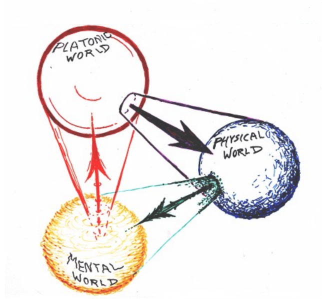
离散数学笔记

图论

作者：Shan Hongqi

时间：Nov 9, 2022

版本：0.1



明知道会错的但还想尝试的勇气现在去哪里了——《万一对了呢》by ChiliChill

目录

第 1 章 邻接矩阵

邻接矩阵用于描述点之间的连通关系，方便起见暂时只讨论简单无向图（无重边、无自环）邻接矩阵的性质，故下文中的图，若无特殊标明，均代表简单无向图。

1.1 简单图

先考虑较为一般的简单图。

定义 1.1 (简单图的邻接矩阵)

给定一个简单图 Γ，点集 $V\Gamma = v_1, v_2, \ldots, v_n$，边集 $E\Gamma$ 是 $V\Gamma$ 中一些无序二元组构成集合，若 $\{v_i, v_j\} \in E\Gamma$，则称 v_i 与 v_j 是邻接 (adjacent) 的。

简单图 Γ 的邻接矩阵是 $n \times n$ 的实对称矩阵 $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\Gamma)$，其中元素定义为：

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, \text{if } v_i \text{ and } v_j \text{ are adjacent;} \\ 0, \text{otherwise.} \end{cases}$$

♣

我们对定义出来的邻接矩阵的性质很感兴趣，不妨暂且研究其代数性质。因为没有自环，可以简单得到 $\mathrm{tr}(\mathbf{A}) = 0$。而图在任意重标号后仍然是不变的，所以在重标号后的矩阵也会有一些相似性，谱性质正是在行和列进行轮换过程中的不变量。

实对称矩阵具有很优美的性质：

定理 1.1 (对称矩阵的谱定理)

一个对称的 $n \times n$ 矩阵 $\mathbf{A}$ 具有下述性质：

1. $\mathbf{A}$ 有 n 个特征值均为实数，包含重复的特征值，且每一个特征值的代数重数等于代数重数；
2. 特征空间相互正交，$\mathbf{A}$ 可正交对角化。

♡

证明 先证明其特征值为实数。可以使用共轭来证明一个数是实数，即 $a \in \mathbb{R} \Leftrightarrow a = \bar{a}$。若 $\mathbf{A}x = \lambda x$，注意到 $\mathbf{A}\bar{x} = \bar{\mathbf{A}}\bar{x} = \overline{\mathbf{A}x} = \overline{\lambda x} = \bar{\lambda}\bar{x}$，又有 $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$，于是考虑凑 $\mathbf{A}x$ 来得到 λ 与 $\bar{\lambda}$：

$$\overline{x^T}\mathbf{A}x \begin{cases} = \overline{x^T\mathbf{A}^T}x = \overline{(\mathbf{A}x)^T}x = \bar{\lambda}\overline{x^T}x \\ = \overline{x^T}(\mathbf{A}x) = \overline{x^T}(\lambda x) = \lambda\overline{x^T}x \end{cases}$$

得到 $(\bar{\lambda} - \lambda)\overline{x^T}x = 0$，由 $\overline{x^T}x = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \neq 0$，故 $\bar{\lambda} - \lambda = 0$，即 λ 均为实数。

下面证明任意两特征向量正交：设 $\boldsymbol{v}_1$ 与 $\boldsymbol{v}_2$ 是不同特征值 λ_1, λ_2 的特征向量，为证明 $v_1 \cdot v_2 = 0$，计算：

$$\begin{aligned} \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 &= (\lambda_1 \boldsymbol{v}_1)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v}_2 = (A\boldsymbol{v}_1)^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{v}_2 \\ &= \left(\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}}\right) \boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} (A\boldsymbol{v}_2) \\ &= \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} (\lambda_2 \boldsymbol{v}_2) \\ &= \lambda_2 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 \end{aligned}$$

又 $\lambda_1 \neq \lambda_2$，故有 $\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 = 0$。

通过这两个性质可以得到剩下部分的证明，笔者能力有限，这里给不出证明。

不妨通过邻接矩阵定义图的谱：

定义 1.2 (谱)

图 Γ 的谱 (spectrum) 被定义为包含 $\mathbf{A}(\Gamma)$ 的特征值及重数的集合。若有 s 个不同的特征向量 $\lambda_0 > \lambda_1 > \cdots > \lambda_{s-1}$，以及它们的重数 $m(\lambda_0), m(\lambda_1), \ldots, m(\lambda_{s-1})$，我们可以将其写作：

$$\operatorname{Spec}\Gamma = \begin{pmatrix} \lambda_0 & \lambda_1 & \ldots & \lambda_{s-1} \\ m(\lambda_0) & m(\lambda_1) & \ldots & m(\lambda_{s-1}) \end{pmatrix}$$

例如对于完全图 K_4 的邻接矩阵：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

可以简单地求出它的谱为：

$$\operatorname{Spec} K_4 = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

为了找到这些代数量与图的关系，我们称 $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\Gamma)$ 的特征值为图 Γ 的特征值，特征多项式 $\det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})$ 被称为图 Γ 的特征多项式，并用 $\chi(\Gamma;\lambda)$ 表示，它通常是这样的形式：

$$\chi(\Gamma;\lambda) = \lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + c_2\lambda^{n-2} + c_3\lambda^{n-3} + \ldots + c_n$$

我们发现 $\chi(\Gamma;\lambda)$ 和图的形状有些关联。

命题 1.1 (图的特征多项式的系数)

图 Γ 的特征多项式 $\chi(\Gamma;\lambda) = \lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + c_2\lambda^{n-2} + c_3\lambda^{n-3} + \ldots + c_n$ 有如下性质：

