

# 图论

## 第四、五讲：图的矩阵表示

方聪

2024 年秋季

- ① 关联矩阵
- ② 邻接矩阵与相邻矩阵
- ③ 谱图理论

- ① 关联矩阵
- ② 邻接矩阵与相邻矩阵
- ③ 谱图理论

## 有向图关联矩阵

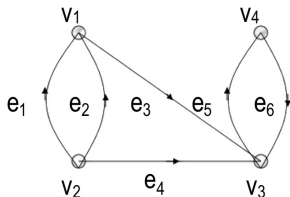
- 设  $D = \langle V, E \rangle$  是无环有向图,  
 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}, E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$
- 关联矩阵 (*incidence matrix*):

$$M(D) = [m_{ij}]_{n \times m}, m_{ij} = \begin{cases} 1, v_i \text{ 是 } e_j \text{ 的起点} \\ 0, v_i \text{ 与 } e_j \text{ 不关联} \\ -1, v_i \text{ 是 } e_j \text{ 的终点} \end{cases}$$

- $D$  与  $M(D)$  是相互唯一确定的

# 有向图关联矩阵 (例)

例:



$$M(D) = \begin{matrix} & \begin{matrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

图 1: 有向图关联矩阵

## 有向图关联矩阵 (性质)

- 每列和为零:  $\sum_{i=1}^n m_{ij} = 0$  (每条边关联两个顶点)
- 每行绝对值和为  $d(v_i)$ :  $d(v_i) = \sum_{j=1}^m m_{ij}$ , 其中 1 的个数为  $d^+(v)$ , -1 的个数为  $d^-(v)$
- 握手定理:  $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m m_{ij} = 0$  (各顶点入度之和等于出度之和)
- 平行边: 相同两列

## 无向图关联矩阵

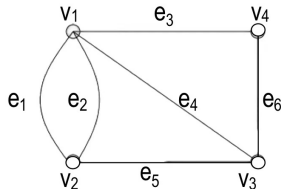
- 设  $G = \langle V, E \rangle$  是无环无向图,  
 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}, E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$
- 关联矩阵 (incidence matrix):

$$M(G) = [m_{ij}]_{n \times m}, m_{ij} = \begin{cases} 1, v_i \text{ 与 } e_j \text{ 关联} \\ 0, v_i \text{ 与 } e_j \text{ 不关联} \end{cases}$$

- $G$  与  $M(G)$  是相互唯一确定的

# 无向图关联矩阵 (例)

例:



$$M(G) = \begin{matrix} & \begin{matrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

图 2: 无向图关联矩阵



# 无向图关联矩阵 (性质)

- 每列和为 2:  $\sum_{i=1}^n m_{ij} = 2$
- 每行和为  $d(v)$ :  $d(v_i) = \sum_{j=1}^m m_{ij}$
- 每行所有 1 对应的边组成的集合为  $v_i$  的关联集
- 平行边: 相同两列
- 伪对角阵: 若  $G$  有  $k$  个连通分支, 则  $G$  的关联矩阵  $M(G)$  为伪对角阵

$$M(G) = \begin{matrix} & \begin{matrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad M(G) = \begin{bmatrix} M(G_1) & & \\ & M(G_2) & \\ & & \ddots \\ & & & M(G_k) \end{bmatrix}$$

图 3: 无向图的关联矩阵

## 无向图基本关联矩阵

- 设  $G = \langle V, E \rangle$  是无环无向图,  
 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}, E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$
- 任意 1 个顶点
- 基本关联矩阵 (*fundamental incidence matrix*): 从  $M(G)$  删除参考点对应的行, 记作  $M_f(G)$

