图谱论导引(第二期)

β量之引入

本章主讲图的运算与构造. 承接上一章节的习题解答部分, 我们从谱分解定理

$$A=\sum_{i=1}^{r}Q^T\Lambda Q=\sum_{i=1}^{r}\mu_iP_i$$

引出图之角矩阵(angle matrix), 其中$\alpha_{ij}=P_ie_j$, $Q=(e_1,\dots,e_n)$. 鉴于式子

$$N_k=\sum_{i=1}^{r}\mu_i^k\|P_i\mathbf{1}\|^2$$

包含$\|P_i\mathbf{1}\|$一类值得研究的量, 我们记$\beta_i=\|P_i\mathbf{1}\|/\sqrt{n}$, 从而有归一化式子

$$\sum_{i=1}^{r}\beta_i^2=\frac{\mathbf{1}^T(\sum_{i=1}^{r}P_i)\mathbf{1}}{n}=\frac{\mathbf{1}^T\mathbf{1}}{n}=1.$$

兹暂对β量搁置不议, 将以有为. 且看本章笔记正文.

图的运算

常见之运算包括取补(complement), 无交并(disjoint union), 连接(join)等.

取补即使将图中所有点对间的连边关系反转, 即转换一切$i\sim j$至$i\nsim j$, 同时将一切$i\nsim j$转化至$i\sim j$. 我们记G之补图为$\overline{G}$, 易知$A(G)+A(\overline{G})+I_{|V(G)|}$为全1矩阵.

一簇图$\{G_k\}$的无交并即是字面意思, 即视不交的一簇图为整体, 记作$G_1\dot\cup G_2\dot\cup\cdots\dot\cup G_n=\dot\cup_{i=1}^{n}G_i$. 举例而言, 完全二部图$K_{m,n}$之补图为$K_m$与$K_n$的无交并.

两图(G_1与G_2)的连接定义为在$G_1\dot\cup G_2$中连接一切$(v_1,v_2)\in V(G_1)\times V(G_2)$形成的图, 记作$G_1\bigtriangledown G_2$. 例如$K_3\bigtriangledown K_3=K_6$.

值得一提的是, $\overline{G_1\bigtriangledown G_2}=\overline{G_1}\dot\cup\overline{G_2}$. 同样地, $\overline{G_1\dot\cup G_2}=\overline{G_1}\bigtriangledown\overline{G_2}$. 若记所有简单图之集合为$\mathcal{G}$, 容易验证$(\mathcal{G},\dot\cup)$与$(\mathcal{G},\bigtriangledown)$均为半群, 易验证结合律.

插曲: Ramsey数

Ramsey数是图论的重要函数之一, 它是一个以两个正整数作为变量的函数. 在组合数学上, Ramsey定理是要解决以下的问题: 要找这样一个最小的数n, 使得n个人中必定有k个人相识或l个人互不相识. 这个数记作$R(k,l)$.

已知的Ramsey数甚少, Paul Erdős曾以一个故事来描述寻找拉姆齐数的难度: "想像有队外星人军队在地球降落, 要求取得$R(5,5)$的值, 否则便会毁灭地球. 在此情况下, 我们应该集结所有算力与数学家去尝试寻找这一数值. 若它们要求的是$R(6,6)$的值, 我们要尝试毁灭这班外星人了."

对于$R(3,3)$这般简单情形, 还是可以用枚举之外的方式得出. 倘若以奥数观点视之, 下文诚然舍近求远, 但并非乏善可陈. 自然的建模是将人视作点, 相识则以连边表示, 反之不连边. 此模型下, "两两认识的三个人"对应图G中的三角型(K_3), "两两陌生的三个人"对应补图$\overline{G}$中的三角形. 求$n=R(3,3)$即是找到正整数n, 使得所有n顶点的图与其补图的无交并一定包含一个K_3.

应先说明$R(3,3)\neq 5$, 考察C_5即可($\overline{C_5}=C+5$). 对任意六个顶点的图G, G中起始点与终点相同的长为3的walks总数为$\mathrm{trace}(A(G)^3)$, 从而G中三角形数量为$\dfrac{\mathrm{trace}(A(G)^3)}{6}$. 同理, $\overline{G}$中三角形之数量为$\dfrac{\mathrm{trace}([J-I-A(G)]^3)}{6}$, 其中$J:=\mathbf{1}_{|V|\times|V|}$. 下仅需证明
$\mathrm{trace}(A^3)+\mathrm{trace}((J-I-A)^3)>0$即可.