1. $c_1 = 0$;
2. $-c_2$ 是 Γ 中边的条数；
3. $-c_3$ 是 Γ 中三角形（三元环）的数量。

证明

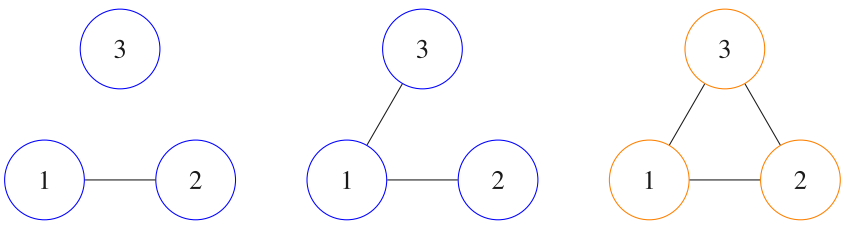
1. $c_1 = 0$ 是显然的，因为 $\operatorname{tr}(\mathbf{A}) = 0$。
2. 考虑两行的主子式，若其非零，只能是形如

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

   的形式，且该主子式存在，当且仅当这两行对应的有连边。注意到该主子式的值为 -1，故 $(-1)^2 c_2 = -|E\Gamma|$，其中 $|E\Gamma|$ 是边集的大小。
3. 证明类似 2，我们取出三行的主子式：

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

   分别表示：



   不难发现只有第三种三元环对 c_3 有贡献，且值为 2，这就得到了该性质。

推论 1.1 (特征多项式的约化公式)

对于图 Γ，若 v_1 的度数为 1，且与 v_2 相连，则有：

$$\chi(\Gamma;\lambda)=\lambda\chi(\Gamma_1;\lambda)-\chi(\Gamma_{12};\lambda)$$

其中 Γ_1 是删掉 v_1 的导出子图，Γ_{12} 是删掉 v_1,v_2 的导出子图。

证明 由于 v_1 有大量的 0，故考虑用代数余子式进行展开。

$$\begin{vmatrix} \lambda & \vdots & -1 & 0 & 0 \\ -1 & \vdots & \lambda & \cdots & a_{2n} \\ 0 & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \vdots & a_{n2} & \cdots & \lambda \end{vmatrix} = \lambda\chi(\Gamma_1;\lambda) - \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ \hdashline a_{32} & \lambda & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n2} & a_{n3} & \cdots & \lambda \end{vmatrix} = \lambda\chi(\Gamma_1;\lambda)-\chi(\Gamma_{12};\lambda)$$

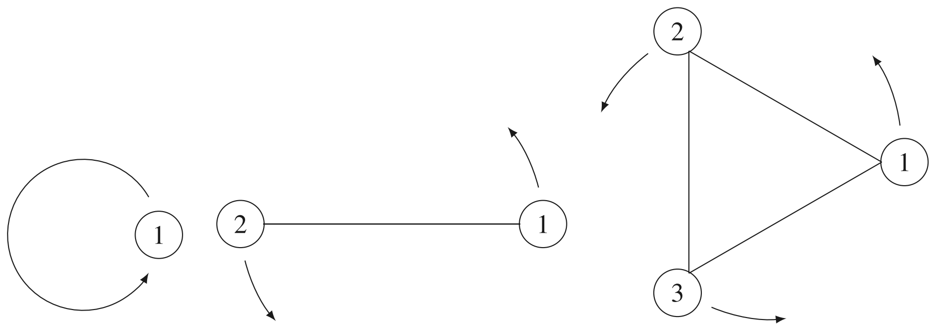
上面的公式可以用于快捷地求无环图的特征多项式，因为无论如何删除，必存在一个度为 1 的点。

命题 1.2 (特征值幂和)

令 $\mathbf{A}=\mathbf{A}(\Gamma)$，其特征根为 $\lambda_1,\lambda_2,\dots,\lambda_r$，则有：

1. $\sum_{i=1}^r \lambda_i^2$ 是 Γ 中边数的 2 倍；
2. $\sum_{i=1}^r \lambda_i^3$ 是 Γ 中三元环数量的 6 倍。

证明 这里只给出证明思路。



注意在图上的回路，例如长度为 l 的回路的条数等于 $\operatorname{tr}\mathbf{A}^l$。

在这个命题中，给出了它们各种幂次和的值，从 $\sum\lambda_i=0,\sum\lambda_i^2=2m$ 可见 λ 存在一个上界。

命题 1.3 (特征值上界)

若 $\lambda_0=\max_i\{\lambda_i\}$，则有

$$\lambda_0 \le \left(\frac{2m(n-1)}{n}\right)^{\frac{1}{2}}$$

另一种类似形式的上界是 $\lambda_0 \le \sqrt{2m-n+1}$（Yuan 1988）。

证明 不会，但是感觉能做，先放着等回来填坑。

关于特征多项式的更多性质要等到后面才学，不写了。

定义 1.3 (邻接代数)

定义在图 Γ 上的邻接代数 (adjacency algebra) 是邻接矩阵 $\mathbf{A}=\mathbf{A}(\Gamma)$ 的多项式形式的代数，记作 $\mathcal{A}(\Gamma)$，其每一个元素都是 $\mathbf{A}$ 的幂的线性组合。

$\mathbf{A}$ 的幂有什么性质，为什么这样定义代数呢？

首先对于图 Γ 中起点为 v_i，终点为 v_j，且长度为 l 的一条路径 (walk)，我们将其写为数列的形式：$\{u_0,u_1,u_2,\dots,u_l\}$，其中 $u_0=v_i,u_l=v_j$，其中 $u_{t-1},u_t,t\in 1,2,\dots,l$ 是连通的。

定理 1.2

图 Γ 中起点为 v_i，终点为 v_j，且长度为 l 的路径的条数为 $\mathbf{A}^l$ 中 (i,j) 位置的值。

证明 考虑归纳法：

1. $l=1$ 时显然成立；
2. 若 $l=L$ 成立，下面证明 $l=L+1$ 时成立：

   考虑与 v_j 相邻的节点 v_h，则起点为 v_i，终点为 v_j，且长度为 $L+1$ 的路径必经过 v_h，且到 v_h 的长度为 L，所以统计 v_i 到 v_h 的路径条数：

$$\sum_{\{v_h,v_j\}\in E\Gamma}\left(\mathbf{A}^L\right)_{ih}=\sum_{h=1}^{n}\left(\mathbf{A}^L\right)_{ih}a_{hj}=\left(\mathbf{A}^{L+1}\right)_{ij}$$