# 无向图关联矩阵的秩

## 定理

$n$  阶无向连通图  $G$  的关联矩阵的秩  $r(M(G)) = n - 1$

## 证明.

在关联矩阵中删掉一行，依然可以复原原始矩阵，因此  $r \leq n - 1$ ，下面证明  $r \geq n - 1$ 。取  $M$  的前  $n - 1$  行，记为  $M_1, \dots, M_{n-1}$ ，他们是线性无关的，否则必定存在不全为 0 的  $k_1, \dots, k_{n-1} \in \{0, 1\}$ ，在模 2 加法意义下使得  $\sum_{i=1}^{n-1} k_i M_i = 0$ ，不妨设其中  $k_1, \dots, k_s = 1$  其余为 0，此处  $s \neq 1$ ，否则  $v_1$  为孤立点与连通矛盾；此时  $M$  的子阵  $[M_1, \dots, M_s]^T$  每列恰有两个 1 或者每列均为 0，可以得到  $G$  至少有两个连通分支，矛盾  $\square$

# 无向图基本关联矩阵的秩

## 定理

$n$  阶无向连通图  $G$  的基本关联矩阵的秩  $r(M_f(G)) = n - 1$

## 推论

- 推论 1:  $G$  有  $p$  个连通分支, 则  
 $r(M(G)) = r(M_f(G)) = n - p$ , 其中  $M_f(G)$  是从  $M(G)$  的每个对角块中删除任意 1 行而得到的
- 推论 2:  $G$  连通  $\Leftrightarrow r(M(G)) = r(M_f(G)) = n - 1$

# 基本关联矩阵与生成树

## 定理

设  $M_f(G)$  是  $n$  阶连通图  $G$  的一个基本关联矩阵。 $M'_f$  是  $M_f(G)$  中任意  $n-1$  列组成的方阵, 则  $M'_f$  各列所对应的边集  $\{e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_{n-1}}\}$  的导出子图  $G[\{e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_{n-1}}\}]$  是  $G$  的生成树当且仅当  $M'_f$  的行列式  $|M'_f| \neq 0$

## 用关联矩阵求所有生成树

- 忽略环, 求关联矩阵
- 任选参考点, 求基本关联矩阵
- 求所有  $n-1$  阶子方阵, 计算行列式, 行列式非 0 的是生成树

- ① 关联矩阵
- ② 邻接矩阵与相邻矩阵
- ③ 谱图理论





## 有向图邻接矩阵 (性质)

- 每行和为出度:  $\sum_{j=1}^n a_{ij} = d^+(v_i)$
- 每列和为入度:  $\sum_{i=1}^n a_{ij} = d^-(v_j)$
- 握手定理:  $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} = \sum_{i=1}^n d^+(v_i) = \sum_{j=1}^n d^-(v_j)$
- 环个数:  $\sum_{i=1}^n a_{ii}$

## 邻接矩阵与通路数

### 定理

设  $A(D) = A = [a_{ij}]_{n \times n}$ ,  $A^r = A^{r-1} \cdot A$ , ( $r \geq 2$ ),  $A^r = [a_{ij}^{(r)}]_{n \times n}$ , 则

- $a_{ij}^{(r)}$  = 从  $v_i$  到  $v_j$  长度为  $r$  的通路总数
- $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^{(r)}$  = 长度为  $r$  的通路总数
- $\sum_{i=1}^n a_{ii}^{(r)}$  = 长度为  $r$  的回路总数

### 推论

$$B_r = A + A^2 + \dots + A^r = [b_{ij}^{(r)}]_{n \times n},$$

- $b_{ij}^{(r)}$  = 从  $v_i$  到  $v_j$  长度小于等于  $r$  的通路总数
- $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n b_{ij}^{(r)}$  = 长度小于等于  $r$  的通路总数

## 用邻接矩阵求通路数 (例)

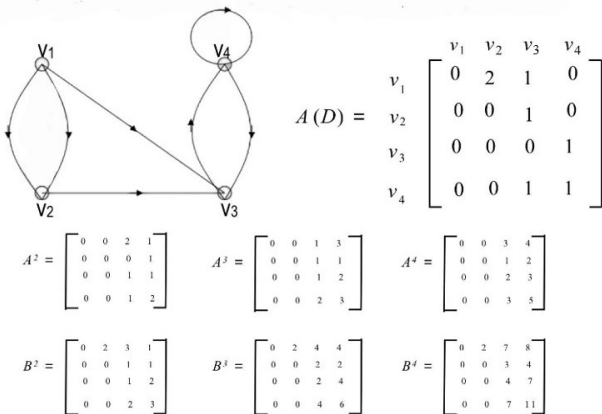


图 5: 邻接矩阵求通路数

## 用邻接矩阵求通路数 (例, 续)

- $v_2$  到  $v_4$  长度为 3 和 4 的通路数 : 1, 2
- $v_2$  到  $v_4$  长度  $\leq 4$  的通路数 : 4
- $v_4$  到  $v_4$  长度为 4 的回路数 : 5
- $v_4$  到  $v_4$  长度  $\leq 4$  的回路数 : 11

