Spekter grafov: II del

R. Škrekovski

12. maj 2014

Trditev. *Če je G disjunktna unija grafov G_1 in G_2, potem je*

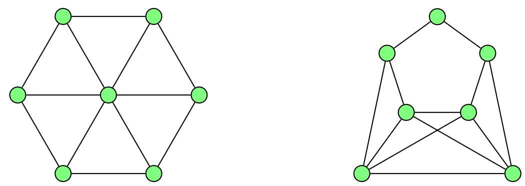
$$\mathrm{Spec}(G) = \mathrm{Spec}(G_1) \cup \mathrm{Spec}(G_2)\,.$$

Dokaz. Naj bo x lastni vektor za lastno vrednost λ grafa G. Ker je x neničelni vektor, potem mora biti x neničelni na G_1 ali G_2, torej je x zožen na G_1 ali G_2 lastni vektor za $\lambda \in \mathrm{Spec}(G_1)$ ali $\lambda \in \mathrm{Spec}(G_2)$.

Naj bo sedaj x lastni vektor za lastno vrednost $\lambda \in \mathrm{Spec}(G_1)$ (podobno za G_2). Če razširimo x tako, da je $x_i = 0$ za vse $i \in V \setminus V(G_1)$, dobimo lastni vektor za $\lambda \in \mathrm{Spec}(G)$. ∎

Kospektralni grafi

Naj bosta grafa G_1 in G_2 kot na sliki:



(a) Graf G_1 (b) Graf G_2

Slika 1: Kospektralna grafa

Grafa nista izomorfna. Kljub temu imata oba enak spekter:

$$\{-2, 1-\sqrt{7}, -1^{(2)}, 1^{(2)}, 1+\sqrt{7}\}.$$

Karakteristična polinoma matrik sosednosti sta namreč v obeh primerih

$$-\lambda^7 + 12\lambda^5 + 12\lambda^4 - 21\lambda^3 - 24\lambda^2 + 10\lambda + 12.$$

Takim grafom pravimo **kospektralni** grafi.

Če sta dva grafa izomorfna, imata enak spekter. Obratno seveda *ne* drži, kot smo videli v tem zgledu.

Obstajajo številne lastnosti grafov, o katerih nam spekter nič ne pove. Ena takšna lastnost je na primer ravninskost. Graf G_1 je ravninski, graf G_2 pa ne (saj vsebuje subdivizijo grafa $K_{3,3}$).

Spekter komplementa grafa

Za poljuben vektor $\alpha^\top = [\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n]$ definirajmo vsoto komponent

$$\sigma(\alpha) = \alpha^\top \cdot \mathbf{1} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i.$$

Trditev. *Za lastne vektorje Laplaceove matrike poljubnega grafa velja*

(a) $\mathbf{1}$ *je lastni vektor z lastno vrednostjo* 0*;*

(b) *Za vsak lastni vektor* $x \neq \mathbf{1}$ *velja* $\sigma(x) = 0$.

Opazimo, da iz $A \cdot \mathbf{1} = 0 \cdot \mathbf{1}$ trditev (a) sledi. Trditev (b) pa sledi takoj iz trditve (a) in dejstva, da sta lastna vektorja pri različnih lastnih veredostih ortogonalna.

Spomnimo se da je komplement $\overline{G}$ grafa G graf z isto množico vozlišč kot G, kjer sta dve različni vozlišči sosednji natanko tedaj, ko nista sosednji v G.

Če je A matrika sosednosti za G, potem ima $\overline{G}$ matriko sosednosti enako

$$\overline{A} = J - I - A$$

in Laplaceovo matriko

$$\overline{L} = nI - J - L.$$

Trditev. *Če so $\mu_1, \ldots, \mu_{n-1}, 0$ lastne vrednosti matrike L, potem so $n - \mu_{n-1}, \ldots, n - \mu_1, 0$ lastne vrednosti matrike $\overline{L}$.*

Dokaz. Za poljuben $i \in \{1, 2, \ldots, n-1\}$ velja

$$
\begin{aligned}
\overline{L}x_i &= (nI - J - L)x_i \\
&= nx_i - \sigma(x_i) \cdot \mathbf{1} - Lx_i \\
&= nx_i - \mu_i x_i \\
&= (n - \mu_i)x_i \,.
\end{aligned}
$$

Obravnavajmo lastni vektor $x_n = \mathbf{1}$ in njegovo lastno vrednost $\mu = 0$. Dobimo

$$
\begin{aligned}
\overline{L} \cdot \mathbf{1} &= (nI - J - L) \cdot \mathbf{1} \\
&= n \cdot \mathbf{1} - J \cdot \mathbf{1} - L \cdot \mathbf{1} \\
&= n \cdot \mathbf{1} - n \cdot \mathbf{1} - \mu_n \cdot \mathbf{1} \\
&= 0 \cdot \mathbf{1} \,.
\end{aligned}
$$

Torej dobimo, da so za matriko $\overline{L}$ lastne vrednosti

$$n - \mu_{n-1}, n - \mu_{n-2}, \ldots, n - \mu_1, 0$$

in so

$$x_{n-1}, x_{n-2}, \ldots, x_1, \mathbf{1} \,.$$

ustrezni lastni vektorji. ∎

Če je G regularen, imamo podoben rezultat za navadne lastne vrednosti.

