图谱论导引(第十五期)

等距正则图

设G为半径为d的连通图. 对$i=1,2,\ldots,d$, 记$\Gamma_i(u)$为一切与u相距i长度之点集合. 称G为等距正则的(distance-regular)若且仅若存在非负整数$b_0,b_1,\ldots,b_{d-1}$与$c_1,c_2,\ldots,c_d$使得对任意相距i的两点u,v都有

$$\begin{aligned} b_i &= |\Gamma_{i+1}(u)\cap\Gamma_1(v)| \\ c_i &= |\Gamma_{i-1}(u)\cap\Gamma_1(v)| \end{aligned}.$$

例如Petersen图等距正则, 其系数$\{b_0,b_1;c_1,c_2\}=\{3,2;1,1\}$.

对Johnson图$J(n,m)$(等价的, $J(n,n-m)$)而言, 直径为$\min\{m,n\}$. 系数

$$\begin{aligned} b_i &= (m-i)(n-m-i) \\ c_i &= i^2 \end{aligned}.$$

称图G与谱唯一对应, 若且仅若G谱对应的所有图同构于G. 例如任意度为2的正则图可由谱决定. 由于G之谱唯一确定了$\overline{G}$之谱, 从而度为$n-3$之简单图可由谱唯一确定. 实际上, Finck等人证明了度为$n-3$的重边图之谱亦可唯一确定原图. 实际上大有"一谱多图"的例子, 例如$K_{1,4}$与$K_1\dot\cup C_4$之谱均为$(0^2,+2,-2)$, 而两图并不相同. 判断可被谱唯一决定的图系本章关键. 例如以下例子:

1. $L(\overline{C_6})$能由谱唯一确定. 换言之, $(4,2,1^2,(-1)^2,(-2)^3)$唯一确定了$L(\overline{C_6})$.

   证明: 下证明$(4,2,1^2,(-1)^2,(-2)^3)$唯一确定$L(\overline{C_6})$. 注意到$n\lambda_{\max}=36=\sum\lambda_i^2$, 从而原图(记作$G$)正则, 且其度为$4$. 任取$u\in V(G)$, 记$u$邻域的导出子图为$G(u)$. 注意到$|E(G)|=\dfrac{1}{2}\sum\lambda_i^2=18$, 从而$|E(G(v))|$之期望小于3, 即存在$u$使得$|E(G(u))|\le 2$. 记$G^*(v)$为$\{v\}\cup N(v)$的导出子图, H为$V(G)\setminus(\{v\}\cup N(v))$的导出子图, 则$G^*(v)$与$H$间连边数量为8.

   同时, 为避免导出子图的最小特征值小于-2, $G(u)$中包含了两条互不相交之边, 进而H中不存在一点u使得$|N(u)\cap V(G^*)|=3$. 综上, $H\cong C_4$. 现已确定$\{v\}$与$G(v)$的四条连边, $G^*(v)$与H的八条连边, H中四条边, 剩下两条边只能添加至$G(v)$内. 列举得所有可能值为$L(\overline{C_6})$与$L(K_{3,3})$, 验证之即为$L(\overline{C_6})$.

2. H_8是度数为3的正则图, 其通过向两个由四个点与五条边构成的图形间添加两条边所得. 则$L(H_8)$由谱唯一确定, 其中$L(H_8)$之谱为

   $$(4,1+\sqrt{5},2,0^4,1-\sqrt{5},(-2)^4).$$

   证明: 设G由某一谱为$(4,1+\sqrt{5},2,0^4,1-\sqrt{5},(-2)^4)$的图. 同样由$n\lambda_1=\sum\lambda_i^2$知$G$正则, 其边数为24. 任取$u\in V(G)$,

最小特征值为-2的图

以下将通过一系列例子探究$\lambda_{\min}=-2$且能由谱唯一确定的图.

1. 当$n\neq 8$时, $L(K_8)$能由谱唯一确定, 其中谱为$(2n-4,(n-4)^{(n-1)},(-2)^{n(n-3)/2})$.

