Введение в дискретную математику и математическую логику

Лекция №3
Матрицы смежности и структурные свойства графов

Апанович Зинаида Владимировна

Матрица смежности

Пусть G — граф с множеством вершин $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$.

Матрица смежности **A** графа G, относительно этого порядка вершин, – это матрица размера $n \times n$

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \{v_i, v_j\} \text{ является ребром графа } G \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases}$$

Если граф G неориентированный, то матрица **A** является симметричной, то есть $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$.
По определению, индексы ненулевых элементов i-й строки матрицы **A** соответствуют соседям вершины v_i .

Аналогично, ненулевые индексы i-го столбца матрицы **A** соответствуют соседям вершины v_i .

Матрица смежности

Матрицу смежности графа можно использовать для получения структурных свойств графа.

В частности, собственные значения и собственные векторы матрицы смежности можно использовать для вывода таких свойств, как двудольность, степень связности и многих других.

Поэтому такой подход к теории графов называется спектральной теорией графов .

Некоторые обозначения

Будем обозначать единичную матрицу как **I**, а матрицу, все элементы которой равны **1,** будем обозначать как **J.**

Например, единичная матрица 3 × 3 и матрица 4 × 4, состоящая из всех единиц, имеют вид как показано ниже

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Транспонирование матрицы **M** будем обозначать как $\mathbf{M}^T$.

Напомним, что матрица **M** симметрична, если $\mathbf{M}^T = \mathbf{M}$.

(*i*, *j*) элемент матрицы **M** будет обозначаться как $\mathbf{M}(i, j)$.

Вектор степеней **Ae**

Отсюда следует, что степень вершины v_i равна сумме элементов в *i*-й строке (или *i-ом* столбце) матрицы **A**, то есть ,

$$\deg(v_i) = \sum_{j=1}^{n} \mathbf{A}(i,j) = \sum_{j=1}^{n} \mathbf{A}(j,i).$$

Если обозначить вектор-столбец, состоящий из всех 1, через
e = (1, 1, .., 1), то

$$\mathbf{Ae} = \begin{bmatrix} \deg(v_1) \\ \deg(v_2) \\ \dots \\ \deg(v_3) \end{bmatrix}$$

Мы будем называть **Ae** вектором степеней графа *G*.
Заметим, что после возможной перестановки вершин, **Ae** равен степенной последовательности графа *G*.

Подсчет количества путей в графе

Одним из первых приложений матрицы смежности графа G является подсчет количества путей в графе G.

Наличие замкнутого пути длины 3 в графе G подразумевает, что G содержит полный граф $K_3 = C_3$ в качестве подграфа.

По очевидным причинам K_3 называется треугольником .

Подсчет количества путей в графе

Теорема 1: Для любого графа G с множеством вершин

$V = \{ v_1, v_2, . . . , v_n \}$,

элемент (i , j) матрицы $\mathbf{A}^k$ представляет собой количество путей из вершины v_i *в* вершину v_j длины k .

Доказательство. Доказательство проводится индукцией по k .

Для $k = 1$, $\mathbf{A}(i , j) = 1$ означает, что вершины v_i и v_j являются смежными, и значит, существует путь длины $k = 1$ из вершины v_i в вершину v_j .

С другой стороны, если $\mathbf{A}(i , j) = 0$, то вершины v_i и v_j не являются смежными, и тогда очевидно, что не существует пути длины $k = 1$ из вершины v_i в вершину v_j .

Подсчет количества путей в графе

Теперь предположим, что утверждение верно для некоторого $k \geq 1$, и рассмотрим количество путей длины $k + 1$ из вершины v_i в вершину v_j.

Любой путь длины $k + 1$ из v_i в v_j содержит путь длины k из v_i в некоторого соседа вершины v_j.

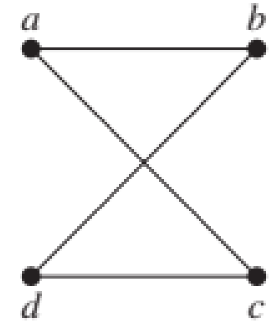
Если вершина $v_p \in N(v_j)$, то по индукции количество путей длины k из v_i в v_p равно $\mathbf{A}^k(i, p)$.

Следовательно, общее число путей длины $k + 1$ из v_i в v_j равно

$$\sum_{v_p \in N(v_j)} \mathbf{A}^k(i,p) = \sum_{\ell=1}^{n} \mathbf{A}^k(i,\ell)\mathbf{A}(\ell,j) = \mathbf{A}^{k+1}(i,j).$$

ПРИМЕР 1

Сколько путей длины 4 существует из вершины *a* в вершину *d* в простом графе G, показанном на рисунке ниже?



