}}{\Lambda_B}.$$

То есть графы G_A и G_B подобны тогда и только тогда, когда существуют отображения $\psi, \varphi_i : V_B \to V_A$, и графы G_A^{ij} и $G_B^{\psi(i)\varphi_i(j)}$, $i,j = \overline{1,n}$ имеют спектры такие, что произведение всех собственных значений из одного спектра равно произведению всех собственных значений из второго:

$$\prod_{k=1}^{n-1} \lambda_k(G_A^{ij}) = \prod_{k=1}^{n-1} \lambda_k(G_B^{\psi(i)\varphi_i(j)}).$$

Рассмотрим, как происходит изменение элементов обратных матриц к матрицам графов при изменении диагональных элементов матриц графов.

Пользуясь формулой разложения определителя по строке, получаем:

$$\det A^1(\varepsilon_1) = \det A + \varepsilon_1 \det A_{(1,1)}.$$

Далее,

$$\det A^{1,2}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \det A^1(\varepsilon_1) + \varepsilon_2 \det A^1_{(2,2)} = \det A + \varepsilon_1 \det A_{(1,1)} +$$

$$+\varepsilon_2(\det A_{(2,2)} + \varepsilon_1 \cdot \det A_{(1,2)}) = \det A + \varepsilon_1 \det A_{(1,1)} + \varepsilon_2 \det A_{(2,2)} + \varepsilon_1\varepsilon_2 \det A_{(1,2)}.$$

Продолжая это разложение k раз, получаем:

$$A^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) = \det A + \sum_{q=1}^{k} \left[\sum_{p=1}^{C_k^q} \left(\prod_{t=1}^{q} \varepsilon_{p_t} \right) \det A(i_{p_1}, \dots, i_{p_q}) \right]. \tag{2}$$

Аналогично получаем выражение для $A^{1,\dots,k}_{(i,j)}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$:

$$A^{1,\dots,k}_{(i,j)}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) = \det A + \sum_{q=1}^{k} \left[\sum_{p=1}^{C_k^q} \left(\prod_{t=1}^{q} \varepsilon_{p_t} \right) \det A_{(i,j)}(i_{p_1}, \dots, i_{p_q}) \right]. \tag{3}$$

Подчеркнем, что $i, j \neq i_{p_1}, \dots, i_{p_q}$, то есть номера $i_{p_1}, \dots, i_{p_q}$ берутся во всевозможных C_k^q сочетаниях из k элементов по q, за исключением тех сочетаний, в которых присутствует i или j.

Поскольку

$$\overline{a}^{1,\dots,k}_{ij}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) = (-1)^{i+j} \frac{A^{1,\dots,k}_{(i,j)}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)}{A^{1,\dots,k}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)},$$

то из (2) и (3) получаем

$$\overline{a}^{1,\dots,k}_{ij}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) = (-1)^{i+j} \frac{\det A + \sum\limits_{q=1}^{k} \left[\sum\limits_{p=1}^{C_k^q} \left(\prod\limits_{t=1}^{q} \varepsilon_{p_t} \right) \det A(i_{p_1}, \dots, i_{p_q}) \right]}{\det A + \sum\limits_{q=1}^{k} \left[\sum\limits_{p=1}^{C_k^q} \left(\prod\limits_{t=1}^{q} \varepsilon_{p_t} \right) \det A(i, j; i_{p_1}, \dots, i_{p_q}) \right]}. \tag{4}$$

То есть $\overline{a}^{1,\dots,k}_{ij}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ является отношением двух многочленов от переменных $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k$, линейных по каждой из этих переменных.

Теорема 1. *$G_A \simeq G_B$ тогда и только тогда, когда существует биективное отображение $\psi : V_A \to V_B$ такое, что для любого $k = \overline{1, n}$*

$$G^{1,\dots,k}_A(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) \sim G^{\psi(1),\dots,\psi(k)}_B(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k).$$

Доказательство. Пусть $G_A \simeq G_B$ и $\psi : V_A \to V_B$ – изоморфизм. Матрица смежности графа $G_A^{1,\dots,n}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n)$ имеет вид

$$A^{1,\dots,n}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n) = A + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j E^j,$$

графа $G_B^{\psi(1),\dots,\psi(n)}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n)$ –

$$B^{\psi(1),\dots,\psi(n)}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n) = B + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j E^{\psi(j)}.$$

Пусть P – матрица перестановки, соответствующая ψ. Тогда

$$P^{-1}(B + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j E^{\psi(j)})P = P^{-1}BP + P^{-1}\sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j E^{\psi(j)}P =$$

$$= P^{-1}BP + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j P^{-1}E^{\psi(j)}P = A + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j E^j.$$