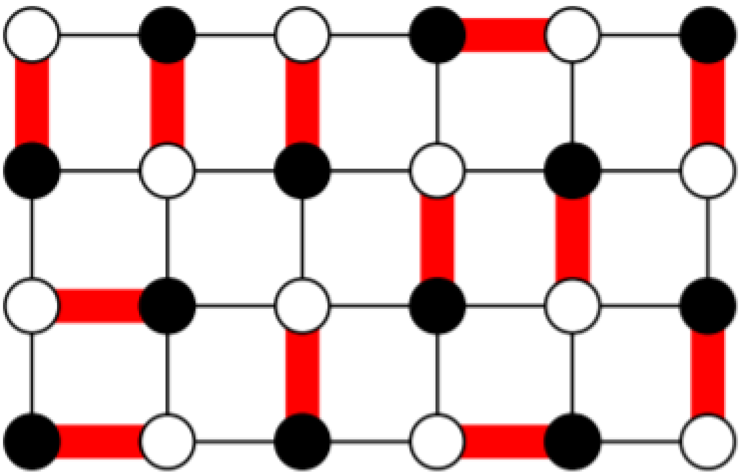
   证明: 注意到$L(K_8)$为强正则图, 故可参考第三期文章, 此处从略. $n=8$之特例为Chang图.

2. $n \neq 4$时, $L(K_{n,n})$能由谱唯一确定, 其中谱为

二聚体覆盖问题

背景

二聚体覆盖问题(dimer coloring)具有较强的物理学背景, 其旨在探索了晶体上二聚微粒覆盖的平均熵. 问题叙述简单: 给定$m \times n$的网格图$G(|V(G)| = mn, |E(G)| = (m+1)(n+1))$, 现于图上选取互不相邻的若干条边使之覆盖$V(G)$, 试问取法几何?



例如上图为一种可行之取法.

Kasteleyn定向

不妨设$\pi(e)$为边权重函数, $\mathcal{C}$为一组覆盖. 定义图G的Boltzmann权重为

$$\pi(\mathcal{C}) := \prod_{e \in \mathcal{C}} \pi(e).$$

关于所有覆盖累加之, 得分划函数

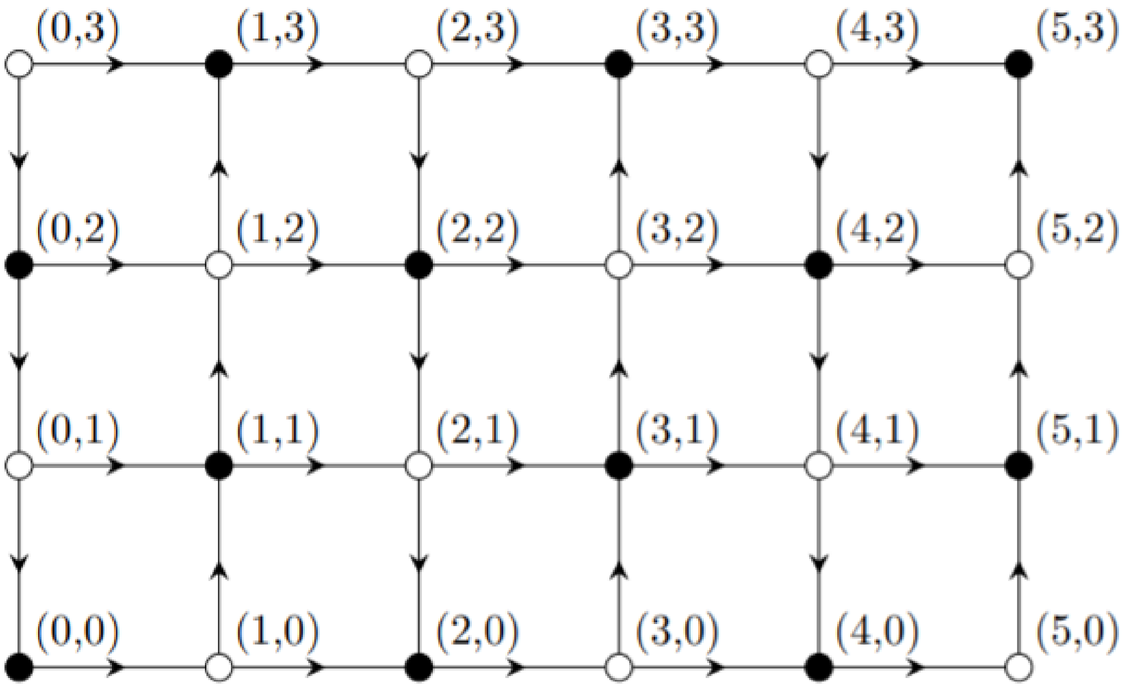
$$Z_G := \sum_{\mathcal{C}} \pi(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}} \prod_{e \in \mathcal{C}} \pi(e).$$