Решение: Матрица смежности графа G (вершины упорядочены как *a*, *b*, *c*, *d*) имеет вид

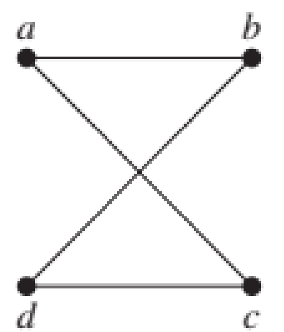
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

ПРИМЕР 1

Следовательно, количество путей длины 4 из *a* в *d* равно элементу (1, 4) матрицы A^4.

Поскольку $A^4(1, 4) = 8$, существует ровно 8 путей длины 4 из *a* в *d*. Рассматривая граф, можно видеть, что *a, b, a, b, d* ; *a, b, a, c, d* ; *a, b, d, b, d* ; *a, b, d, c, d* ; *a, c, a, b, d* ; *a, c, d, b, d* ; и *a, c, d, c, d* — это все 8 путей длины 4 из *a* в *d* .

$$\mathbf{A}^4 = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 8 \\ 0 & 8 & 8 & 0 \\ 0 & 8 & 8 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix},$$



След матрицы **M**

След (trace) матрицы **M** представляет собой сумму ее диагональных элементов и будет обозначаться как *tr*(**M**):

$$\mathrm{tr}(\mathbf{M}) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{M}(i,i).$$

Поскольку все диагональные элементы матрицы смежности **A** равны нулю, то *tr*(**A**) = 0.

След матрицы **M**

Следствие 2 Пусть *G* — граф с матрицей смежности **A,**

m - количество ребер в графе *G*,

t - количество треугольников в *G* ,

q - количество циклов длины 4 в *G*.

Тогда верны следующие

Равенства :

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}^2) = 2m$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}^3) = 6t$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}^4) = 8q - 2m + 2\sum_{i=1}^{n} \deg(v_i)^2$$

След матрицы **M**

Доказательство.

1. $\mathrm{tr}(\mathbf{A}^2) = 2m$.

Элемент $\mathbf{A}^2(i, i)$ представляет собой количество замкнутых путей из v_i в v_i длины $k = 2$.

Замкнутый путь длины $k = 2$ имеет 1 ребро. Следовательно,

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}^2) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{A}^2(i, i) = \sum_{i=1}^{n} \deg(v_i) = 2m.$$

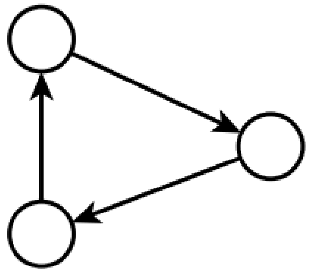
След матрицы **M**

2. $\mathrm{tr}(\mathbf{A}^3) = 6t$.

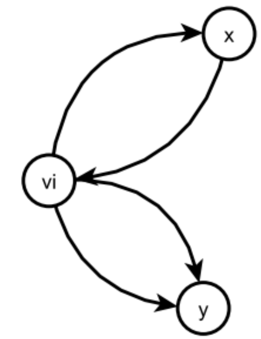
Чтобы доказать второе утверждение, начнем с того, что замкнутый путь можно пройти двумя различными способами .
Следовательно, для каждой вершины *v* в треугольнике существует 2 пути длины $k = 3$, которые начинаются в *v* и обходят треугольник.
Поскольку каждый треугольник содержит 3 различные вершины, на каждый треугольник в графе приходится 6 путей длины $k = 3$.

Так как $\sum_{i=1}^{n} \mathbf{A}^3(i,i)$ подсчитывает все пути в G длины 3, то имеем

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A}^3) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{A}^3(i,i) = 6t.$$



3. Теперь рассмотрим $\operatorname{tr}(\mathbf{A}^4) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{A}^4(i,i).$



Подсчитываем количество замкнутых путей длины $k = 4$ из v_i.

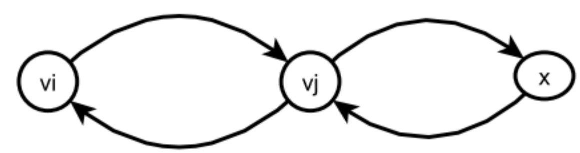
Существует 3 типа таких путей:

(a) замкнутые пути вида (v_i, x, v_i, y, v_i), где $x, y \in N(v_i)$.

