图同构问题的决策神经网络模型

南晋华　　齐　欢

（华中科技大学控制科学与工程系　武汉　430074）

摘　要　图的同构问题是研究两个图之间相互关系范畴. 这对图表面上似乎不同，但本质上完全相同. 由于图的同构问题在以系统建模、电路布线等众多问题中有直接的应用，因而，吸引了不少的学者从事这方面的研究. 该文意在建立一种局域连接的、模拟人脑决策思维模式的、可用于优化信息处理的神经网络模型. 该文在过去建立求解图的同构问题人工神经网络模型的基础上，拟应用人脑决策局域化的思想，提出了一种新的用于图的同构问题的人工神经网络模型. 该模型中增加了一个自然的约束条件，加快了运算速度.

关键词　图；同构；决策；神经网络

中图法分类号　TP301　　**DOI 号**：10.3724/SP.J.1016.2010.00300

The Decision-Making Neural Networks Model for Solving the Graph Isomorphism Problem

NAN Jin-Hua　QI Huan

(*Department of Control Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan*　430074)

Abstract　The graph isomorphism problem is to study the relationship between two graphs which seem to be different, but essentially identical. This problem can be widely used in the system modeling, circuit wiring and many other issues. Therefore, this paper is aimed to establish a kind of neural networks model that are of local-connection, simulation human's decision-making thinking, and also can be applied to solve the optimization for information. The authors use a natural constraint in order to speed up the operations, and then proposed a new artificial neural network model to solve the graph isomorphism problem.

Keywords　graph; isomorphism; decision-making; neural networks model

1　引　言

图的同构问题不仅是数学，特别是图论自身学科研究中的一个核心内容，而且具有良好的应用背景，在工程技术领域，特别是大系统建模、电路设计、机械设计、模式识别以及系统建模中有着广泛的应用. 对于系统建模，如果能够证明需建模型与已知模型同构，则可以节省大量人力物力财力. 多数学者认为图的同构判定问题属于 NP-完全问题. 但至今没有定论，即它究竟是 P 问题还是 NP 问题？目前关于图的同构问题的判定性算法不少，有诸如经典判定算法[1-8]、对在实际工程中有着广泛应用的图的拟同构问题算法[9-12]、进化计算方法[13]、人工神经网络求解算法[14-18]以及最新的 DNA 计算模型[19-20]等. 在经典的图同构算法中，在此主要介绍两种算法，一种是所谓的矢量列表法，另一种是回溯算法.

研究图的同构问题，一个重要的环节是如何表示图的信息. 在这个问题上，Comeil 与 Hffman 等人曾引入“模块”这一概念来表示各个顶点及其邻接顶

收稿日期：2009-07-06；最终修改稿收到日期：2009-11-06. **南晋华**，女，1972 年生，博士，主要研究方向为系统工程、决策支持系统. **齐　欢**（通信作者），男，1948 年生，博士，教授，主要研究领域为系统分析与建模等. E-mail：qihuan@mail.hust.edu.cn.

点信息. 在此基础上 Riaz 提出一种有效的判定图同构问题的算法——矢量列表法，即把各顶点所代表的信息用模块表示，所有模块组合在一起构成矢量列表. 设计算法依次比较各模块，最终得到同构信息. 并在此基础上建立了判定图同构的矢量列表法.

图同构的回溯算法是一种利用 K-算子表示图结构，然后通过比对序列求解图同构映射的方法. K-算子这一概念最初由 Kride 等人提出，文献[11-12]对这一算法进行了深入的探讨和改进，对这一方法进行了系统的论述，并给出了适合计算机求解的算法. 虽然通过仿真结果证明了这种回溯算法的可行性，但是要严格地给出时间复杂度估计不是很容易的事情. 尽管如此，这种试图从图的结构上来判定同构性的思想无疑是值得借鉴的，它通过引入算子，把给定图表示成字符串的形式，然后通过回溯模式识别，逐步求得可能的同构序列，最终得到两图是否同构的结论.

遗传算法由 Holland 等人于 20 世纪 60 年代末提出，模拟生化机制进行优化计算[21]. 图的同构问题稍加扩充，引伸成具有一定应用背景的所谓的拟同构的概念. 当两个图相近程度达到要求误差范围之内时，称两个图为拟同构.