倘若存在某种权重使得$\prod_{e \in \mathcal{C}} \pi(e)$于覆盖合理之时恒为某一非零值, 岂不美哉? 为构造之, 不妨设$(w_1, \ldots, w_n)$为全体白顶点, $(b_1, \ldots, b_n)$为全体黑顶点作Kasteleyn矩阵$K_{N \times N}$, 其中

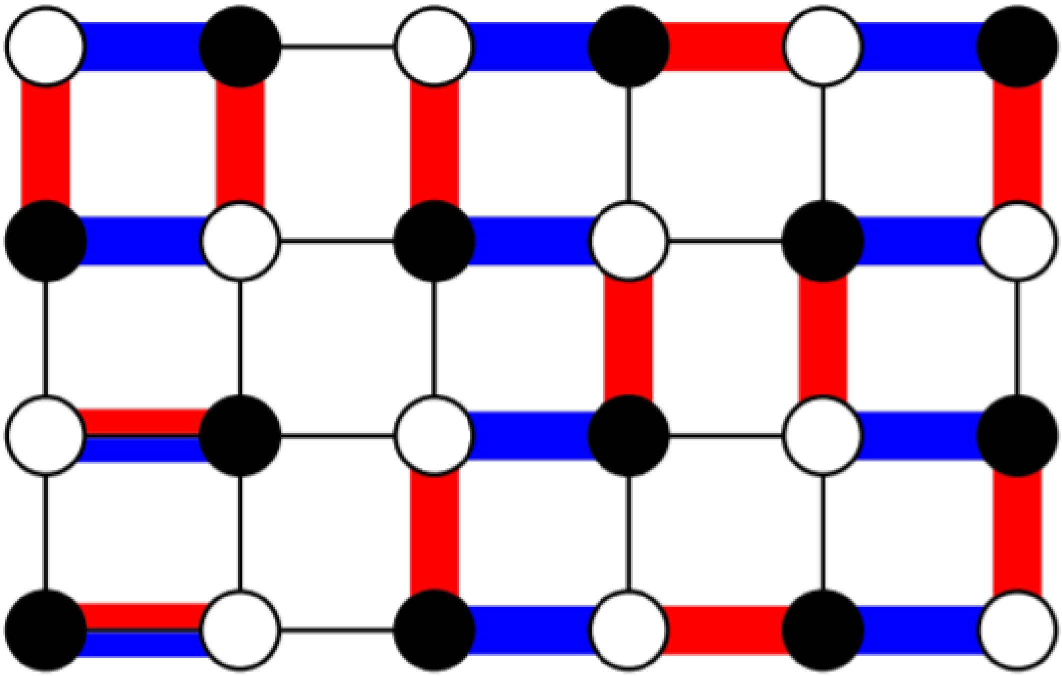
$$K_{ij} = \begin{cases} +\pi(w_i, b_j) & w_i \to b_j \\ -\pi(w_i, b_j) & w_i \leftarrow b_j \\ 0 & else. \end{cases}$$

计算$\det K = \sum_\sigma \operatorname{sgn}(\sigma)(\prod_i K_{i,\sigma(i)})$. σ有效若且仅若诸w_i均与$b_{\sigma(i)}$相邻, 亦即$\{(w_i, b_{\sigma(i)}) : i \in \{1, \ldots, n\}\}$为二聚体覆盖. 自然地, 能否给出一种权重使得一切$\operatorname{sgn}(\sigma)$同号? 此时$Z_G = |\det K|$.