   满足题中形式，故成立。

综上，对于 $l\in\mathbb{N}^*$，该性质成立。

如果 Γ 中任意两个顶点存在一条路径经过他们，则称 Γ 是连通 (connected) 的。连接 v_i,v_j 的路径中最短的长度称为 v_i,v_j 的距离 (distance)，记作 $\partial(v_i,v_j)$。图 Γ 的直径 (diameter) 定义为 $\sup_{x,y\in V\Gamma}\partial(x,y)$。

定理 1.3

连通图 Γ 中的邻接代数 $\mathcal{A}(\Gamma)$ 与直径 $d=\sup_{x,y\in V\Gamma}\partial(x,y)$ 满足：

$$d+1\leq\dim\mathcal{A}(\Gamma)$$

证明 取 $\partial(x,y)=d$，即存在一条路径 $\{w_0,w_1,\ldots,w_d\},w_0=x,w_d=y$，不难发现，对于 w_n,w_m，有 $\partial(w_n,w_m)=|n-m|$。故 $\forall l\in 1,2,\ldots,d,\exists p,q\in[0,d],\partial(p,q)=l$，由上一个定理不难得到，存在一个位置 (p, q)，有 $(\mathbf{A}^i)_{pq}\neq 0$，且 $\mathbf{I},\mathbf{A},\mathbf{A}^2,\ldots,\mathbf{A}^{i-1}$ 在这个位置为 0。所以 $\{\mathbf{I},\mathbf{A},\mathbf{A}^2,\ldots,\mathbf{A}^d\}$ 线性无关，共有 $d+1$ 个元素，得到 $d+1\leq\dim\mathcal{A}(\Gamma)$。

图的谱和邻接代数有密切的联系。邻接矩阵作为实对称矩阵，其最小多项式次数与邻接代数的维度相等，所以我们找到了不同特征根的数量的上界：

推论 1.2

直径为 d 的连通图至少有 $d+1$ 个特征根。

下面来看一个例子：

命题 1.4 (完全图的谱)

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

证明 直接计算：

$$|\lambda\mathbf{I}-\mathbf{A}\,(K_n)|=\begin{vmatrix}\lambda & -1 & \cdots & -1\\ -1 & \lambda & \cdots & -1\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ -1 & -1 & \cdots & \lambda\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}\lambda-n+1 & -1 & \cdots & -1\\ \lambda-n+1 & \lambda & \cdots & -1\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \lambda-n+1 & -1 & \cdots & \lambda\end{vmatrix}$$

$$=(\lambda-n+1)\begin{vmatrix}1 & -1 & \cdots & -1\\ 1 & \lambda & \cdots & -1\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 1 & -1 & \cdots & \lambda\end{vmatrix}=(\lambda-n+1)(\lambda+1)^{n-1}$$

故

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

1.2 正则图

下面研究特殊图的性质。

定义 1.4 (正则图)

一个图被称为正则 (regular) 或 k-正则 (k-regular) 的，当且仅当每个顶点的度数为 k。♣

正则图的邻接矩阵每行每列的和是相同的，所以会有一些有意思的性质。

定理 1.4 (正则图特征值的性质)

若 Γ 是一个 k-正则图，则有:

1. k 是 Γ 的一个特征值;
2. 如果 Γ 连通，则 k 的重数为 1;
3. 特征值绝对值的上界为 k。

♡

证明

1. 注意到对于 k-正则图的邻接矩阵，每行每列的和都为 k，可构造 $\mathbf{u} = [1, 1, \ldots, 1]^T$，有 $\mathbf{Au} = k\mathbf{u}$，故 k 是 Γ 的一个特征值;
2. 注意 $\mathbf{x}$ 左乘 $\mathbf{A}$ 相当于对于每个位置，选取 k 个与其相邻的数相加，所以关注 $\mathbf{x}$ 中的最大值，记为 x_j。有 $(\mathbf{Ax})_j = kx_j \Leftrightarrow \sum_i x_i = kx_j$，其中 i 代表与 j 邻接的点。这个式子中，由 $x_i \le x_j$，得到 $x_i = x_j$，再对 i 进行操作，可将这个性质传递到整个连通块，也就是整个图。故 $\mathbf{x} = x_j\mathbf{u}$，也就是所有的 $\mathbf{x}$ 都是 $\mathbf{u}$ 的倍数，x 的重数为 1。
3. 过程与 2 相似，不过取绝对值最大的元素 y_j，可以得到 $|\lambda||y_j| = |\sum_i y_i| \le \sum_i |y_i| \le k|y_j|$，故 $|\lambda| \le k$。

命题 1.5 (Hoffman 1963)

令 $\mathbf{J}$ 是 $n \times n$ 的全 +1 矩阵，则 $\mathbf{J} \in \mathcal{A}(\Gamma)$ 当且仅当 Γ 连通且正则。♠