图的拟同构的一个很重要的应用就是在模式识别中，通常把事物的特征及其相互作用表示成赋权图. 该算法把一个图同构的判定问题分解在 GA 中进行求解. 通过引入初始匹配，进化速度加快，用顶点映射来代替常规算法中的行列交换，鉴于 GA 求解随机搜索问题的有效性，在图的拟同构判定中，该算法也就显得十分有效.

DNA 计算是一种以 DNA 分子与相关生物酶为基本材料，以某些生化反应为基础的一种全新的计算模式. 利用 DNA 特殊的双螺旋结构和碱基互补规律进行信息编码，把运算对象映射成 DNA 分子链，生成数据池，然后把数据运算高度并行地映射成 DNA 的可控生化过程，最后利用分子生物技术，检测出需要的结果. 在利用 DNA 计算求解图论中的问题这一领域已经取得了不少的成果，文献[19]中利用粘贴 DNA 计算模型建立求解图同构问题的 DNA 计算模型. 文献[22]利用 k-臂 DNA 计算模型建立了另外一种求解图同构问题的模型.

应用 Hopfield 网络研究图的同构问题始于马颂德[15]、陈国良[16-17]等人. 其后，有一些学者利用神经网络模型来研究图的同构问题，如 Brijnesh 与 Fritz 提出了一种解决严格与非严格赋权图同构的神经网络方法. 有别于其它的启发式及关联式算法，该方法巧妙设计了神经计算程序，通过一能量最小化匹配处理减小了搜索空间[23]. 本文在已有工作的基础上，通过加入顶点邻域的思想，将顶点度加入到能量函数之中，进而加入到网络的运行方程之中，使网络的运行速度得以加快，自然也减少了一些局部极小值，从而建立了一种新的求解图的同构问题的神经网络算法.

2　图的同构

两个表面上似乎很不相同的图，本质上可能是完全一样的，或者说，这两个图是同构的. 如图 1 中所示的三组图：M 与 M'；H 与 H'；G 与 G'，它们表面上不同，但实际上每组图之间是同构的. 其中的图 M 就是著名的 Petersen 图. 在本文中分别用 $V(G)$，$E(G)$分别表示图 G 的顶点集和边集.

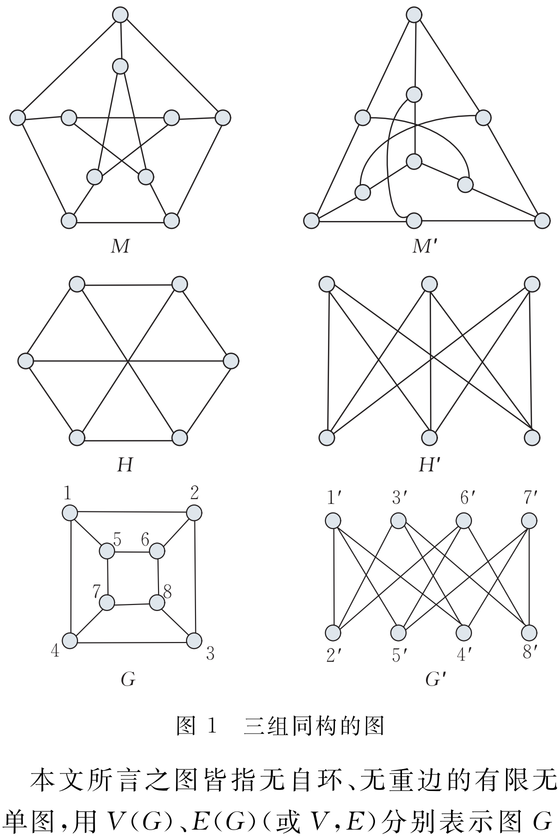

图 1　三组同构的图

本文所言之图皆指无自环、无重边的有限无向简单图，用 $V(G)$、$E(G)$（或 V，E）分别表示图 G 的顶点集和边集，两个图 G 与 G'，称为是同构的，如果存在一个从 $V(G)$到 $V(G')$之间的保持相邻性的 1-1 映射，换言之，存在 1-1 映射：$\sigma: V(G) \to V(G')$，且 $\forall\, u, v \in V(G)$，$uv \in E(G)$ 当且仅当 $\sigma(u)\sigma(v) \in E(G')$，称 σ 是从 G 到 G'的一个同构映射. 全体从 G 到 G'的同构映射构成的集合记作 $I(G,G')$.

