Spekter grafa
UDM 2016

R. Škrekovski
4. maj 2016

Matrike grafov

Naj bo G graf z množico vozlišč $V(G) = \{v_1, \ldots, v_n\}$.

Matrika sosednosti grafa G je

$$A(G) = \begin{bmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

pri čemer velja

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & v_i \backsim v_j, \\ 0 & \text{sicer.} \end{cases}$$

Laplaceovo matriko L grafa G definiramo:

$$l_{ij} = \begin{cases} -a_{ij} & \text{za } i \neq j \\ \deg(v_i) & \text{sicer.} \end{cases}$$

Absolutno Laplaceovo matriko $|L|$ definiramo:

$$s_{ij} = \begin{cases} a_{ij} & \text{za } i \neq j \\ \deg(v_i) & \text{sicer.} \end{cases}$$

Za vsoto po i-ti vrstici (ali stolpcu) velja

- $\sum_{j=1}^{m} a_{ij} = \deg(v_i)$,
- $\sum_{j=1}^{m} l_{ij} = 0$,
- $\sum_{j=1}^{m} s_{ij} = 2\deg(v_i)$.

Matriko stopenj točke D grafa G definiramo:

$$d_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{za } i \neq j \\ \deg(v_i) & \text{sicer.} \end{cases}$$

Torej,

$$L = D - A$$

in

$$|L| = D + A\,.$$

Karakteristični polinom in spekter grafa

Karakteristični polinom matrike M velikosti $n \times n$ je definiran kot

$$p_M(\lambda) = \det(\lambda I_n - M).$$

Ničle tega polinoma tvorijo spekter matrike M in ga označimo z $\mathrm{Spec}(M)$. Lastni vrektorji za posamezno lastno vrednost λ so rešitve $x \neq 0$ enačbe

$$Mx = \lambda x.$$

Za poljubni graf G

- **(navadni) spekter** je spekter matrike $A(G)$;
- **Laplaceov spekter** je spekter matrike $L(G)$;
- **absolutno Laplaceov spekter** je spekter matrike $|L|(G)$.

Množico lastnih vrednosti označimo kar z $\mathrm{Spec}(A(G))$, $\mathrm{Spec}(L(G))$, $\mathrm{Spec}(|L|(G))$.

Namesto lastne vrednosti matrike $A(G)$ bomo rekli kar lastne vrednosti grafa G. Lastne vrednosti običajno razvrstimo v nenaraščajočem vrstnem redu:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n.$$

To množico lastnih vrednosti označimo tudi z $\mathrm{Spec}(G)$.

Orodja iz linearne algebre

Trditev. *Realna simetrična matrika ima vse lastne vrednosti realne.*

Trditev. *Naj bo M poljubna kvadratna matrika. Potem*

- *veljata zvezi*

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = \mathrm{sl}(M) \quad \textit{in} \quad \prod_{i=1}^{n} \lambda_i = \det(M)$$

- *število neničelnih lastnih vrednosti je enako* $\mathrm{rang}(M)$,
- *lastna vektorja dveh različnih lastnih vrednosti sta ortogonalna.*

Naj bo G enostaven neusmerjen graf z n točkami. Velja

- A je realna in simetrična in zato so vse lastne vrednosti realne.
- A ima ničelno diagonalo in je zato $\mathrm{sl}(A) = 0$, tj. vsota lastnih vrednosti je enaka nič.

Podobno velja za Laplaceovo matriko

- L je realna in simetrična, tako da je Laplaceov spekter realen.
- Ker je L pozitivna semidefinitna, si lahko lastne vrednosti označimo z $\mu_1, \ldots, \mu_n$, kjer je

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \cdots \geq \mu_n = 0.$$

- Vsota teh lastnih vrednosti je enaka $\mathrm{sl}(L)$, kar je dvakrat toliko kot število povezav v G.

Tudi $|L|$ ima realni spekter in nenegativne lastne vrednosti (ampak ni nujno singularna). Velja,

$$\mathrm{sl}(|L|) = \mathrm{sl}(L).$$

Lastne vektorje kot utežene funkcije

Lastne vektorje lahko obravnavamo kot utežene funkcije na točkah. Namreč, naj bo G graf na n točkah, x neničelen vektor dimenzij n in λ realno število. Potem velja, da je λ *lastna vrednost in* x *ustrezni lastni vektor grafa* G *natanko takrat, ko za vsako točko* v_i *grafa* G *velja*

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

Ta opis neposredno sledi iz zveze $Ax = \lambda x$.