证明

1. 先证 “$\Rightarrow$”:
   (a). 由 $\mathbf{J} \in \mathcal{A}(\Gamma)$，故 $\mathbf{J}$ 可以被表示为关于 $\mathbf{A}$ 的多项式。因为 $\mathbf{A}$ 与 $\mathbf{J}$ 都是实对称矩阵，故 $\mathbf{JA} = \mathbf{AJ}$，考虑位置 (i, j)，由 $\sum_{k=1}^n \mathbf{A}_{kj} = \sum_{k=1}^n \mathbf{A}_{ik}$，即点 i 的度数与点 j 的度数相等，故 Γ 是正则图;
   (b). 若 Γ 不连通，即存在点对 v_i, v_j 之间没有路径连通，则 $\forall l > 0, \mathbf{A}_{ij}^l = 0$，而 $\mathbf{J}_{ij} \ne 0$，矛盾!;
2. 再证 “$\Leftarrow$”:
   令 Γ 为连通且 k-正则的，则 k 是 Γ 的一个特征值，所以 $\mathbf{A}$ 的最小多项式 $p(\lambda)$ 满足 $p(\lambda) = (\lambda - k)q(\lambda)$ 的形式，由 $p(\mathbf{A})$，带入得 $\mathbf{A}q(\mathbf{A}) = kq(\mathbf{A})$，这意味着 $q(\mathbf{A})$ 的每一列都是 $\mathbf{A}$ 关于特征值 k 的特征向量，由定理 1.4，$q(\mathbf{A})$ 的每一列都是 $\mathbf{u}$ 的倍数。又 $q(\mathbf{A})$ 是对称矩阵，得到 $q(\mathbf{A})$ 的元素全部相等，是 $\mathbf{J}$ 的倍数，故 $\mathbf{J} \in \mathcal{A}(\Gamma)$。

我们还可以进一步得到 $q(\mathbf{A})$ 与 $\mathbf{J}$ 的关系:

命题 1.6

令 Γ 是一个 n 个点 k-正则的连通图，将它们不同的特征值记为 $k > \lambda_1 > \cdots > \lambda_{s-1}$，若 $q(\lambda) = \prod_i(\lambda - \lambda_i)$，

有：

$$\mathbf{J} = \left(\frac{n}{q(k)}\right) q(\mathbf{A})$$

证明 由上一个命题知 $q(\mathbf{A}) = \alpha\mathbf{J}$，其中 α 是常数，下面考虑特征值。$\alpha\mathbf{J}$ 的特征值是 αn，而 $q(\mathbf{A})$ 有 $q(k)$ 与 $q(\lambda_i)$，但由题知仅有 $q(k) \neq 0$，故得到 $\alpha = q(k)/n$。

这一部分与矩阵联系较为紧密，有许多重要的种类，不妨再来回顾一下相关的知识。

定义 1.5 (循环矩阵)

一个 $n \times n$ 的矩阵 $\mathbf{S}$ 被成为循环矩阵 (circulant matrix)，当且仅当其中的元素满足 $s_{ij} = s_{1,j-i+1}$，$j-i+1$ 的计算是在模 n 意义下的，故 $\mathbf{S}$ 可以被看作是由第一行生成的，记作 $[s_1, s_2, \ldots, s_n]$。
若令 $\mathbf{W}$ 是单位循环矩阵，即 $\mathbf{W} = [0, 1, 0, \ldots, 0]$，$S$ 可被表示为：

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^{n} s_i \mathbf{W}^{i-1}$$

可以注意到 $\mathbf{W}$ 可以作为乘法循环群的生成元，可见特征值在该过程中有特殊的性质，我们有：

命题 1.7

n 阶单位循环矩阵 $\mathbf{W}$ 的特征值为 $1, \omega, \omega^2, \ldots, \omega^{n-1}$，其中 $\omega = \exp(2\pi i/n)$。由此得到 $\mathbf{S}$ 的特征值为：

$$\lambda_r = \sum_{i=1}^{n} s_i \omega^{(i-1)r}, r \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$$

证明 直接计算：

$$|\lambda\mathbf{I} - \mathbf{W}| = \left|\begin{array}{c:cccc} \lambda & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \cdots & \lambda \end{array}\right| = \lambda \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda \end{vmatrix} + (-1)^{n-1} \times (-1) \begin{vmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \lambda & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 \end{vmatrix}$$
$$= \lambda^n + (-1)^{2n-1} = \lambda^n - 1 = 0$$

故可将 λ 写成 n 次单位根的形式。

我们把循环矩阵的定义放到图中：

定义 1.6 (循环图)

图 Γ 被称为循环图 (circulant graph)，当且仅当邻接矩阵 $\mathbf{A}(\Gamma)$ 是循环矩阵。

循环图 Γ 的 $\mathbf{A}$ 的第一行为 $[0, a_2, \ldots, a_n]$，代入上面命题可得到：

定理 1.5 (循环图的特征值)

循环图 Γ 的特征值为：

$$\lambda_r = \sum_{i=2}^{n} a_i \omega^{(i-1)r}, r \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$$

此时 n 个特征值并非总是不同的。

对于一个 n 元环构成的图，记为 C_n，$\mathbf{A}(C_n)$ 的第一行为 $[0, 1, 0, \ldots, 0, 1]$，由上面的定理可以得到其特征值为 $\lambda_r = 2\cos(2\pi r/n)$，可以得到 C_n 的谱：

$$\operatorname{Spec} C_n = \begin{pmatrix} 2 & 2\cos 2\pi/n & \dots & 2\cos(n-1)\pi/n \\ 1 & 2 & \dots & 2 \end{pmatrix} \quad (n \text{ odd})$$

$$\operatorname{Spec} C_n = \begin{pmatrix} 2 & 2\cos 2\pi/n & \dots & 2\cos(n-2)\pi/n & -2 \\ 1 & 2 & \dots & 2 & 1 \end{pmatrix} \quad (n \text{ even})$$

我们来看另一个可能暗示结构上的性质的图：

定义 1.7 (线图)

定义在 Γ 上的线图 (line graph) 记为 $L(\Gamma)$，其每个顶点对应 Γ 中的一条边，两个顶点是邻接的当且仅当它们代表的边有公共顶点。 ♣

对于 n 个顶点和 m 条边的图，将其顶点与边标号可得 $V\Gamma = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 与 $E\Gamma = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$。我们定义图 Γ 的关系矩阵 $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\Gamma) \in \mathbb{R}^{n\times m}$：

$$(\mathbf{X})_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } v_i \text{ and } e_j \text{ are incident} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

可以得到关于 $\mathbf{X}$ 的一些性质：

引理 1.1

对于图 Γ 与如上定义的 $\mathbf{X}$，令 $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\Gamma), \mathbf{A}_L = \mathbf{A}(L(\Gamma))$，有：