注意到

$$\begin{aligned}\mathrm{trace}(A^3)+\mathrm{trace}((J-I-A)^3)=&\mathrm{trace}((J-I)^3-3(J-I)A(J-I-A))\\=&n(n-1)(n-2)-3\mathrm{trace}(JA(J-I-A))\\&+3\mathrm{trace}(A(J-I-A))\\=&n(n-1)(n-2)-3\sum_i(1^{(j)})(n-1-\mathbf{1}^{(j)})\end{aligned}.$$

这里$1^{(j)}$表示第j行/列数字1的数量。对每个二次式取极值得:

$$\mathrm{trace}(A^3)+\mathrm{trace}((J-I-A)^3)\geq\begin{cases}2k(k-1)(k-2), & n=2k,\\(2k+1)k(k-2), & n=2k+1.\end{cases}$$

当$k\geq 6$时, $\mathrm{trace}(A^3)+\mathrm{trace}((J-I-A)^3)>0$. 因此$R(3,3)=6$.

特征多项式

与线性代数无异, 图G的邻接矩阵特征多项式为$\det(xI-A(G))$. 在无歧义的情形下也可直接称之特征多项式, 记作$P_G(x):=\det(xI-A(G))$.

对无交并运算, $A(G_1\dot\cup G_2)=\begin{pmatrix}A(G_1) & O\\ O & A(G_2)\end{pmatrix}$, 从而$P_{G_1\dot\cup G_2}(x)=P_{G_1}(x)P_{G_2}(x)$.

对取补图运算(不妨设$|V(G)|=n$), 有

$$\begin{aligned}P_{\overline{G}}(x)=&\det(xI-J+I+A)\\=&\det((x+1)I+A)-\mathbf{1}^T\mathrm{adj}((x+1)I+A)\mathbf{1}\\=&(-1)^nP_G(-x-1)(1-\mathbf{1}^T((x+1)I+A)^{-1}\mathbf{1})\\=&(-1)^nP_G(-x-1)\left(1-n\sum_{i=1}^r\frac{\beta_i^2}{x+1+\lambda_i}\right)\end{aligned}$$

同理, 对$\{G_i\}$, 记$n_i=|V(G_i)|$, 则

$$P_{\overline{\dot\cup_{i=1}^m G_i}}(x)=(-1)^{\sum_{i=1}^n n_i}P_{\dot\cup_{i=1}^m G_i}(-x-1)\left(1-\sum_{i=1}^m\sum_{j=1}^{r_i}\frac{n_i(\beta_j^{(i)})^2}{x+1+\lambda_j}\right)$$

此处特征值之选取取决于谱分解

$$\begin{pmatrix}A & O\\ O & B\end{pmatrix}=\sum_{i=1}^s\lambda_i\begin{pmatrix}P_i^{(1)} & O\\ O & P_i^{(1)}\end{pmatrix}.$$

对$G_1\dot\cup G_2$的$\beta_i^{(0)}$而言, $(n_1+n_2)(\beta_i^{(0)})^2=n_1(\beta_i^{(1)})^2+n_2(\beta_i^{(2)})^2$. 从而

$$
\begin{aligned}
P_{\overline{G_1\dot\cup G_2}}(x) =&(-1)^{n_1+n_2}P_{G_1\dot\cup G_2}(-x-1)\left(1-n_1\sum_{i=1}^{s}\frac{(\beta_i^{(1)})^2}{x+1+\lambda_i}-n_2\sum_{i=1}^{s}\frac{(\beta_i^{(1)})^2}{x+1+\lambda_i}\right)\\
=&-(-1)^{n_1+n_2}P_{G_1\dot\cup G_2}(-x-1)\\
&+(-1)^{n_1+n_2}P_{G_1\dot\cup G_2}(-x-1)\left(1-n_1\sum_{i=1}^{s}\frac{(\beta_i^{(1)})^2}{x+1+\lambda_i}\right)\\
&+(-1)^{n_1+n_2}P_{G_1\dot\cup G_2}(-x-1)\left(1-n_2\sum_{i=1}^{s}\frac{(\beta_i^{(2)})^2}{x+1+\lambda_i}\right)\\
=&(-1)^{n_2}P_{\overline{G_1}}(x)P_{G_2}(-x-1)+(-1)^{n_1}P_{\overline{G_2}}(x)P_{G_1}(-x-1)\\
&-(-1)^{n_1+n_2}P_{G_1\dot\cup G_2}(-x-1)
\end{aligned}.
$$