Spekter polnega grafa

Trditev. *Spekter polnega grafa K_n je*

$$(n-1)^{(1)}, (-1)^{(n-1)}.$$

Dokaz. Matrika sosednosti grafa K_n je enaka

$$A = J - I$$

Naj bodo $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ lastne vrednosti matrike A, urejene nenaraščajoče. Potem,

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\lambda I - A) \\ &= \det(\lambda I - J + I) \\ &= \det((\lambda + 1)I - J) \\ &= \det(\lambda' I - J). \end{aligned}$$

Naj bo

$$\lambda' = \lambda + 1.$$

Tako problem prevedemo na iskanje spektra λ' matrike J.

Ker je $\mathrm{rang}(J) = 1$, sledi da je prva lastna vrednost $\lambda'_1 \neq 0$ in vsaka druga $\lambda_i = 0$ za $i \geq 2$. Iz

$$\sum_i \lambda'_i = n$$

sklepamo, da je $\lambda'_1 = n$ in od tukaj

$$\mathrm{Spec}(J) = \begin{pmatrix} n & 0 \\ 1 & n-1 \end{pmatrix}.$$

Iz tega sledi, da

$$\mathrm{Spec}(K_n) = \begin{pmatrix} n-1 & -1 \\ 1 & n-1 \end{pmatrix}.$$

∎

Laplaceov spekter polnega grafa

Trditev. *Spekter Laplaceove matrike polnega grafa* K_n *je*

$$0^{(1)}, n^{(n-1)}.$$

Dokaz. Iz

$$L = D - A = (n-1)I - J + I = nI - J$$

dobimo

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\mu I - L) \\ &= \det(\mu I - nI + J) \\ &= \det((\mu - n)I + J) \\ &= (-1)^n \det((n-\mu)I - J) \\ &= (-1)^n \det(\lambda' I - J). \end{aligned}$$

Vpeljemo zvezo

$$\lambda' = n - \mu.$$

Ker je

$$\mathrm{Spec}(J) = \begin{pmatrix} n & 0 \\ 1 & n-1 \end{pmatrix}$$

dobimo

$$\mathrm{Spec}(L) = \begin{pmatrix} 0 & n \\ 1 & n-1 \end{pmatrix}$$

∎

Opomba: Spekter lahko izračunamo tudi direktno, ker za k-regularne grafe velja zveza $\mu_i = k - \lambda_i$.

Spekter polnih dvodelnih grafov

Trditev. *Spekter polnega dvodelnega grafa* $K_{m,n}$ *je*

$$\pm\sqrt{mn}^{(1)}, 0^{(m+n-2)}.$$

Dokaz. Matrika sosednosti grafa $K_{m,n}$ je

$$A = \begin{bmatrix} O_{m,m} & J_{m,n} \\ J_{n,m} & O_{n,n} \end{bmatrix}$$

Velja $\operatorname{rang}(A) = 2$, saj imamo samo dve različni vrstici in od tod samo dve lastni vrednosti različni od 0. Ker je $\operatorname{sl}(A) = 0$ in zato je vsota lastnih vrednosti nič, ena od teh dveh naj bo λ in druga $-\lambda$. Če je

$$Ax = \lambda x$$

potem hitro sledi, da je

$$x = [\underbrace{\alpha, \ldots, \alpha}_{m}, \underbrace{\beta, \ldots, \beta}_{n}]^\top.$$

Zdaj iz

$$[\underbrace{n\beta, \ldots, n\beta}_{m}, \underbrace{m\alpha, \ldots, m\alpha}_{n}]^\top = Ax = \lambda x = [\underbrace{\lambda\alpha, \ldots, \lambda\alpha}_{m}, \underbrace{\lambda\beta, \ldots, \lambda\beta}_{n}]^\top$$

dobimo

$$n\beta = \lambda\alpha \quad \text{in} \quad m\alpha = \lambda\beta$$

in rešimo

$$\lambda = \pm\sqrt{mn}.$$

Torej je spekter polnega dvolenega grafa $K_{m,n}$

$$\operatorname{Spec}(K_{m,n}) = \begin{pmatrix} \sqrt{mn} & 0 & -\sqrt{mn} \\ 1 & n-2 & 1 \end{pmatrix}$$

$\blacksquare$

Spekter regularnih grafov

V k-regularnem grafu ima njegova matrika sosednosti A vsoto vseh elementov poljubne vrstice ali stolpca enako k. Za Lapalaceovo pa velja $L = kI - A$.

Trditev. *Če je G k-regularen graf, potem velja*

1. *k je lastna vrednost;*
2. *Za vsako lastno vrednost λ velja $|\lambda| \leq k$.*

Dokaz. Naj bo $u = [1, 1, \ldots, 1]^\top$. Potem velja

$$Au = ku,$$

kar implicira prvo trditev.