Opazimo, da je $\mathbf{1}$ lastni vektor matrike A, če in samo, če je graf G regularen

$$A \cdot \mathbf{1} = [k, \ldots, k]^\top = k \cdot \mathbf{1}.$$

Naj bodo $k = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ lastne vrednosti matrike A in naj bodo $\mathbf{1} = x_1, \ldots, x_n$ ustrezni lastni vektorji za tak graf.

Trditev. *Če je G k-regularen z lastnimi vrednostmi $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$, potem so lastne vrednosti komplementa*

$$n - k - 1, -1 - \lambda_n, \ldots, -1 - \lambda_2.$$

Dokaz. Pokažimo, da je $\mathbf{1}$ lastni vektor in k ustrezna lastna vrednost matrike $\overline{A}$ takole

$$\overline{A} \cdot \mathbf{1} = (J - I - A) \cdot \mathbf{1} = n \cdot \mathbf{1} - \mathbf{1} - k \cdot \mathbf{1} = (n - 1 - k) \cdot \mathbf{1}$$

Za lastne vektorje $x_2, \ldots, x_n$ ter lastne vrednosti $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$ velja

$$\begin{aligned} \overline{A}x_i &= (J - I - A)x_i \\ &= \sigma(x_i) \cdot \mathbf{1} - x_i - Ax_i \\ &= -x_i - \lambda_i x_i \\ &= (-1 - \lambda_i)x_i. \end{aligned}$$

Iz tega sledi dokaz trditve. ∎

Sprehodi in spekter

Sprehod dolžine r v grafu G je zaporedje vozlišč $v_0\, v_1\, v_2 \cdots v_r$ za katera velja, da je $v_i\, v_{i+1} \in E(G)$ za vse $0 \leq i < r$. Če je $v_0 = v_r$, takemu sprehodu pravimo *obhod*.

Trditev. *Število sprehodov dolžine k od vozlišča v_i do vozlišča v_j v grafu G je enako A^k_{ij}.*

Dokaz. Trditev bomo dokazali z indukcijo po k. Za $k = 0$ trditev očitno drži. Če je $i \neq j$, potem sprehodov dolžine 0 med vozliščema v_i in v_j očitno ni. Sprehod dolžine 0 med v_i in v_i je en sam (ostanemo "pri miru" v vozlišču v_i).

Denimo, da je A^k_{ij} število sprehodov dolžine k med vozliščema v_i in v_j. Sprehodi dolžine $k+1$ med v_i in v_j so oblike $v_i\, v_{s_1}\, v_{s_2}\, v_{s_3} \cdots v_{s_k}\, v_j$. Obravnavajmo število sprehodov pri nekem fiksnem v_{s_k}: Če $v_{s_k}\, v_j \notin E(G)$, potem tak sprehod ne obstaja, torej je odgovor 0. Če je $v_{s_k}\, v_j \in E(G)$, potem je sprehodov natančno toliko, kolikor je sprehodov dolžine k med v_i in v_{s_k}. (V zadnjem koraku gremo po fiksni povezavi $v_{s_k}\, v_j$.)

Vse možne sprehode dobimo, ko v_{s_k} preteče vsa vozlišča grafa G. Seveda sta množici sprehodov pri različnih v_{s_k} disjunktni. Če je $v_{s_k}\, v_j \in E(G)$, potem je $A_{v_{s_k} v_j} = 1$, sicer je $A_{v_{s_k} v_j} = 0$. Vseh sprehodov med i in j je torej

$$\sum_{v_k \in V(G)} A^k_{v_i v_{s_k}} \cdot A_{v_{s_k} v_j}\ .$$

To pa je ravno produkt i-te vrstice matrike A^k in j-tega stolpca matrike A, torej ravno A^{k+1}_{ij}. ∎

Velja: Število poti dolžine n med točkama v_a in v_b, ki imajo točko v_c na j-tem koraku, je enako

$$A^j_{ac}\, A^{n-j}_{cb}.$$

Trditev. *Naj bo G enostaven graf z m povezavami in t trikotniki. Potem velja:*

- $\mathrm{sl}(A) = 0$;
- $\mathrm{sl}(A^2) = 2m$;
- $\mathrm{sl}(A^3) = 6t$.