3 模型及算法

设 G 与 G' 是两个同构的图，$V(G)=\{x_1, x_2,\cdots,x_p\}$，$V(G')=\{y_1,y_2,\cdots,y_p\}$，$\sigma\in I(G,G')$ 且满足

$$\sigma(x_i)=y_l,\ i,l=1,2,\cdots,p \tag{1}$$

置 (x_i,y_l) 为网络的神经元，它表示同构映射 σ 把图 G 的顶点 x_i 映射到图 G' 的顶点 y_l. 显然，由此而构成的神经网络共有 $p\times p$ 个神经元. 当网络稳定时，用 v_{il} 表示神经元 (x_i,y_l) 的输出，定义：

$$v_{il}=\begin{cases}1, & \sigma(x_i)=y_l\\ 0, & \text{否则}\end{cases} \tag{2}$$

例如，图 1 中第三组中所示的两个图 G 和 G' 是同构的，其中一个同构映射为

$$\sigma=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8\\ 1' & 7' & 4' & 6' & 5' & 3' & 8' & 2'\end{pmatrix}.$$

由同构映射 σ 可构成一个 $p\times p$ 阶矩阵 $\boldsymbol{V}^{\sigma}=(v_{il})_{p\times p}$，称为置换矩阵，如图 1 中两个 8-阶的 3-正则图 G 和 G'，σ 是一个保持相邻性的从 $V(G)$ 到 $V(G')$ 的同构映射，由式(2)可得

$$\boldsymbol{V}^{\sigma}=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&1&0&0&0&0&0&0\end{pmatrix}.$$

下面来分析一下 $\boldsymbol{V}^{\sigma}$ 的一些基本性质：

由 σ 是 1-l 映射，保证了 $\boldsymbol{V}^{\sigma}$ 的每一行、每一列有且仅有一个元素为 1，而其余的元素均为 0. 由此获得

$$\sum_{l=1}^{p}v_{il}=1,\ i=1,2,\cdots,p \tag{3}$$

$$\sum_{i=1}^{p}v_{il}=1,\ l=1,2,\cdots,p \tag{4}$$

设图 G 与 G' 的相邻矩阵分别为 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}'$，$\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{p\times p}$，$\boldsymbol{A}'=(a'_{ij})_{p\times p}$，于是，由 σ 可保持相邻性有：对于 $\forall x_i,x_j\in V(G)$，

$$\begin{cases}ij\in E(G)\Leftrightarrow\sigma(i)\sigma(j)=lm\in E(G')\\ ij\notin E(G)\Leftrightarrow\sigma(i)\sigma(j)=lm\notin E(G')\end{cases} \tag{5}$$

即

$$\begin{cases}a_{ij}=1\Leftrightarrow a'_{lm}=1\\ a_{ij}=0\Leftrightarrow a'_{lm}=0\end{cases} \tag{6}$$

基于式(2)和式(6)，有

$$(a_{ij}-a'_{lm})v_{il}v_{jm}=0,\ i,j,l,m=1,2,\cdots,p \tag{7}$$

令 $V(G)=\{x_1,x_2,\cdots,x_p\}$. 设 $x_i\in V(G)$，用 $\Gamma(x_i)$ 来表示顶点 x_i 在图 G 中的邻域，用 $d_i=|\Gamma(x_i)|$ 来表示顶点 x_i 的度数，$i=1,2,\cdots,p$. 我们约定，一个图 G 的度序列，记做 $\pi(G)$，是指满足单调递增的度序列：

$$\pi(G)=(d_1,d_2,\cdots,d_p),$$

其中，

$$d_1\le d_2\le\cdots\le d_p,$$

同样，$V(G')=\{y_1,y_2,\cdots,y_p\}$，且令 $d'_{G'}(y_j)=d'_j$ 来表示图 G' 中顶点 y_j 的度数，$j=1,2,\cdots,p$. 自然，两个图 G 与 G' 是同构的，它们的度序列也应该相同. 对于神经元 (x_i,y_j) 而言，若 $\sigma\in I(G,G')$，且

$$\sigma(x_i)=y_j \tag{8}$$

则有

$$d_i=d'_j \tag{9}$$

基于式(2)、(8)和式(9)，有

$$(d_i-d'_l)v_{il}v_{il}=0,\ i,l=1,2,\cdots,p \tag{10}$$

把满足式(3)、(4)、(7)和式(8)的关于图 G 与图 G' 的 0-1 矩阵 $\boldsymbol{V}^{\sigma}$ 的全体集合记做 $P(G,G')$，于是有如下定理.