$$A^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$A^3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

$$A^4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & 5 \end{bmatrix}$$

$$B^2 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

$$B^3 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

$$B^4 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 7 & 8 \\ 0 & 0 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 7 \\ 0 & 0 & 7 & 11 \end{bmatrix}$$

图 6: 邻接矩阵求通路数

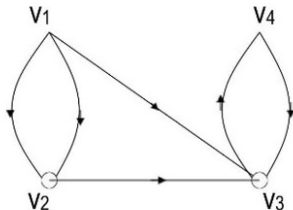
# 可达矩阵

- 设  $D = \langle V, E \rangle$  是  $n$  阶有向图,  $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$
- 可达矩阵:  $P(D) = [p_{ij}]_{n \times n}, p_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{从 } v_i \text{ 可达 } v_j \\ 0, & \text{从 } v_i \text{ 不可达 } v_j \end{cases}$

## 可达矩阵 (性质)

- 主对角线元素都是 1:  $\forall v_i \in V$ , 从  $v_i$  可达  $v_i$
- $\forall i \neq j, p_{ij} = 1 \Leftrightarrow b_{ij}^{(n-1)} > 0$

# 可达矩阵 (例)



$$A(D) = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

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

$$A^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$A^3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

$$A^4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & 5 \end{bmatrix}$$

$$B^2 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

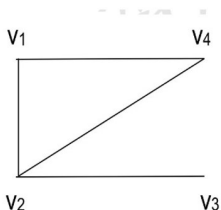
$$B^3 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 6 \end{bmatrix}$$

$$B^4 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 7 & 8 \\ 0 & 0 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 7 \\ 0 & 0 & 7 & 11 \end{bmatrix}$$

# 无向图相邻矩阵

- 设  $G = \langle V, E \rangle$  是无向简单图,  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$
- 相邻矩阵 (*adjacence matrix*) :  $A(G) = [a_{ij}]_{n \times n}$ ,  $a_{ii} = 0$ ,  

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, v_i \text{ 与 } v_j \text{ 相邻}, i \neq j \\ 0, v_i \text{ 与 } v_j \text{ 不相邻} \end{cases}$$



$$A(G) = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

图 8: 无向图相邻矩阵



## 无向图相邻矩阵 (性质)

- $A(G)$  对称:  $a_{ij} = a_{ji}$
- 每行 (列) 和为顶点度:  $\sum_{i=1}^n a_{ij} = d(v_j)$
- 握手定理:  $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} = \sum_{i=1}^n d(v_i) = 2m$

## 相邻矩阵与通路数

### 定理

设  $A(G) = A = [a_{ij}]_{n \times n}$ ,  $A^r = A^{r-1} \cdot A$ , ( $r \geq 2$ ),  $A^r = [a_{ij}^{(r)}]_{n \times n}$ ,  $B_r = A + A^2 + \dots + A^r = [b_{ij}^{(r)}]_{n \times n}$ , 则

- $a_{ij}^{(r)}$  = 从  $v_i$  到  $v_j$  长度为  $r$  的通路总数
- $\sum_{i=1}^n a_{ii}^{(r)}$  = 长度为  $r$  的回路总数

### 推论

- $a_{ii}^{(2)} = d(v_i)$
- $G$  连通  $\Rightarrow$  距离  $d(v_i, v_j) = \min \{r | a_{ij}^{(r)} \neq 0\}$