因此

$$
\begin{aligned}
&P_{G_1\triangledown G_2}(x)+(-1)^{n_1+n_2}P_{G_1\dot\cup G_2}(-x-1)\\
=&(-1)^{n_2}P_{\overline{G_1}}(x)P_{G_2}(-x-1)+(-1)^{n_1}P_{\overline{G_2}}(x)P_{G_1}(-x-1)
\end{aligned}.
$$

从而有推论

$$
P_{G_1\triangledown G_2}(x)=P_{G_1}(x)P_{G_2}(x)\left(1-n_1n_2\sum_{i=1}^{r_1}\sum_{j=1}^{r_2}\frac{(\beta_i^{(1)}\beta_j^{(2)})^2}{(x-\lambda_i^{(1)})(x-\lambda_j^{(2)})}\right).
$$

正则图的特征多项式

设G, G_1, G_2分别为以(n,k), (n_1,k_1), (n_2,k_2)为系数的正则图.

首先应注意到G与$\overline{G}$有相同之特征向量.G的主特征值k对应$\overline{G}$的主特征值$n-1-k$. G的非主特征向量x满足$Ax=\lambda x$与$x^T\mathbf{1}_n=0$, 从而

$$
(J-I-A)x=Jx-(1+k)x=-(1+k)x.
$$

不难依特征值写出

$$
P_{\overline{G}}(x)=(-1)^nP_G(-x-1)\frac{x-n+k+1}{x+k+1}.
$$

进而有

$$
\begin{aligned}
&P_{G_1\triangledown G_2}(x)\\
=&(-1)^{n_2}P_{\overline{G_1}}(x)P_{G_2}(-x-1)+(-1)^{n_1}P_{\overline{G_2}}(x)P_{G_1}(-x-1)-(-1)^{n_1+n_2}P_{G_1}(-x-1)\\
=&\frac{P_{G_1}(x)P_{G_2}(x)}{(x-k_1)(x-k_2)}[(x-k_1)(x-k_2)-n_1n_2]\\
=&P_{G_1}(x)P_{G_2}(x)\left(1-\frac{n_1n_2}{(x-k_1)(x-k_2)}\right)
\end{aligned}.
$$

从而可导出结论

$$
\sum_{i=1}^{r_1}\sum_{j=1}^{r_2}\frac{(\beta_i^{(1)}\beta_j^{(2)})^2}{(x-\lambda_i^{(1)})(x-\lambda_j^{(2)})}=\frac{1}{(x-k_1)(x-k_2)}.
$$

例如, 棱锥$K_1\dot\cup C_n$的特征多项式为

$$\begin{aligned} xP_{C_n}(x)\left(1-\frac{n}{x(x-2)}\right) &= (x^2-2x-n)\prod_{s=1}^{n-1}(x-2\cos(2\pi s/n)) \\ &= \frac{x^n-2^n}{x-2}(x^2-2x-n) \end{aligned}.$$

倘若$n_1-k_1=n_2-k_2$, 则$G_1 \bigtriangledown G_2$仍为正则图. 对一切满足$n_i-k_i\equiv C$的图序列$\{G_i\}$而言, 记$k=\sum_i k_i, n=\sum_i n_i$, 归纳可得

$$P_G(x)=(x-k)(x+n-k)^{k-1}\prod_i \frac{P_{G_i}(x)}{x-k_i}.$$

路生成函数

类似数理统计中母函数之定义, 路生成函数(walk generating function)定义为

$$H_G(t)=\sum_{t=1}^{\infty}N_k t^k=n\sum_{i=1}^{r}\frac{\beta_i^2}{1-t\lambda_i}.$$

比较前文中$P_{\overline{G}}(x)$之表达式

$$P_{\overline{G}}(x)=(-1)^nP_G(-1-x)\left(1-\frac{H_G\left(-\dfrac{1}{x+1}\right)}{1+x}\right).$$