定理 1. 设图 G 与 G' 是两个同构的 $p(\ge 2)$ 阶图，则 $I(G,G')$ 与 $P(G,G')$ 通过式(2)等价.

证明. 对于任一同构映射 $\sigma\in I(G,G')$，令 $V(G)=\{x_1,x_2,\cdots,x_p\}$，$V(G')=\{y_1,y_2,\cdots,y_p\}$，且

$$\sigma(x_i)=y_l,\ i,l=1,2,\cdots,p,$$

令

$$v_{il}=\begin{cases}1, & \sigma(x_i)=y_l\\ 0, & \text{否则}\end{cases},$$

则由 v_{il} 构成的矩阵 $\boldsymbol{V}^{\sigma}=(v_{il})_{p\times p}$ 显然满足式(2)、(4)、(7)和式(10). 因此，唯一地有

$$\boldsymbol{V}^{\sigma}\in P(G,G').$$

反过来，对于 $\forall\boldsymbol{V}^{\sigma}\in P(G,G')$，由于 $\boldsymbol{V}^{\sigma}$ 满足式(3)和式(4)，因此，每行每列有且只有一个元素为 1，其余元素皆为 0. 当 $v_{il}=1$，$\sigma(x_i)=y_l(i,l=1,2,\cdots,p)$，则由式(3)、(4)知，$\sigma$ 是从 $V(G)$ 到 $V(G')$ 之间的一个 1-1 映射. 下面，来证明 σ 是保持相邻性的 1-1 映射. 对于 $\forall x_i,x_j\in V(G)$，如果

(i) $x_ix_j\in E(G)$，且 $\sigma(x_i)=y_l$，$\sigma(x_j)=y_m$，则有 $a_{ij}=1$，$v_{il}=v_{jm}=1$，代入式(7)，有

$$(1-a'_{lm})\times 1\times 1=0,$$

即

$$a'_{lm}=1,$$

此即

$$\sigma(x_i)\sigma(x_j) = y_l y_m \in E(G').$$

(ii) $x_i x_j \notin E(G)$，且 $\sigma(x_i)=y_l$，$\sigma(x_j)=y_m$，则 $a_{ij}=0$，$v_{il}=v_{jm}=1$，代入式(7)得到

$$a'_{lm} = 0,$$

从而推得

$$\sigma(x_i)\sigma(x_j) = y_l y_m \notin E(G').$$

综合(i)、(ii)，证明了 σ 是保持相邻性的 1-1 映射，故知 $\boldsymbol{V}^{\sigma}$ 唯一地找到一个 $\sigma \in I(G,G')$，从而本定理获证.　　证毕.

在上述工作的基础上，现在来建立具体的能量函数. 与已有的结果相比，此能量函数增加了顶点的邻域性，即将图顶点度数作为一个"加速参数"加入到了能量函数之中，进而导入网络的运行方程.

设 G 与 G' 表示两个同构图，$V(G)=\{x_1, x_2,\cdots,x_n\}$，$V(G')=\{y_1,y_2,\cdots,y_p\}$，置神经元为 (x_i,y_j)，表示从图 G 中的顶点到图 G' 的同构映射，由此而构造的能量函数为

$$E = \frac{A}{2}\sum_{i=1}^{2}\Big(\sum_{l=1}^{n} v_{il}-1\Big)^2 + \frac{B}{2}\sum_{l=1}^{n}\Big(\sum_{i=1}^{n} v_{il}-1\Big)^2 + C\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{m=1}^{n} |a_{ij}-a'_{lm}|\, v_{il}v_{jm} + \frac{D}{2}\sum_{i=1}^{p}\sum_{l=1}^{p} |d_i-d'_l|\, v_{il}^2,$$

其中 $(a_{ij})_{n\times n}$，$(a'_{lm})_{n\times n}$ 分别表示 n 阶图 G 和 G' 的邻接矩阵. 其中 E 的第 1 项称为行约束项，当且仅当 $\boldsymbol{V}^{\sigma}$ 中的每一行只有一个 1，其余元素为 0 时，此项为 0；第 2 项为列约束，当且仅当每列中只有一个元素为 1，且其余元素为 0 时，此项为 0；第 3 项为惩罚项，当且仅当 1-1 映射 σ 保持相邻性时，此项为 0；第 4 项为顶点度数惩罚项，当且仅当映射中对应顶点度数相同时，此项为 0.