1. $\mathbf{X}^T\mathbf{X} = \mathbf{A}_L + 2\mathbf{I}_m$
2. 若 Γ 是 k-正则的，则 $\mathbf{X}\mathbf{X}^T = \mathbf{A}_L + k\mathbf{I}_n$

♡

证明 写出矩阵乘的形式：

$$(\mathbf{X}^T\mathbf{X})_{ij} = \sum_{k=1}^{n} (\mathbf{X})_{ki}(\mathbf{X})_{kj}$$

注意到右侧正是 $\mathbf{A}_L$ 的定义，第二条的证明与第一条相似。

引理 1.2 (线图特征值的下界)

对于 $L(\Gamma)$ 的任一特征值 λ，有 $\lambda \ge -2$。 ♡

证明 矩阵 $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ 元素都是非负的，若 $\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{z} = \lambda\mathbf{z}$，左乘 $\mathbf{z}^T$，由 $\mathbf{z}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{z} = ||\mathbf{X}\mathbf{z}||^2 \ge 0$，故 $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ 的特征值 λ 非负，也就是 $|\lambda\mathbf{I} - \mathbf{X}^T\mathbf{X}| = 0$ 的解非负，由 $\mathbf{X}^T\mathbf{X} - 2\mathbf{I}_m = \mathbf{A}_L$ 可得 A_L 的特征值不小于 -2。

事实上，并非只有线图满足这个性质，更多满足该性质的图后面会补充。

正则图的线图仍然是正则图，对于 k-正则图 Γ，线图 $L\Gamma$ 是 $2(k-1)$-正则图，由正则图特征值的性质，正则图与其线图可能存在一些联系：

定理 1.6 (Sachs 1967)

若 Γ 是 k-正则图，有 n 个点与 $m = nk/2$ 条边，则有：

$$\chi(L(\Gamma);\lambda) = (\lambda+2)^{m-n}\chi(\Gamma;\lambda+2-k)$$

♡

证明 构造两个 $n+m$ 阶的矩阵：

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \lambda\mathbf{I}_n & -\mathbf{X} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_n & \mathbf{X} \\ \mathbf{X}^T & \lambda\mathbf{I}_m \end{bmatrix}$$

可以得到它们的乘积：

$$\mathbf{UV} = \begin{bmatrix} \lambda\mathbf{I}_n - \mathbf{X}\mathbf{X}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}^T & \lambda\mathbf{I}_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{VU} = \begin{bmatrix} \lambda\mathbf{I}_n & \mathbf{0} \\ \lambda\mathbf{X}^T & \lambda\mathbf{I}_m - \mathbf{X}^T\mathbf{X} \end{bmatrix}$$

由 $\det(\mathbf{UV}) = \det(\mathbf{VU})$，以及分块矩阵行列式的性质，可得 $\lambda^m \det\left(\lambda \mathbf{I}_n - \mathbf{X}\mathbf{X}^T\right) = \lambda^n \det\left(\lambda \mathbf{I}_m - \mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)$，有：

$$\begin{aligned}
\chi(L(\Gamma);\lambda) &= \det\left(\lambda \mathbf{I}_m - \mathbf{A}_L\right) \\
&= \det\left((\lambda+2)\mathbf{I}_m - \mathbf{X}^T\mathbf{X}\right) \\
&= (\lambda+2)^{m-n} \det\left((\lambda+2)\mathbf{I}_n - \mathbf{X}\mathbf{X}^T\right) \\
&= (\lambda+2)^{m-n} \det\left((\lambda+2-k)\mathbf{I}_n - \mathbf{A}\right) \\
&= (\lambda+2)^{m-n} \chi(\Gamma;\lambda+2-k)
\end{aligned}$$

由 Γ 的谱：

$$\operatorname{Spec}\Gamma = \begin{pmatrix} k & \lambda_1 & \dots & \lambda_{s-1} \\ 1 & m_1 & \dots & m_{s-1} \end{pmatrix}$$

可以得到 $L(\Gamma)$ 的谱：

$$\operatorname{Spec} L(\Gamma) = \begin{pmatrix} 2k-2 & k-2+\lambda_1 & \dots & k-2+\lambda_{s-1} & -2 \\ 1 & m_1 & \dots & m_{s-1} & m-n \end{pmatrix}$$

命题 1.8

对于 n 个点 k-正则的连通图 Γ，定义其补图 Γ^c 为有相同的点集，边集互补的图，也就是 $\mathbf{A}+\mathbf{A}_c = \mathbf{J}-\mathbf{I}$，则有：

$$(\lambda+k+1)\chi(\Gamma^c;\lambda) = (-1)^n(\lambda-n+k+1)\chi(\Gamma;-\lambda-1)$$

命题 1.9

对于 n 个点 k-正则的连通图 Γ，定义其补图 Γ^c 为有相同的点集，边集互补的图，也就是 $\mathbf{A}+\mathbf{A}_c = \mathbf{J}-\mathbf{I}$，则有：

$$(\lambda+k+1)\chi(\Gamma^c;\lambda) = (-1)^n(\lambda-n+k+1)\chi(\Gamma;-\lambda-1)$$

1.3 圈和割

定义 1.8 (点空间与边空间)

图 Γ 的点空间 (vertex-space) 记为 $C_0(\Gamma)$，代表所有映射 $f: V\Gamma \to \mathbb{C}$。图 Γ 的边空间 (edge-space) 记为 $C_1(\Gamma)$，代表所有映射 $f: E\Gamma \to \mathbb{C}$。

令 $V\Gamma = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$，$E\Gamma = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$，知 $C_0(\Gamma), C_1(\Gamma)$ 分别是 n, m 维的向量空间。又所有 $\eta: V\Gamma \to \mathbb{C}$ 可以被表示为一个列向量 $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$，其中 $y_i = \eta(v_i), i \in 1, 2, \dots, n$，于是我们可以定义一组基 $\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$：

$$\omega_i(v_j) = \begin{cases} 1, & \text{if } i = j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