Количество таких путей равно $\deg(v_i)^2$, поскольку у нас есть $\deg(v_i)$ вариантов для x и $\deg(v_i)$ вариантов для y;

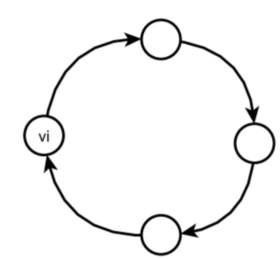
(b) замкнутые пути вида (v_i, v_j, x, v_j, v_i), где $v_j \in N(v_i)$ и $x \in N(v_j) \setminus \{v_i\}$, количество таких путей равно

$$\sum_{v_j \sim v_i} (\deg(v_j) - 1)$$



(c) замкнутые пути вдоль 4-циклов из v_i, существует 2 таких пути для каждого цикла, содержащего вершину v_i скажем, q_i. Следовательно,

$$\mathbf{A}^4(i,i) = 2q_i + \deg(v_i)^2 + \sum_{v_j \sim v_i} (\deg(v_j) - 1)$$



След матрицы **M**

$$
\begin{aligned}
\operatorname{tr}(\mathbf{A}^4) &= \sum_{i=1}^{n} \left(2q_i + \deg(v_i)^2 + \sum_{v_j \sim v_i} (\deg(v_j) - 1) \right) \\
&= 8q + \sum_{i=1}^{n} \left(\deg(v_i)^2 - \deg(v_i) + \sum_{v_j \sim v_i} \deg(v_j) \right) \\
&= 8q - 2m + \sum_{i=1}^{n} \deg(v_i)^2 + \sum_{i=1}^{n} \sum_{v_j \sim v_i} \deg(v_j) \\
&= 8q - 2m + \sum_{i=1}^{n} \deg(v_i)^2 + \sum_{i=1}^{n} \deg(v_i)^2 \\
&= 8q - 2m + 2\sum_{i=1}^{n} \deg(v_i)^2
\end{aligned}
$$

$\square$

Матрицы смежности и связность графа

Следствие 3. Граф G с $n \geq 2$ вершинами связен ⇔ недиагональные элементы матрицы
$\mathbf{B} = \mathbf{A} + \mathbf{A}^2 + \cdot\cdot\cdot + \mathbf{A}^{n-1}$ все положительные.

На самом деле, $d(v_i, v_j) = \min\{ k \mid \mathbf{A}^k(i, j) > 0\}$.

Доказательство. Сначала отметим, что для любого $k \geq 1$ все элементы $\mathbf{A}^k$ неотрицательны и, следовательно,

если $\mathbf{A}^k(i, j) > 0$ для некоторого $k \in \{1, 2, . . . , n - 1\}$, то $\mathbf{B}(i, j) > 0$.

=> Предположим сначала, что G связен.

Тогда для любых различных вершин $v_i \neq v_j$ мы имеем, что $1 \leq d(v_i, v_j) \leq n - 1$, поскольку существует путь из v_i в v_j.

Следовательно,
если $k = d(v_i, v_j)$, то $\mathbf{A}^k(v_i, v_j) > 0$, а, значит, и $\mathbf{B}(i, j) > 0$.

Следовательно, все недиагональные элементы матрицы **B** положительны.

Матрицы смежности и связность графа

<= Теперь предположим, что все внедиагональные элементы матрицы **B** положительны.

Пусть v_i и v_j — две произвольные различные вершины.

Так как **B**(i , j) > 0, то существует **минимальное** $k \in \{1, . . . , n\text{-}1\}$ такое, что

$\mathbf{A}^k(i, j) > 0$.

Следовательно, существует путь длины k из v_i в v_j .

Это доказывает, что G связен.

В предыдущей лекции мы доказали, что каждый такой путь является **простым** путем.

Соотношение между матрицами смежности графа G и графа G' (дополнение графа G).

Лемма 4.
Для любого графа G справедливо равенство
$\mathbf{A}(G) + \mathbf{A}(G') + \mathbf{I} = \mathbf{J}$.

Доказательство. Пусть $\mathbf{A} = \mathbf{A}(G)$ и пусть $\mathbf{A}' = \mathbf{A}(G')$.

При $i \neq j$, если $\mathbf{A}(i, j) = 0$, то $\mathbf{A}'(i, j) = 1$, и наоборот.