以下给出Kasteleyn定向:



如下图, 任取红, 蓝两种覆盖, 分别记作$\mathcal{C}$与$\mathcal{C}'$.



由于红圈与蓝圈共同组成若干长度为偶数的闭合圈之无交并, $\mathcal{C}$所对应的置换σ与$\mathcal{C}'$所对应者σ仅相差一个置换. 若使用Kasteleyn定向, 则任意覆盖$\mathcal{C}\dot{\cup}\mathcal{C}'$中, 一切长为$2l$的圈中满足$b \to w$的边数量为$l+1$. 从而

$$\frac{\operatorname{sgn}(\sigma)}{\operatorname{sgn}(\sigma')} = (-1)^{\sum(l_i+1)+\sum(l_i+1)} = 1.$$

其中$2l_i$为每个圈的长度. 其中, 前一项$\sum(l_i+1)$为转换置换

$$\prod_i \begin{pmatrix} 1\cdots l_{i-1} & l_i \\ 2\cdots l_i & 1 \end{pmatrix}$$

奇偶转化次数, 后一项$\sum(l_i+1)$为一切$b\to w$之数量导致的奇偶改变次数. 合并你考虑之, σ与σ'同号, 从而在Kasteleyn定向下有$Z_G=|\det K|$.

$\det K$的计算

不妨设网格图G大小为$m\times n$, 其中m为偶数, 构造Kasteleyn定向(参照上一小节). 记对任意竖直边$e_\perp$, $\pi(e_\perp)=z_1$; 对任意水平边$e_\parallel$, $\pi(e_\parallel)=z_2$. 从而

$$K_{(x,y),(x'y')}=z_1(\delta_{x+1}^{x'}-\delta_{x-1}^{x'})\delta_y^{y'}+z_2(-1)^x(\delta_{y+1}^{y'}-\delta_{y-1}^{y'})\delta_x^{x'}$$

其中$\delta_x^y=1-\operatorname{sgn}(|x-y|)$. 记$Q_{xx'}=(-1)^x(\delta_{x+1}^{x'}-\delta_{x-1}^{x'})$, $R_{yy'}=(\delta_{y+1}^{y'}-\delta_{y-1}^{y'})$, 从而

$$K_{(x,y),(x',y')}=(-1)^{-x}(z_1Q_{xx'}\delta_{yy'}+z_2R_{yy'}\delta_{xx'}).$$

记所有$K_{(m,n),(m',n')}$构成(mn)阶方阵$\tilde{K}$(作为比较, $2\dim K=\dim K'$). 从而

$$|\det\tilde{K}|=|\sum_\sigma\operatorname{sgn}(\sigma)\prod_{(x,y)\in V}K_{(x,y),\sigma(x,y)}|=[\sum_\sigma\prod_i K_{i,\sigma(i)}]^2=(\det K)^2$$

实际上, $\det K$即$\tilde{K}$之Pfaffian.

注意到

$$\tilde{K}=(S\otimes\mathbf{1}_n)(z_1Q\otimes\mathbf{1}_n+z_2\mathbf{1}_m\otimes R).$$

其中$S_{xx'}=(-1)^x$. 设向量$u_t=(t,t^2,t^3,\ldots,t^n)$, 注意到

$$Ru_t=(t^{-1}-t)u_t+(-1,0,\ldots,0,t^{n+1}).$$

从而

$$R(u_t-u_{-1/t})=(t^{-1}-t)(u_t-u_{-1/t})+(0,\ldots,0,t^{n+1}-(-t)^{-n-1}).$$

当$t=-ie^{ik\pi/(n+1)}$时, $(u_t-u_{-1/t})$为对应特征向量, 对应特征值$\lambda_p(R)=2i\cos\dfrac{\pi p}{n+1}$. 同理设$v_t=(t,it^2,t^3,it^4,\ldots,it^m)$可求得$\lambda_q(Q)=2\cos\dfrac{\pi k}{m+1}$. 注意到$z_1Q\otimes\mathbf{1}_n+z_2\mathbf{1}_m\otimes R$的特征向量为$R$, Q特征向量之张量积, 从而