神经元 (x_i,y_j) 的运行方程为

$$\frac{\mathrm{d}u_{il}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial E}{\partial v_{il}(t)},\ i,l=1,2,\cdots,p \tag{11}$$

进而导出

$$\frac{\mathrm{d}u_{il}}{\mathrm{d}t} = -A\Big(\sum_{l=1}^{n} v_{il}-1\Big) - B\Big(\sum_{i=1}^{n} v_{il}-1\Big) - C\Big(\sum_{l=1}^{n}\sum_{m=1}^{n}|a_{ij}-a'_{lm}|\,v_{lm}\Big) + D\Big(\sum_{i=1}^{p}\sum_{l=1}^{p}|d_i-d_l|\,v_{il}\Big) \tag{12}$$

$$v_{il} = \frac{1}{2}\left(1+\tanh\frac{u_{il}}{\beta}\right) \tag{13}$$

其中，$u_{il}(t)$ 表示神经元 (x_i,y_j) 在 t 时刻的状态，A，B，C，D 以及 β 表示实验参数. 网络的权值 $w_{il,jm}$ 和偏置电流 I_{il} 为

$$\begin{cases} w_{il,jm} = -A\delta_{ij} - B\delta_{lm} - C|a_{ij}-a'_{lm}| - D|d_i-a'_l| \\ I_{il} = -(A+B) \end{cases},$$

$$i,j,l,m=1,2,\cdots,p \tag{14}$$

其中，

$$\delta_{ij} = \begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases} \tag{15}$$

基于上述，现给出本文提出求解图的同构问题人工神经网络模型的具体算法步骤：

1. 设置 $t=0$ 以及 A,B,C,D；
2. 读入图 G 与 G' 的邻接矩阵 $(a_{ij})(i,j=1,2,\cdots,p)$，$(a'_{lm})(l,m=1,2,\cdots,p)$；
3. 计算神经元之间的权重 $w_{il,jm}$ 和输入偏置电流 I_{il}；
4. $u_{il}(t)(i,l=1,2,\cdots,p)$ 的初值在 0 附近随机产生；
5. 计算 $v_{il}(t)(i,l=1,2,\cdots,p)$，$\beta$ 为实验参数；
6. 利用神经元运行方程计算 $\Delta u_{il}(t)(i,l=1,2,\cdots n)$

$$\Delta u_{il}(t) = \sum_{j=1}^{n}\sum_{m=1}^{n} w_{il,jm}v_{jm} + I_{il};$$

7. 根据一阶 Euler 法计算 $u_{il}(t+1)$，

$$u_{il}(t+1) = u_{il} + \Delta u_{il}(t)\Delta t,\ i,l=1,2,\cdots,p;$$

8. 若系统达到平衡，终止，否则，转步 5.

4 结　论

本文对图论中的图同构问题算法求解进行了较为系统的讨论，评述了在图的同构中不同问题的各种常规的算法，以及在系统优化、模式识别中有着广泛应用的同构问题的非常规算法. 作为图论中有着广泛应用的一个重要的分支，我们给出的算法有着很大的现实意义与实用性.

参 考 文 献

[1] West D B. Intorduction to Graph Theory (2nd Edition). NJ: Prentice Hall Upper Saddle River, 2001(in Chinese)
(韦斯特. 图论导引(第 2 版). 李建中，骆吉洲译. 北京：机械工业出版社，2007)

[2] Xu Jun-Ming. Graph Theory and Application. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2004(in Chinese)
(徐俊明. 图论及其应用. 合肥：中国科技大学出版社，2004)

[3] Wang Shu-He. Graph Theory. Beijing: Science Press, 2007 (in Chinese)
(王树禾. 图论. 北京：科学出版社，2007)

[4] Riaz K, Khiyal M S H, Arshad M. An improved algorithm to discover graph isomorphism//Proceedings of the 7th International Multi Topic Conference (INMIC 2003). Pakistan, 2003: 396-399

[5] Bayer T, Jones W, Mitchel S. Linear algorithms for isomorphism of maximal outerplanar graphs. Journal of the Association for Computing Machinery, 1979, 26: 603-610