Следовательно, $\mathbf{A}(i, j) + \mathbf{A}'(i, j) = 1$ для всех $i \neq j$.

С другой стороны, $\mathbf{A}(i, i) = \mathbf{A}'(i, i) = 0$ для всех i .

Таким образом, $\mathbf{A}(G) + \mathbf{A}'(G) + \mathbf{I} = \mathbf{J}$, как и утверждается.

Характеристический многочлен и спектр графа

Теперь рассмотрим характеристический многочлен и спектр графа, и некоторые их основные свойства .

Прежде чем начать, напомним некоторые основные факты из линейной алгебры.

Напомним, что λ является собственным значением матрицы **M**, если существует вектор **x** такой, что $\mathbf{M}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$.
В этом случае **x** называется собственным вектором матрицы **M**, соответствующим собственному значению λ .

Чтобы найти собственные значения **M**, найдем нули характеристического полинома **M**:

$$p(t) = \det(t\mathbf{I} - \mathbf{M}).$$

Характеристический многочлен и спектр графа

Если **M** — матрица размерности $n \times n$, то характеристический многочлен $p(t)$ является многочленом порядка n, и

$p(\lambda) = 0 \Leftrightarrow \lambda$ — собственное значение **M.**

Согласно основной теореме алгебры, $p(t)$ имеет n собственных значений, возможно, кратных и комплексных.

Однако, если **M** — симметричная матрица, то важным результатом линейной алгебры является то, что все собственные значения **M** являются вещественными числами, и поэтому мы можем упорядочить их, скажем, от наименьшего к наибольшему:
$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$.

Характеристический многочлен и спектр графа

Кроме того, если матрица **M** симметрична, а **x** и **y** являются собственными векторами **M**, соответствующими различным собственным значениям, то **x и y ортогональны**, то есть,

$$\langle \mathrm{x}, \mathrm{y} \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 0.$$

Более того, если матрица **M** симметрична, то существует ортонормированный базис $\beta = \{ \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n \}$ пространства R^n, состоящий из собственных векторов матрицы **M**.

Напомним, что $\beta = \{ \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n \}$ — ортонормированный базис $\mathbf{R}^n$, если
$\| \mathbf{x}_i \| = 1$ и $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle = 0$, если $i \neq j$,
то есть векторы в β являются единичными векторами, и они взаимно ортогональны.

Спектр графа

Определение: Спектр графа
Характеристический многочлен графа G с матрицей смежности $\mathbf{A}$ равен $p(t) = \det(t\mathbf{I} - \mathbf{A})$.

Спектр графа G, обозначаемый spec(G), представляет собой список собственных значений матрицы $\mathbf{A}$ в порядке возрастания

$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$:
spec(G) = $(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$.

Спектр графа E_n

Пример 2

Матрица смежности пустого графа E_n — *это* матрица из всех нулей, и поэтому характеристический многочлен графа E_n имеет вид

$p(x) = x^n$.

Следовательно, E_n имеет спектр

$\mathrm{spec}(E_n) = (0, 0, . . . , 0).$

Спектр графа K_n

Пример 3 Матрица смежности полного графа K_4 имеет вид

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

Рассмотрим векторы $\mathbf{x}_1 = (1, -1, 0, 0)$, $\mathbf{x}_2 = (1, 0, -1, 0)$ и $\mathbf{x}_3 = (1, 0, 0, -1)$.
Нетрудно заметить, что $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$, $\mathbf{x}_3$ линейно независимы.
Прямое вычисление дает $\mathbf{Ax}_1 = (-1, 1, 0, 0) = -\mathbf{x}_1$, и, следовательно,
$\lambda_1 = -1$ является собственным значением **A** .
Аналогично, прямое вычисление дает, что $\mathbf{Ax}_2 = -\mathbf{x}_2$ и $\mathbf{Ax}_3 = -\mathbf{x}_3$.
Следовательно, $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$.
Наконец, мы имеем, что $\mathbf{Ae} = (3, 3, 3, 3) = 3\mathbf{e}$, и, следовательно,
$\lambda_4 = 3$ является собственным значением матрицы **A** .

Спектр графа K_n

Следовательно, спектр графа K_4 равен $\mathrm{spec}(K_4) = (-1, -1, -1, 3)$

и поэтому характеристический многочлен K_4 равен

$p(t) = (t - 3)(t + 1)^3$.

В общем случае можно показать, что

$\mathrm{spec}(K_n) = (-1, -1, \ldots, -1, n - 1)$

и поэтому характеристический многочлен K_n равен

$p(t) = (t - (n - 1))(t + 1)^{n-1}$.