$$\begin{aligned}|\det\tilde{K}|&=\prod_{p=1}^n\prod_{q=1}^m|z_1\lambda_q(Q)+z_2\lambda_p(R)|\\&=\prod_{p=1}^n\prod_{q=1}^{m/2}|(z_1\lambda_q(Q))^2-(z_2\lambda_p(R))^2|\\&=2^{mn}\prod_{p=1}^n\prod_{q=1}^{m/2}|(z_1\cos\frac{\pi q}{m+1})^2+(z_2\cos\frac{\pi p}{n+1})^2|\end{aligned}.$$

因此,

$$Z_{mn}(z_1,z_2)=2^{mn/2}\prod_{p=1}^n\prod_{q=1}^{m/2}\sqrt{(z_1\cos\frac{\pi q}{m+1})^2+(z_2\cos\frac{\pi p}{n+1})^2}$$

例如使用2×1木块覆盖国际象棋棋盘之种数为12988816种.

平均覆盖类数之极限

我们自然关心$Z_{mn}(z_1,z_2)$与mn的关系. 据物理学背景, 平均自由能

$$f(z_1,z_2):=-\min_{m,n\to\infty}\frac{1}{mn}\log Z_{mn}(z_1,z_2)$$

应为某一常数. 据二重黎曼积分之定义,

$$\begin{aligned}
f(z_1,z_2) &= -\lim_{m,n\to\infty}\frac{\log 2^{mn/2}}{mn}\log\prod_{p=1}^{n}\prod_{q=1}^{m/2}\sqrt{(z_1\cos\frac{\pi q}{m+1})^2+(z_2\cos\frac{\pi p}{n+1})^2} \\
&= -\frac{1}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta\int_0^{\pi/2}\log[4(z_1^2\cos^2\theta+z_2^2\cos^2\phi)]\mathrm{d}\phi \\
&= -\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta\left[\frac{1}{2}\log^2(2z_2\cos\theta)+\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\log\left(1+\frac{\cos^2\phi}{(\frac{z_2}{z_1})^2\cos^2\theta}\right)\mathrm{d}\phi\right] \\
&= -\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta\left[\log(2z_2\cos\theta)+\log\frac{1+\sqrt{1+\frac{z_1^2}{z_2^2\cos^2\theta}}}{2}\right] \\
&= -\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\theta(\log z_1+\log(\frac{z_2}{z_1}\cos\theta+\sqrt{1+(\frac{z_2}{z_1})^2\cos^2\theta}) \\
&= -\frac{1}{2}\log z_1-\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}g(\frac{z_2}{z_1}\cos\theta)\mathrm{d}\theta
\end{aligned}$$

其中

$$g(x)=\log(x+\sqrt{1+x^2})=\sum_{j=0}^{\infty}\binom{2j}{j}\frac{(-1)^j}{(2j+1)2^{2j}}x^{2j+1}.$$

故

$$\begin{aligned}
\int_0^{\pi/2}g(\cos\theta)\mathrm{d}\theta &= \sum_{j=0}^{\infty}\int_0^{\pi/2}\binom{2j}{j}\frac{(-1)^j(z_2/z_1)^{2j+1}}{(2j+1)2^{2j}}\cos^{2j+1}\theta\mathrm{d}\theta \\
&= \sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-1)^j}{(2j+1)^2}(z_2/z_1)^{2j+1} \\
&= \int_0^{z_1/z_1}\frac{\arctan t}{t}\mathrm{d}t \\
&= \frac{1}{2i}(\mathrm{Li}_2(iz_1/z_2)-\mathrm{Li}_2(-iz_1/z_2))
\end{aligned}$$

特殊地, 令$z_1=z_2=1$, 则

$$f(1,1)=-\frac{1}{\pi}\int_0^1\frac{\arctan t}{t}-\mathrm{d}t=\frac{G}{\pi}$$

其中G为Catalan常数.