Dokaz. Ker je G enostaven, ne vsebuje nobene zanke, zato je $A_{ii} = 0$ za vsak i. Zato je $\mathrm{sl}(A) = \sum_{i=1}^{n} A_{ii} = 0$.

Naj bo $v \in V(G)$ poljubno vozlišče. Edini sprehod dolžine 2 med v in v je oblike $v\,u\,v$, kjer je u sosed vozlišča v. Takih sprehodov je toliko, kolikor sosedov ima vozlišče v, to pa je ravno $d_G(v)$. Zato je

$$\mathrm{sl}(A^2) = \sum_{i=1}^{n} A^2_{ii} = \sum_{i=1}^{n} d(v_i) = 2m.$$

Naj bo $v \in V(G)$. Vsi v,v-sprehodi dolžine 3 so nujno oblike $v\,u\,w\,v$, kjer so u, v in w sama različna vozlišča. Vsak sprehod je torej trikotnik v grafu G. Število A^3_{ii} je enako dvakratniku števila tistih trikotnikov, v katerih je v_i eno od oglišč. Vsak trikotnik smo namreč šteli dvakrat: enkrat kot sprehod $v\,u\,w\,v$, drugič pa kot sprehod $v\,w\,u\,v$. Število vseh trikotnikov v grafu G dobimo kot vsoto števil $\frac{1}{2}A^3_{ii}$, ko i preteče vsa vozlišča. Toda pri tem smo vsak trikotnik šteli trikrat (vsak trikotnik ima tri oglišča in pri vsakega smo ga enkrat srečali). Zato dobimo

$$\mathrm{sl}(A^3) = 2\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} A^3_{ii} = 2(3t) = 6t.$$

∎

Spodja trditev je dobro znan rezultat iz linearne algebre.

Trditev. *Velja naslednja zveza*

$$\mathrm{sl}(A^k) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^k \ .$$

Tem vsotam bomo rekli *spektralni momenti* in jih označevali z $M_k(G)$ oziroma z M_k. Iz zgornje trditve direktno sledi:

Posledica. *Naj bodo $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ lastne vrednosti grafa G. Potem velja:*

- $M_1(G) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n = 0$*;*
- $M_2(G) = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \cdots + \lambda_n^2 = 2m$*;*
- $M_3(G) = \lambda_1^3 + \lambda_2^3 + \cdots + \lambda_n^3 = 6t$*.*

Trditev. *Naj bodo $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ lastne vrednosti (enostavnega) grafa G. Potem velja ($m = |E(G)|$):*

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j = -m \; .$$

Dokaz. Poglejmo si koeficient pred členom x^{n-2} v karakterističnem polinomu $p_A(x)$. Po eni strani lahko karakteristični polinom zapišemo takole:

$$p_A(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2)(x - \lambda_3) \ldots (x - \lambda_n) \; .$$

Da bi pri množenju dobili člen x^{n-2}, moramo v $n-2$ produktih izbrati x, v ostalih dveh pa λ_i in λ_j. Ko seštejemo vse člene, v katerih nastopa x^{n-2}, dobimo ravno $\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j$.

Po drugi strani (po definiciji) je karakteristični polinom $p_A(x) = \det(xI_n - A)$. Po definiciji je

$$\det(xI_n - A) = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{k=1}^{n} (xI_n - A)_{k,\sigma(k)},$$

kjer je S_n družina vseh permutacij reda n. Člene z x^{n-2} dobimo le, če je σ transpozicija[1]. Dovolj je, če se omejimo na vsoto:

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} (-1) A_{ij} A_{ji} \prod_{k \neq i,j} (x - A_{kk}) \; . \tag{1}$$

Po definiciji matrike sosednosti je $A_{ij} = A_{ji} = 1$, če je $i\,j \in E(G)$, sicer pa je $A_{ij} = A_{ji} = 0$. Ker je graf enostaven $A_{kk} = 0$ za vsak k. Zato je vrednost (1) ravno

$$\sum_{e \in E(G)} (-1) x^{n-2} = -m x^{n-2}.$$

Po eni strani je koeficient pred x^{n-2} v karakterističnem polinomu enak $\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j$, po drugi strani pa je enak $-m$. ■

[1] Ker je transpozicija σ liha permutacija, je $\operatorname{sgn}(\sigma) = -1$.