Следовательно, $G_A \simeq G_B$ только тогда, когда

$$G_A^{1,\dots,n}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n) \simeq G_B^{\psi(1),\dots,\psi(n)}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n)$$

и ψ – изоморфизм, а значит, когда

$$G_A^{1,\dots,n}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n) \sim G_B^{\psi(1),\dots,\psi(n)}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n).$$

Пусть $k = n$ и существует биективное отображение ψ такое, что

$$G_A^{1,\dots,n}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n) \sim G_B^{\psi(1),\dots,\psi(n)}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n).$$

Рассмотрим набор номеров $i, j, i_1, \dots, i_{n-2}$ таких, что $i, j \neq i_k,\ k = \overline{1, n-2}$ и $i \neq j$. Так как $\overline{a}_{ij}^{1,\dots,n}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n) \equiv \overline{b}_{\psi(i)\varphi_i(j)}^{\psi(1),\dots,\psi(n)}(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n)$, то многочлены в числителе и знаменателе (4) для соответствующих элементов обратных матриц графов равны, то есть

$$\det A_{(i,j)}(i_1,\dots,i_{n-2}) = \det B_{(\psi(i),\varphi_i(j))}(\psi(i_1),\dots,\psi(i_{n-2})),$$

$$\det A(i_1,\dots,i_{n-2}) = \det B(\psi(i_1),\dots,\psi(i_{n-2})).$$

$\psi(i), \psi(i_1), \dots, \psi(i_{n-2})$ — $(n-1)$-значение биекции ψ, и все эти значения отличны друг от друга. $\varphi_i(j)$ не равно $\psi(i_1), \dots, \psi(i_{n-2})$ по определению $B_{\psi(i),\varphi_i(j))}(\psi(i_1), \dots, \psi(i_{n-2}))$. То есть

$$\psi(j) \neq \psi(i), \psi(i_1), \dots, \psi(i_{n-2}),$$

$$\varphi_i(j) \neq \psi(i), \psi(i_1), \dots, \psi(i_{n-2}),$$

и поэтому $\psi_j = \varphi_i(j)$. Таким образом,

$$\det A_{(i,j)}(i_1, \ldots, i_{n-2}) = \det B_{(\psi(i),\psi(j))}(\psi(i_1)), \ldots, \psi(i_{n-2})).$$

Но

$$\det A_{(i,j)}(i_1, \ldots, i_{n-2}) = a_{ij},$$
$$\det B_{(\psi(i),\psi(j))}(\psi(i_1), \ldots, \psi(i_{n-2})) = b_{\psi(i)\psi(j)},$$

и значит,

$$a_{ij} = b_{\psi(i)\psi(j)}$$

Следовательно, отображение ψ – изоморфизм. ■

Определение 4. Будем называть граф *восстановимым*, если любой граф, ему подобный, является изоморфным ему графом. ■

Для восстановимых графов изоморфизм эквивалентен их подобию. Следовательно, по доказанной теореме 1 для двух восстановимых графов, являющихся изоморфными друг другу, переход от графов G_A и G_B к графам $G_A^{1,\ldots,k}(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_k)$ и $G_B^{i_1,\ldots,i_k}(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_k)$, где $k \neq 0$ и k последовательно принимает значения $1, \ldots, n$, может быть произведен так, что

$$G_A^{1,\ldots,k}(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_k) \sim G_B^{i_1,\ldots,i_k}(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_k)$$

для каждого k, что эквивалентно их изоморфизму:

$$G_A^{1,\ldots,k}(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_k) \simeq G_B^{i_1,\ldots,i_k}(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_k).$$

Таким образом, класс графов, на котором за полиномиальное количество машинных операций алгоритм, представленный в [2], дает решение задачи проверки изоморфизма графов, может быть определен как класс восстановимых графов. Подчеркнем, что под полиномиальностью времени работы алгоритма понимается в данном случае полиномиальная зависимость (от мощностей множеств вершин графов, поданных на вход) количества элементарных машинных операций, за которое может быть получено решение задачи проверки изоморфизма графов.

Литература

1. Пролубников А.В., Файзуллин Р.Т. *Эвристический алгоритм дешифрования шифра двойной перестановки* // Математические структуры и моделирование. 2002. Вып. 9. С. 62-69.
2. Пролубников А.В., Файзуллин Р.Т. *Класс графов, задача проверки изоморфизма для которых разрешима за полиномиальное время алгоритмом спектрального расщепления* // Математические структуры и моделирование. 2003. Вып. 11. С. 28-57.