[6] Mitchell S, Beyer T, Jones W. Linear algorithms for isomorphism of maximal outerplanar graphs. Journal of the ACM (JACM), 1979, 26(4): 603-610

[7] Srabani S G, Bhabani P S. A simple $O(\log N)$ time parallel algorithm for testing isomorphism of maximal outerplanar graphs. Journal of Parallel and Distributed Computing, 1999, 56(2): 144-155

[8] Li Feng, Shang Hui-Liang. An Isomorphism Testing algorithm for directed graphs: The in-degree and out-Degree sequence method. Journal of Applied Sciences, 2002, 20(3): 258-262(in Chinese)
(李锋,商慧亮. 有向图的同构判定算法. 应用科学学报, 2002, 20(3): 258-262)

[9] Krider L. A flow analysis algorithm. Journal of the ACM, 1964, 11(4): 429-436

[10] Read R, Corneil D. The graph isomorphism disease. Journal of Graph Theory, 1977, 1(1): 339-363

[11] Berztiss A T, Watkins R P. Directed graphs and automatic flowcharting//Proceedings of the 4th Austral. Comp. Conference Adelaide. Netley, South Australia: Griffin Press, 1969: 495-499

[12] Berztiss A T. Data Structures: Theory and Practice. New York-London: Academic Press, 1971

[13] Wang Y K, Fan K C, Horng J T. Genetic-based search for error-correcting graph isomorphism. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 1997, 27(5): 588-597

[14] Xu Jin, Zhang Jun-Ying, Bao Zheng. Algorithm for the isomorphism of graphs based on hopfield networks. Journal of Electronics, 1996, 18(Supplement): 116-121(in Chinese)
(许进,张军英,保铮. 基于 Hopfield 神经网络的图的同构算法. 电子科学学刊, 1996, 18(增刊): 116-121)

[15] Ma Song-De. Neural networks and combinatorial optimization//Proceedings of the 1st China Conference on Neural Networks. Beijing, 1990: 22-28(in Chinese)
(马颂德. 神经网络与组合优化//中国神经网络首届学术大会论文集. 北京, 1990: 22-28)

[16] Chen Guo-Liang. Solving combinatorial optimization problems based on neural networks//Proceedings of the 1st China Conference on Neural Networks. Beijing, 1990: 122-129(in Chinese)
(陈国良. 神经网络用于求解组合优化问题//中国神经网络首届大会论文集. 北京, 1990: 122-129)

[17] Liang Wei-Fa. Solving some hard problems in graph theory based on neural networks//Proceedings of the 1st China Conference on Neural Networks. Beijing, 1990: 924-927(in Chinese)
(梁维发. 等用神经网络求解一些困难的图论问题//中国神经网络首届大会论文集. 北京, 1990: 924-927)

[18] Ae T, Agusa K, Fujita S, Yamashita M. On neural networks for graph isomorphism problem//Proceedings of the RNNS/IEEE Symposium on Neuroinformatics and Neurocomputers. Russia, 1992: 1142-1148

[19] Xu Jin, Li San-Ping, Dong Ya-Fei, Wei Xiao-Peng. Sticker model of DNA computer (Ⅱ): application. Chinese Science Bulletin, 2004, 49(4): 299-307(in Chinese)
(许进,李三平,董亚非,魏小鹏. 粘贴 DNA 计算机模型(II): 应用. 科学通报, 2004, 49(4): 299-307)

[20] Liu G W, Yin Z X, Xu J. Algorithm of graph isomorphism with three dimensional DNA graph structures. Progress in Natural Science, 2005, 15(2): 181-184

[21] Holland J H. Adaptation in Naural and Artificial systems. Ann Arbor: Michigan University Press, 1975

[22] Chen Guo-Liang, Wang Xu-Fa. Genetic Algorithm and Its Application. Beijing: Posts & Telecom Press, 1996(in Chinese)
(陈国良,王煦法. 遗传算法及其应用. 北京: 人民邮电出版社, 1996)

[23] Brijnesh J J, Fritz W. A novel neural network approach to solve exact and inexact graph isomorphism problems//Proceedings of the ICANN 2003. Istanbul, Turkey, 2003: 299-306

NAN Jin-Hua, born in 1972, Ph. D.. Her research interests include system engineering, DSS etc.

QI Huan, born in 1948, Ph. D., professor. His major research interests include system analysis, modeling and simulation.