以相同的方式也可以定义对于 $C_1(\Gamma)$ 的一组基 $\{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_m\}$：

$$\epsilon_i(e_j) = \begin{cases} 1, & \text{if } i = j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

上面讨论的都是无向图，现在讨论边的定向：

定义 1.9 (关联矩阵)

Γ 的关联矩阵 (incidence matrix) 记为 $\mathbf{D}$，代表给 Γ 定向，是一个 $n \times m$ 的矩阵，元素为：

$$d_{ij} = \begin{cases} +1, & \text{if } v_i \text{ is the positive end of } e_j; \\ -1, & \text{if } v_i \text{ is the negatice end of } e_j; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

♣

$\mathbf{D}$ 的每一列只有两个非零元素，可以将 $\mathbf{D}$ 看作 $C_1(\Gamma)$ 到 $C_0(\Gamma)$ 的一个线性映射的代表，不妨记这种线性映射为 D。这个映射也叫做关联映射。$\forall \xi : E\Gamma \to \mathbb{C}$，函数 $D\xi : V\Gamma \to \mathbb{C}$ 定义为：

$$D\xi(v_i) = \sum_{j=1}^{m} d_{ij}\xi(e_j), j \in \{1, 2, \ldots, n\}$$

命题 1.10 (关联矩阵的秩)

令 c 表示 Γ 中连通块的数量，Γ 的关联矩阵 $\mathbf{D}$ 的秩为 $n - c$。

♠

证明 $\mathbf{D}$ 在对 Γ 适当重标号后可以被表示为：

$$\begin{bmatrix} \mathbf{D}^{(1)} & \mathbf{0} & \ldots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(2)} & \ldots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ldots & \mathbf{D}^{(c)} \end{bmatrix}$$

其中 $\mathbf{D}^{(i)}$ 是 Γ 的一连通部分 $\Gamma^{(i)}$ 的关联矩阵。只要证明 $\mathbf{D}^{(i)}$ 的秩为 $n_i - 1$，其中 $n_i = |V\Gamma^{(i)}|$，就可以得出 $\mathbf{D}$ 的秩为 $\sum_{i=1}^{c} n_i - 1 = n - c$。

令 $\mathbf{d}_j$ 代表 $\mathbf{D}^{(i)}$ 中与 Γ 里与 v_j 相关的行。由于在 $\mathbf{D}^i$ 的每列中仅有一个 +1 与 −1，所以 $\mathbf{D}^i$ 每行之和为零向量，得到 $\mathbf{D}^i$ 的秩最多为 $n_i - 1$。那么令一组不全为 0 的系数 α，有 $\sum \alpha_j \mathbf{d}_j = 0$，$j$ 取遍 $\mathbf{D}^{(i)}$ 中的点。注意到对于一列，仅有两个值非空，则两行对应系数相等，又由 $\Gamma^{(i)}$ 连通，该等价关系可以传递，故所有的 α_j 相等，这也就得到了 $\sum \mathbf{d}_j = 0$，也就是 $\mathbf{D}^{(i)}$ 的秩为 $n_i - 1$。

定义 1.10 (图的秩)

图 Γ 的秩 (rank) $r(\Gamma) = n - c$，余秩 $s(\Gamma) = m - n + c$，其中 c 表示 Γ 中连通块的数量。

♣

现在研究邻接映射 D 的核与 Γ 性质的练习。令边集 $Q \subseteq E\Gamma$ 使得 $\langle Q \rangle$ 是一个环，则 Q 有两种环定向 (cycle-orientations) 方式，我们选择一种环定向，定义 $\xi_Q \in C_1(\Gamma)$：

1. 若 $e \in Q$，且在图中的定向与环定向相同，则 $\xi_Q(e) = +1$；
2. 若 $e \in Q$，且在图中的定向与环定向不同，则 $\xi_Q(e) = -1$；
3. 若 $e \notin Q$，则 $\xi_Q(e) = 0$。

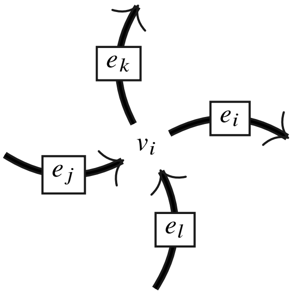
定理 1.7 (D 中核的性质)

1. 图 Γ 关联矩阵 D 的核是一个维度为 Γ 的余秩的线性空间；
2. 若 Q 是 Γ 中的一个环，则 $\xi_Q \in \ker Q$。

♡

证明

1. D 的秩为 $n - c$，而 $C_1(\Gamma)$ 的维度为 m，说明 $\ker D$ 的维度为 $m - (n - c) = s(\Gamma)$；
2. 不妨用列向量 $\mathbf{x}_Q$ 来表示 ξ_Q，由于 D 代表 $C_1(\Gamma)$ 与 $C_0(\Gamma)$ 的基，我们用 $\mathbf{D}$ 来表示 D。现在讨论 $\mathbf{D}$ 的一行 $\mathbf{d}_i$ 与 $\mathbf{x}_Q$ 的内积 $(\mathbf{D}\mathbf{x}_Q)_i$：



此处只画出了两条不在 Q 中的边，其他边同理，可以发现若 Q 中的边不与 v_i 相连，则对应的值为 0；若 v_i 与 Q 中的边相连，则由 ξ_Q 的定义，必仅有一个 -1 项与 $+1$ 项，两者抵消，值也为 0，即 $\mathbf{D}\mathbf{x}_Q=\mathbf{0}$，也就是 $\xi_Q\in\ker Q$。

若 ρ,σ，在 Γ 的边空间中，可以定义它们的内积 (inner product)：（其中上面加横线表示复共轭）

$$(\rho,\sigma)=\sum_{e\in E\Gamma}\rho(e)\overline{\sigma(e)}$$

定义 1.11 (cycle-subspace 与 cut-subspace)