Спектр графа

Следующий результат и предыдущий пример показывают, что $\Delta(G)$ является точной границей для величины собственных значений G.

Спектр и степени графа

Утверждение 5. Для любого собственного значения λ графа G верно, что $|\lambda| \leq \Delta(G)$.

Доказательство. Предположим, что λ — собственное значение G с собственным вектором $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$.

Предположим, что j -й элемент вектора $\mathbf{x}$ имеет максимальное абсолютное значение,

То есть, $|x_i| \leq |x_j|$ для всех $i = 1, 2, \ldots, n$.

Так как $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$ следует, что

$$\lambda x_j = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{A}(j,i) x_i$$

Спектр и степени графа

и поэтому, используя неравенство треугольника, получаем

$$
\begin{aligned}
|\lambda||x_j| = \left|\sum_{i=1}^{n} \mathbf{A}(j,i)x_i\right| &\leq \sum_{i=1}^{n} |\mathbf{A}(j,i)||x_i| \\
&= |x_j| \sum_{i=1}^{n} |\mathbf{A}(j,i)| \\
&= |x_j| \deg(v_j) \\
&\leq |x_j|\Delta(G).
\end{aligned}
$$

Следовательно, $|\lambda||x_j| \leq |x_j|\,\Delta(G)$, и утверждение следует из деления обеих частей неравенства на $|x_j| \neq 0$.

Спектр и степени графа

Утверждение 6. Пусть spec(G) = ($\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$) и пусть

$$d_{\mathrm{avg}} = \frac{2|E(G)|}{n}$$

обозначает среднее значение степеней графа G.

Тогда $d_{\mathrm{avg}} \leq \lambda_n \leq \Delta(G)$.

Без доказательства.

Спектр и степени графа

Утверждение 7. Граф G является k -регулярным, если $\Leftrightarrow$ $\mathbf{e} = (1, 1, \ldots, 1)$ — собственный вектор G с собственным значением $\lambda = k$.

Доказательство.

=> Напомним, что $\mathbf{Ae} = (\deg(v_1), \deg(v_2), \ldots, \deg(v_n))$.
Если G является k-регулярным, то $\deg(v_i) = k$ для всех v_i , и, следовательно,
$\mathbf{Ae} = (k, k, \ldots, k) = k\mathbf{e}$.
Таким образом, k является собственным значением матрицы $\mathbf{A}$ с соответствующим собственным вектором $\mathbf{e}$.

<= С другой стороны, если $\mathbf{e}$ — собственный вектор графа G с собственным значением k, то
$\mathbf{Ae} = k\mathbf{e} = (k, k, \ldots, k)$
и, таким образом, $\deg(v_i) = k$ для всех v_i , и тогда G является

k -регулярным.

Коспектральные графы

Рассмотрим теперь вопрос о том, можно ли однозначно определить граф по его спектру.

Мы говорим, что два графа G_1 и G_2 являются коспектральными, если они имеют одинаковые (смежные) собственные значения.

Спектр изоморфных графов

Утверждение 8 :

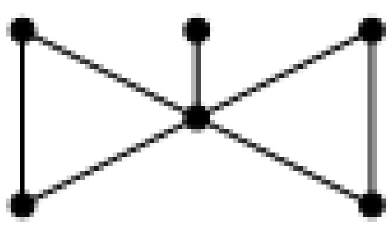
Если графы G_1 и G_2 изоморфны, то $\mathrm{spec}(G_1) = \mathrm{spec}(G_2)$.

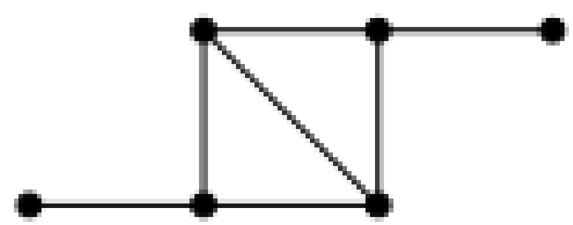
Спектр изоморфных графов

Теперь естественно задаться вопросом, могут ли неизоморфные графы иметь одинаковые собственные значения.

Ответ оказывается положительным, и на самом деле не так уж и сложно найти неизоморфные графы, имеющие одинаковые собственные значения.

Наименьшие связные неизоморфные коспектральные графы показаны ниже.





Наименьшие связные неизоморфные коспектральные графы

Ваши вопросы?

Контакты лектора:

apanovich_09@mail.ru