# 用相邻矩阵求通路数 (例)

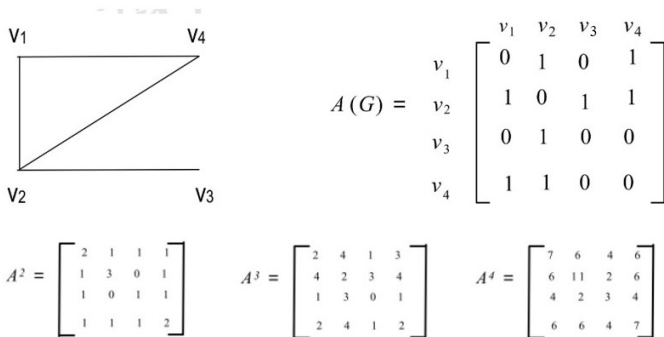


图 9: 用相邻矩阵求通路数

## 用相邻矩阵求通路数 (例, 续)

- $v_1$  到  $v_2$  长度为 4 的通路数: 6  
14142, 14242, 14232, 12412, 14212, 12142
- $v_1$  到  $v_3$  长度为 4 的通路数: 4  
12423, 12323, 14123, 12123
- $v_1$  到  $v_1$  长度为 4 的回路数: 7  
14141, 14241, 14121, 12121, 12421, 12321, 12141

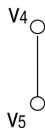
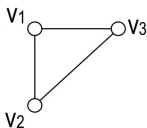
# 连通矩阵

- 设  $G = \langle V, E \rangle$  是  $n$  阶无向简单图,  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$
- 连通矩阵:  $P(G) = [p_{ij}]_{n \times n}, p_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{若 } v_i \text{ 与 } v_j \text{ 连通} \\ 0, & \text{若 } v_i \text{ 与 } v_j \text{ 不连通} \end{cases}$

## 连通矩阵 (性质)

- 主对角线元素都是 1:  $\forall v_i \in V, v_i$  与  $v_i$  连通
- 连通图: 所有元素都是 1
- 伪对角阵: 对角块是连通分支的连通矩阵
- 设  $B_r = A + A^2 + \dots + A^r = [b_{ij}^{(r)}]_{n \times n}$ , 则  
 $\forall i \neq j, p_{ij} = 1 \Leftrightarrow b_{ij}^{(n-1)} > 0$

# 连通矩阵 (例)



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

图 10: 连通矩阵

- ① 关联矩阵
- ② 邻接矩阵与相邻矩阵
- ③ 谱图理论



## 度数矩阵与拉普拉斯矩阵

- 设  $G = \langle V, E \rangle$  是无向简单图,  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$
- $G$  的度数矩阵:  $D = [d_{ij}]_{n \times n}$ ,  $d_{ij} = \begin{cases} d(i), & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$ , 其中  
 $d_{n \times 1} = (d(i))_{1 \leq i \leq n} = \mathbf{A} \mathbf{1}_n$ ,  $\mathbf{A}$  为  $G$  的相邻矩阵
- 拉普拉斯矩阵  $L = D - A$
- $L$  的二次型:  $x^T L x = \sum_{(a,b) \in E} (x_a - x_b)^2$

# 拉普拉斯二次型

证明.

$$x^T Ax = \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} A_{uv} x_u x_v = \sum_{u \in V} \sum_{v \in N(u)} x_u x_v = 2 \sum_{(u,v) \in E} x_u x_v \quad (1)$$

$$x^T Dx = \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} D_{uv} x_u x_v = \sum_{u \in V} d(u) x_u^2 \quad (2)$$



# 拉普拉斯二次型

证明.

结合 (1) 和 (2), 有

$$\begin{aligned}x^{\top}Ax &= \sum_{u \in V} d(u)x_u^2 - 2 \sum_{(u,v) \in E} x_u x_v \\&= \sum_{(u,v) \in E} (x_u^2 + x_v^2 - 2x_u x_v) \\&= \sum_{(u,v) \in E} (x_u - x_v)^2\end{aligned}\tag{3}$$



# 谱定理

## 定理 (谱定理)

若  $M$  为一个  $n \times n$  的实对称矩阵, 则存在实数  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  和  $n$  个相互正交的单位向量  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ , 其中对于任意  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ , 向量  $\psi_i$  为矩阵  $M$  的特征向量, 其对应的特征值为  $\lambda_i$  i.e.  $M\psi_i = \lambda_i\psi_i$