Γ 的 cycle-subspace 是 Γ 关联映射的核。Γ 的 cut-subspace 是 $C_1(\Gamma)$ 的正交补。

第一条是由上面的定理引申出的，也就是所有代表 Γ 中环的向量都属于 cycle-subspace。存在两个集合 $V_1,V_2\subsetneq V\Gamma$，且 $V_1\cap V_2=\emptyset$、$V_1\cup V_2=V\Gamma$，令 $H\subseteq E\Gamma$，包含 $E\Gamma$ 中所有一端在 V_1 中而另一端在 V_2 中的边，则称 H 是一个割 (cut)。类似于环定向，我们定义 H 的割定向 (cut-orientations)，标定 V_1 与 V_2 作为 H 中边的出边与入边，然后定义 H 上的函数 $\xi_H\in C_1(\Gamma)$：

1. 若 $e\in H$，且在图中的定向与割定向相同，则 $\xi_H(e)=+1$；
2. 若 $e\in H$，且在图中的定向与割定向不同，则 $\xi_H(e)=-1$；
3. 若 $e\notin H$，则 $\xi_H(e)=0$。

定义 1.12 (等周数)

对于任意的非空点集 $X\subseteq V\Gamma$，存在一个割将 $V\Gamma$ 划分为 X 与 $\Gamma\backslash X$，记为 δX，则其等周数 (isoperimetric number, 或称 Cheeger constant) 定义为：

$$i(\Gamma)=\min_{|X|\le|V\Gamma|/2}\frac{|\delta X|}{|X|}$$

例如 $i(K_n)=\lceil n/2\rceil$。

命题 1.11

1. Γ 的 cut-subspace 是一个维度为 Γ 的秩的线性空间。
2. 对于 Γ 中的割 H，则 ξ_H 属于 Γ 的 cut-subspace。

证明

1. cycle-subspace 的维数是 $m-n+c$，cut-subspace 作为它的正交补，维度是 $n-c=r(\Gamma)$；
2. 若 H 是 Γ 中的割，则存在 V_1,V_2 定义如上，类似地，再令 $\mathbf{x}_H$ 为代表 ξ_H 的列向量，有

$$\mathbf{x}_H^t=\pm\frac{1}{2}\left[\sum_{v_i\in V_1}\mathbf{d}_i-\sum_{v_i\in V_2}\mathbf{d}_i\right]$$

其中 $\mathbf{d}_i$ 是关联矩阵中于 v_i 相关的行向量，等式右边的符号取决于取决于两种割定向的选取。注意到若 $\mathbf{D}\mathbf{z}=\mathbf{0}$，则 $\mathbf{d}_i\mathbf{z}=0,\forall v_i\in V$，还可以得到 $\mathbf{x}_H^T\mathbf{z}=0$，所以 ξ_H 是 cycle-subspace 的正交补，由定义得，这是 cut-subspace。

定义 1.13

令 $\mathbf{D}$ 为 Γ 定向后的关联矩阵，$\mathbf{A}$ 是 Γ 的邻接矩阵，拉普拉斯矩阵 (Laplacian matrix) $\mathbf{Q}$ 定义为：

$$\mathbf{Q} = \mathbf{D}\mathbf{D}^T = \Delta - \mathbf{A}$$

其中 Δ 是一个对角矩阵，$(\Delta)_{ii}$ 的值为 v_i 的度数，可以看出 $\mathbf{Q}$ 与 Γ 的定向无关。

证明 $(\mathbf{D}\mathbf{D}^T)_{ij}$ 是 $\mathbf{D}$ 中行 $\mathbf{d}_i$ 与 $\mathbf{d}_j$ 的内积，下面讨论两边 (i, j) 位置的元素：

1. 若 $i \neq j$，这两行在同一个位置同时非零，当且仅当存在一条边连接 v_i 与 v_j。这两个非零元素分别为 +1 与 −1，故此时 $(\mathbf{D}\mathbf{D}^T)_{ij} = -1 = -(\mathbf{A})_{ij}$；
2. 若 $i = j$，$(\mathbf{D}\mathbf{D}^T)_{ii}$ 是 $\mathbf{d}_i$ 与自己的内积，又其中非零元素个数为 v_i 的度数，故 $(\mathbf{D}\mathbf{D}^T)_{ii} = \Delta_{ii}$。

命题 1.12 (Laplacian 谱)

令 $\mathbf{Q}$ 的特征值为 $\mu_0 \leq \mu_1 \leq \cdots \leq \mu_{n-1}$，我们有：

1. $\mu_0 = 0$，对应的特征向量为 $[1, 1, \ldots, 1]$；
2. 若 Γ 连通，则 $\mu_1 > 0$；
3. 若 Γ 是 k-正则的，则 $\mu_i = k - \lambda_i$，其中 λ_i 是 Γ 降序排序后第 i 个特征值。

1.4 生成树

关注 cycle-subspace 与 cut-subspace 的基是一个很好的锻炼机会，这个问题被 Kirchhoff(1847) 在对电路网络的研究中解决了。现在把注意力放在连通图上，因为非连通图的 cycle-subspace 与 cut-subspace 是分量对应空间的直和，故在本章中仍有 Γ 表示 n 个点与 m 条边的连通图，故 $r(\Gamma) = n - 1$，$s(\Gamma) = m - n + 1$，我们假定 Γ 已经被定向了。

定义 1.14 (生成树)

Γ 的生成树 (spanning tree) 是 Γ 的一个子图，有 n 个点与 $n - 1$ 条边，且该子图连通。

在此处用 T 表示生成树，方便起见，有时也用 T 也表示它的边集，由这个定义可以直接得到：

引理 1.3

T 是连通图 Γ 的生成树，则：

1. $\forall g \in E\Gamma, g \notin T$，仅存在一个环包含 g 与 T 中的边；
2. $\forall h \in E\Gamma, g \in T$，仅存在一个割包含 h 与 T 外的边。