从而

$$H_G(1/t)=t\left((-1)^n\frac{P_{\overline{G}}(-1-t)}{P_G(t)}-1\right).$$

此外, 有下列结论

1. $H_{\overline{G}}(t)=\dfrac{H_G(-t/(1+t))}{1+t-tH_G(-t/(1+t))}$.
2. $H_{G_1\dot\cup G_2}(t)=H_{G_1}(t)+H_{G_2}(t)$.
3. $H_{G_1\bigtriangledown G_2}=\dfrac{H_{G_1}(t)+H_{G_2}(t)+2tH_{G_1}(t)H_{G_2}(t)}{1-t^2H_{G_1}(t)H_{G_2}(t)}$.

图之聚合

试回忆前文归纳证明P_n谱之方法. 试问, 若在G的某一点j上增添一条边(另一端点不在$V(G)$中), 新图G_j之特征多项式如何变化?

设$A=A(G)$, $u=(0,1,0,\ldots,0)$. 考虑$\begin{pmatrix}0 & u^T\\ u & A\end{pmatrix}$之特征多项式, 有

$$P_{G_j}(x)=xP_G(x)-P_{G-j}(x).$$

特殊地, 在P_{n+1}的一端添上一条边, 则$P_{P_{n+2}}(x)=xP_{P_{n+1}}(x)-P_{P_n}(x)$.

定义树(tree)为无圈的连通的简单图. 易知树的特征多项式总能通过迭代P_1与P_2之特征多项式计算.

下引入图的指标(index, pl. indices), 即最大特征值λ_1. 据Rayleigh商定义, $\lambda_1=\max\dfrac{v^TAv}{v^Tv}=\max_{\|v\|=1}v^TAv$. 由于$G$由$G_j$删去一点得到, 故可不妨设$A(G)=A$, $A(G_j)=\begin{pmatrix}A & u\\ u^T & 0\end{pmatrix}$. 对任$\mathbb{R}^{|V(G_j)|}=\mathbb{R}^{|V(G)|}\times\mathbb{R}$中单位向量$y=(x,c)$总有

$$\lambda_1(G_j) \geq y^T A(G_j) y \geq x^T A x.$$

取x为$\lambda_1(G)$对应的特征向量, 则$\lambda(G) < \lambda(G_j)$.

记G_j^n为在G上j处添加P_n所得的图, $\lambda_1^{(n)}$为相应的最大特征值. 从而得单调递增的序列$\{\lambda_1^{(n)}\}_{n\geq 0}$. 注意到$\lambda_1 = \max_{\|v\|=1} v^T A v \leq \|v\|^2 \|A\|_\infty = \Delta(G)$, 这里$\Delta(G)$为$\max_{v\in V(G)} \deg(v)$. 而$\Delta(G_j^n) = \Delta(G) + 1$, 故序列$\{\lambda_1^{(n)}\}$存在上确界. 下将求得该上确界.

类比$\Delta(G)$之定义, 可作$\delta(G) := \min_{v\in V(G)} \deg(v)$. 同理有结论$\delta(G) \leq \lambda_1 \leq \Delta(G)$. 从而$\{\lambda_1^{(n)}\}$在某一项后不小于2. 记

$$\begin{aligned} f_0(x) &= P_G(x) \\ f_1(x) &= xP_G(x) - P_{G-j}(x) \\ f_{n+2}(x) &= xf_{n+1}(x) - f_n(x), \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned}.$$

由$\begin{pmatrix} x & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} : (f_{n+1}, f_n) \mapsto (f_{n+2}, f_{n+1})$与

$$\begin{pmatrix} x & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sim \operatorname{diag}\left(\frac{x-\sqrt{x^2-4}}{2}, \frac{x+\sqrt{x^2-4}}{2}\right) := \operatorname{diag}(a(x), b(x))$$

可知

$$\begin{aligned} (a-b)(x) f_n(x) =& [a(x)P_G(x) - P_{G-j}(x)]a(x)^n \\ &- [b(x)P_G(x) - P_{G-j}(x)]b(x)^n \end{aligned}$$

其中$b(x) \to 0$. 因此$\lim_{n\to\infty} \lambda_1^{(n)}$之极限为

$$\frac{x+\sqrt{x^2-4}}{2} P_G(x) = P_{G-j}(x)$$

之最大(正实)根.