# 拉普拉斯矩阵性质

## 定理

对于简单无向图  $G = \langle V, E \rangle$ , 其拉普拉斯矩阵  $L$  是半正定的

## 证明.

取  $x$  为  $L$  的单位特征向量, 则有  $x^T Lx = x^T \lambda x = \lambda$   
 $\Rightarrow \lambda = x^T Lx = \sum_{(a,b) \in E} (x_a - x_b)^2 \geq 0$  故  $L$  半正定 □

# 拉普拉斯矩阵性质

## 定理

$L$  的最小特征值  $\lambda_1 = 0$

## 证明.

由于  $L1_n = (D - A)1_n = 0$ , 知  $0$  为  $L$  的一个特征值, 再由  $L$  半正定知  $\lambda_1 = 0$  □

## 拉普拉斯矩阵性质

### 定理

$0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$  为图  $G = \langle V, E \rangle$  的拉普拉斯矩阵  $L$  的特征值, 则  $\lambda_2 > 0$  当且仅当图  $G$  是连通的

# 拉普拉斯矩阵性质

## 定理

$0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$  为图  $G = \langle V, E \rangle$  的拉普拉斯矩阵  $L$  的特征值, 则  $\lambda_2 > 0$  当且仅当图  $G$  是连通的

## 证明.

若图  $G$  不连通, 则  $G$  可以写成两个不连通的子图  $G_1, G_2$  的并,  
 $L = \begin{bmatrix} L_{G_1} & 0 \\ 0 & L_{G_2} \end{bmatrix}$ , 取  $x_1 = \begin{bmatrix} 0_{G_1} \\ 1_{G_2} \end{bmatrix}$ ,  $x_2 = \begin{bmatrix} 1_{G_1} \\ 0_{G_2} \end{bmatrix}$ ,  $\Rightarrow Lx_1 = Lx_2 = 0$ ,  
 因此  $L$  关于特征值 0 至少有两个相互正交的特征向量  $x_1, x_2$ , 故  
 $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$

若  $G$  连通, 设  $\psi$  为  $L$  关于特征值 0 对应的特征向量,  $L\psi = 0$ ,  
 $\psi^T L \psi = \sum_{(a,b) \in E} (\psi_a - \psi_b)^2 = 0, \Rightarrow \forall (a,b) \in E, \psi_a = \psi_b$ , 由于  
 $G$  连通, 知  $\psi = c1_n$ , 因此 0 对应的特征空间维数为 1,  
 $\Rightarrow \lambda_2 > \lambda_1 = 0$



# 拉普拉斯矩阵 (例)

## 定理

完全图  $K_n$  的拉普拉斯矩阵存在特征值 0 和  $n$ ，其中  $n$  对应的特征空间重数为  $n - 1$

## 证明.

设  $\psi$  为任意与  $1_n$  正交的非零向量，i.e.  $\sum_{i=1}^n \psi(i) = 0$ ,  $L\psi(i) = \sum_{(i,j) \in E} (\psi_i - \psi_j) = \sum_{j \neq i} (\psi_i - \psi_j) = (n-1)\psi_i - \sum_{j \neq i} \psi_j = n\psi_i$   
由  $i$  的任意性， $L\psi = n\psi$ ，因此全部与  $1_n$  正交的向量均为特征值  $n$  对应的特征向量，重数为  $n - 1$  □

## 低频/高频特征值

- 对于图  $G$  的拉普拉斯矩阵  $L$  的全部特征值  $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ , 较小的  $\lambda_i$  被称为低频特征值,  $\lambda_n$  被称为高频特征值, 低频特征值对应的特征向量可以用于图的结构模拟

# Courant – Fischer Theorem

## 定理 (Courant – Fischer Theorem)

对于对称矩阵  $M$  以及  $n$  个特征值  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ , 有:

$$\lambda_k = \max_{S \in R^n, \dim S = k} \min_{x \in S, x \neq 0} \frac{x^T M x}{x^T x} = \min_{T \in R^n, \dim T = n - k + 1} \max_{x \in T, x \neq 0} \frac{x^T M x}{x^T x}$$