Naj bo λ poljubna lastna vrednost grafa G in y ustrezni lastni vektor. Naj bo y_j komponenta z največjo absolutno vrednostjo. Iz $Ay = \lambda y$ dobimo

$$(Ay)_j = \sum_{v_i \in N(v_j)} y_i = \lambda y_j.$$

Potem

$$|\lambda||y_j| = |\sum_{v_i \in N(v_j)} y_i| \leq \sum_{v_i \in N(v_j)} |y_i| \leq k|y_j|.$$

In od tukaj dobimo, da je

$$|\lambda| \leq k.$$

■

Laplaceov spekter regularnih grafov

Trditev. *Če ima G lastne vrednosti $k = \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$ in Laplaceove lastne vrednosti $0 = \mu_1 \leq \mu_2 \leq \cdots \leq \mu_n$, potem je*

$$\lambda_i = k - \mu_i$$

za $i = 1, \ldots, n$.

Dokaz. Vemo, da je $L = D - A = kI - A$. Od tukaj

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\mu I - L) \\ &= \det(\mu I - kI + A) \\ &= \det((\mu - k)I + A) \\ &= (-1)^n \det((k - \mu)I - A) \\ &= (-1)^n \det(\lambda I - A). \end{aligned}$$

Od tukaj dobimo, da je

$$\mu_i = k - \lambda_i$$

in tako tudi velja

$$0 \leq \mu_1 \leq \mu_2 \leq \cdots \leq \mu_n.$$

Iz $\lambda_1 = k$, sledi da je $\mu_1 = 0$. ∎

Absolutni Laplaceov spekter regularnih grafov

Trditev. *Lastne vrednosti matrike* $|L| = kI + A$ *so*

$$2k, k + \lambda_2, \ldots, k + \lambda_n.$$

Dokaz. Velja $|L| = D + A$ in od tukaj

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\beta I - |L|) \\ &= \det(\beta I - D - A) \\ &= \det(\beta I - kI - A) \\ &= \det((\beta - k)I - A) \\ &= \det(\lambda I - A). \end{aligned}$$

Od tukaj dobimo, da je

$$\beta_i = k + \lambda_i$$

in tako tudi velja

$$\beta_1 = 2k.$$

■

Spekter nepovezanih grafov

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

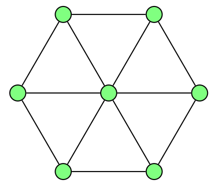
$$\mathrm{Spec}(G) = \mathrm{Spec}(G_1) \cup \mathrm{Spec}(G_2)\,.$$

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 $\lambda \in \mathrm{Spec}(G_2)$.

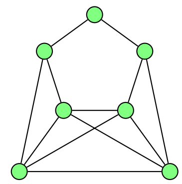
Naj bo sedaj x lastni vektor za lastno vrednost $\lambda \in \mathrm{Spec}(G_1)$ (podobno za G_2). Če razširimo x tako, da je $x_i = 0$ za vse $i \in V \setminus V(G_1)$, dobimo lastni vektor za $\lambda \in \mathrm{Spec}(G)$. ∎

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 minor grafa K_5).

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_{ij}^k.*

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_{ij}^k število sprehodov dolžine k med vozliščema v_i in v_j. Sprehodi dožine $k+1$ 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 natanko 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

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

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

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

$$A_{ac}^j\, A_{cb}^{n-j}.$$

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 vozlišě. 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

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

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_{ii}^3 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 $\frac{1}{2}A_{ii}^3$, ko i preteče vsa vozlišča. Toda pri tem smo vsak trikotnk šteli trikrat (vsak trikotnik ima tri ogliča in pri vsakega smo ga enkrat srečali). Zato dobimo

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

■

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:*

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

Hitro dobimo naslednjo trditev.

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

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

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 dva ekstrema pri iskanju maksimuma oz. minimuma kvadratnih form $f(x) = x^\top Ax$ pri pogoju $\|x\| = 1$ oz. $x^\top x = 1$.

Trditev. *Velja*

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

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 takoj 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*

$$\delta \leq \lambda_1 \leq \Delta \,.$$

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

$$\lambda_1 x_i = \sum_{v_j \in N(v_i)} x_j \leq |N(v_i)| x_i \leq \Delta x_i,$$

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

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

∎

Premer vs. spekter

Trditev. *Naj bo G povezan graf s premerom d. Potem ima G vsaj $d+1$ različnih lastnih vrednosti*

Dokaz. Naj ima A različne lastne vrednosti $\lambda_1, \ldots, \lambda_t$. Potem je

$$(A - \lambda_1 I) \cdots (A - \lambda_t I) = 0,$$

tako da je A^t linearna kombinacija $I, A, \ldots, A^{t-1}$. Toda, če je $d(x, y) = t$, potem je $(A^i)_{xy} = 0$ za $0 \leq i \leq t-1$ in $(A^t)_{xy} > 0$, protislovje. Zato je $t > d$. ∎