Spekter in dvodelnost grafov

Trditev. *Graf G je dvodelen, če in samo če lastne vrednosti nastopajo v parih λ, λ' tako, da je $\lambda' = -\lambda$.*

Dokaz. Naj bo G dvodelen graf z biparticijo V_1, V_2. Definirajmo vektor y takole

$$y_i = \begin{cases} x_i & v_i \in V_1, \\ -x_i & v_i \in V_2. \end{cases}$$

Zdaj ni težko videti, da iz $Ax = \lambda x$ sledi zveza

$$Ay = -\lambda y\,.$$

Za drugo smer obravnavajmo sled matrike A^k, ki šteje obhode dolžine k. Ker lastne vrednosti nastopajo v parih λ, $-\lambda$ dobimo, da je $\mathrm{sl}(A^k) = 0$, kadar je k liho število. Torej ni lihih ciklov kar pomeni da je graf dvodelen.

Zgornje in spodnje meje

Največja in najmanjša lastna vrednost matrike A imata zanimivo interpretacijo pri pogojni optimizaciji, sta namreč da ekstrema pri iskanju maksimuma oz. minimuma kvadratnih form $f(x) = x^\top Ax$ pri pogoju $\|x\| = 1$ oz. $x^\top x = 1$.

Trditev. *Velja*

$$\lambda_1(A) = \max_{\|x\|=1}\{x^\top Ax\} \qquad \textit{in} \qquad \lambda_n(A) = \min_{\|x\|=1}\{x^\top Ax\}.$$

Dokaz. Naj bo $L(\lambda, x) = f(x) - \lambda g(x)$, kjer je $g(x) = x^\top x - 1$. V ekstremnih točkah sta parcialna odvoda po x in λ enaka 0. Torej

$$\nabla_\lambda L(\lambda, x) = -g(x) = 0,$$

kar implicira $x^\top x = 1$ in

$$\nabla_x L(\lambda, x) = 2Ax - 2\lambda x = 0,$$

kar implicira, da je $Ax = \lambda x$ oz. da sta x in λ lastni vektor in lastna vrednost matrike A.

Torej

$$f(x) = x^\top Ax = \lambda x^\top x = \lambda$$

in tako dobimo minimum za $\lambda = \lambda_n$ in maksimum za $\lambda = \lambda_1$. ∎

Če je matrika pozitivno semidefinitna tj. če je $x^\top Ax \geq 0$ za vsak neničelen vektor x, potem kot posledico dobimo, da je $\lambda_n \geq 0$ oz. da so vse lastne vrednosti nenegativne.

Za $x = e_i$, ko i preteče $1, 2, \ldots, n$ dobimo, da je

$$\lambda_n \leq \min_i \{a_{ii}\} \leq \max_i \{a_{ii}\} \leq \lambda_1 \,.$$

Trditev. *Naj bosta δ in Δ minimalna in maksimalna stopnja grafa G. Potem je*

$$\delta \leq \lambda \leq \Delta \,.$$

Dokaz. Naj bo x lastni vektor, ki ustreza lastni vrednosti λ. Naj bo i koordinata, za katero x_i doseže največjo vrednost. Potem dobimo, da je

$$\lambda x_i = \sum_{v_j \in N(v_i)} x_j \leq |N(v_i)| x_i \leq \Delta x_i,$$

kar nam pokaže željeno zgornjo mejo.

Iz prejšnje trditve velja, da je

$$\lambda_1 = \max_{\|x\|=1} \{x^\top Ax\} = \max_{x \neq 0} \frac{x^\top Ax}{x^\top x} \,.$$

Iz tega pa dobimo, da je

$$\lambda_1 \geq \frac{\mathbf{1}^\top A \mathbf{1}}{\mathbf{1}^\top \mathbf{1}} = \frac{\sum_{i=1}^n \deg(v_i)}{n} = \frac{2m}{n} \geq \delta \,.$$

■

Trditev. *Naj bo G graf na n točkah in z m povezavami. Potem velja*

$$\lambda \leq \left(\frac{2m(n-1)}{n}\right)^{1/2}.$$

Dokaz. Naj bo x lastni vektor, ki ustreza lastni vrednosti λ. Iz prvega in drugega momenta dobimo

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 0 \quad \text{in} \quad \sum_{i=1}^{n} {\lambda_i}^2 = 2m\,.$$

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 0 \quad \text{in} \quad \sum_{i=1}^{n} {\lambda_i}^2 = 2m\,.$$

Torej

$$\lambda_1 = -\sum_{i=2}^{n} \lambda_i \quad \text{in od tukaj} \quad \lambda_1 \leq \sum_{i=2}^{n} |\lambda_i|\,.$$

Zdaj pa z uporabo Cauchy-Schwarzeve neenačbe dobimo, da je

$$2m - \lambda_1^2 = \sum_{i=2}^{n} \lambda_i^2 \geq \frac{1}{n-1}(\sum_{i=2}^{n} |\lambda_i|)^2 \geq \frac{\lambda_1^2}{n-1}\,.$$

Iz tega pa hitro izpeljemo željeno mejo. ∎