我们用 $\mathrm{cyc}(T, g)$ 与 $\mathrm{cut}(T, h)$ 来表示这个唯一的环与割。我们用 Γ 中的定向来分别给 $\mathrm{cyc}(T, g)$ 与 $\mathrm{cut}(T, h)$ 进行环定向与割定向。于是可以在 $C_1(\Gamma)$ 中，按照上一节的定义来定义两个元素：$\xi_{(T,g)}$ 与 $\xi_{(T,h)}$。

定理 1.8

与上一个引理中的定义相同，我们有：

1. g 跑遍 $E\Gamma - T$ 时，$m - n + 1$ 个 $\xi_{(T,g)}$ 构成 Γ 的 cycle-subspace 的一组基；
2. h 跑遍 T 时，$n - 1$ 个 $\xi_{(T,h)}$ 构成 Γ 的 cut-subspace 的一组基。

证明

1. 上一中我们证明了 $\xi_{(T,g)}$ 在 cycle-subspace 中，注意到不存在两个 $g \neq g'$，有 $\mathrm{cyc}(T, g) = \mathrm{cyc}(T, g')$，共有 $m - n + 1$ 个向量，而 cycle-subspace 正有 $m - n + 1$ 维，所以可以得到其构成 cycle-subspace 的一组基；
2. 类似上一条证明，自证不难。

环与割只是图的一部分，直接用关联矩阵来描述较为麻烦，我们来考虑关联矩阵的子矩阵的性质，便于导出环与割。

命题 1.13 (Poincare 1901)

对于图 *Gamma* 的关联矩阵 D 的任意子矩阵，其行列式只有三种取值：0、+1 与 −1。

证明 令这个子矩阵为 $\mathbf{S}$。

1. 若 $\mathbf{S}$ 的每一列都有两个非零元素，则可以得到列的和为 0，此时 $\det \mathbf{S} = 0$。若 $\mathbf{S}$ 有其中一列没有非零元素，则 $\det \mathbf{S} = 0$;
2. 对于存在一列仅有一个非零元素的 $\mathbf{S}$，对这一列进行展开，得到 $\det \mathbf{S} = \pm \det \mathbf{S}'$，其中 $\mathbf{S}'$ 是 $\mathbf{S}$ 的余子式，持续这个过程，直到抵达 1. 中结果，或最终只有一个元素 +1 或 −1。

经过上述过程，可以发现 $\det \mathbf{S}$ 仅有三种可能的结果：0、+1 与 −1。

命题 1.14

若 U 是 $E\Gamma$ 包含 $n-1$ 个元素的子集，令 $\mathbf{D}_U$ 表示 $(n-1)\times(n-1)$ 的 $\mathbf{D}$ 的子矩阵，包含与 U 相关的行与任意 $n-1$ 列。则 $\mathbf{D}_U$ 可逆，当且仅当 U 是 Γ 的生成树。

证明

1. $\Leftarrow$：若 $\langle U\rangle$ 是 Γ 的生成树，$\mathbf{D}_U$ 是由 U 的关联矩阵 $\mathbf{D}'$ 的 $n-1$ 行组成的，由 $\langle U\rangle$ 是连通的，故 $\mathbf{D}'$ 的秩为 $n-1$，所以 $\mathbf{D}_U$ 是可逆的。
2. $\Rightarrow$：若 $\mathbf{D}_U$ 是可逆的，故 $\mathbf{D}'$ 有 $(n-1)\times(n-1)$ 的子矩阵，因此 $\mathbf{D}'$ 的秩为 $n-1$。由 $|U| = n-1$，$\langle U\rangle$ cycle-subspace 的维度为 0，故 $\langle U\rangle$ 是 Γ 的生成树。

对于 $V\Gamma = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ 与 $E\Gamma = \{e_1, e_2, \ldots, e_m\}$，选定一种标号方式使得 $\{e_1, e_2, \ldots, e_{n-1}\}$ 是给定的生成树 T 的边集，如此 Γ 的关联矩阵可以被分块为：

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_T & \mathbf{D}_N \\ \multicolumn{2}{c}{\mathbf{d}_n} \end{bmatrix}$$

其中 $\mathbf{D}_T$ 是 $n-1$ 阶的可逆方阵，最后一行 $\mathbf{d}_n$ 与其他行线性相关。

对于剩下的边，令 $\mathbf{C}$ 表示代表 $\xi_{(T),e_j}, n \le j \le m$ 标准基的向量作为列组成的矩阵，$\mathbf{C}$ 可以被表示为：

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_T \\ \mathbf{I}_{m-n+1} \end{bmatrix}$$

$\mathbf{C}$ 的每一列表示一个环，且属于 $\mathbf{D}$ 的核，有 $\mathbf{DC} = 0$，故

$$\mathbf{C}_T = -\mathbf{D}_T^{-1}\mathbf{D}_N$$

用相同的方式来表示 T 中的边，令 $\mathbf{K}$ 的每一列表示 $\xi_{T,e_j}, 1 \le j \le n-1$，它可以被写为：

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n-1} \\ \mathbf{K}_T \end{bmatrix}$$

因为 $\mathbf{K}$ 的每一行都属于 cycle-subspace 的正交补，故 $\mathbf{CK}^T = \mathbf{0}$，故 $\mathbf{C}_T + \mathbf{K}_T^T = \mathbf{0}$，因此：

$$\mathbf{K}_T = (\mathbf{D}_T^{-1}\mathbf{D}_N)^T$$

上面关于 $\mathbf{C}_T$ 与 $\mathbf{K}_T$ 的等式展示了基础的环与割与 T 的关系可以由关联矩阵推出，我们还可以使用这种代数的方法简单地证明下面这个命题：

定理 1.9

对于 Γ 的生成树 T，若 Γ 中的边 $a \in T, b \notin T$，则：

$$b \in \mathrm{cut}(T, a) \Leftrightarrow a \in \mathrm{cyc}(T, b)$$

证明 这个结果可以直接由 $\mathbf{C}_T$ 与 $\mathbf{K}_T$ 的结果推出，因为我们由 $\mathbf{C}_T + \mathbf{K}_T = \mathbf{0}$。