离散数学方法—谱图理论简介

参考：

Dragos Cvetkovic and Ivan Gutman, SELECTED TOPICS ON APPLICATIONS OF GRAPH SPECTRA

清华大学陆玫老师课程讲义

我们在这里暂时只介绍邻接谱，此外还有一种非常重要的谱图理论的内容是研究图上的Laplace算子，它与谱聚类算法有关，该算法在图像分割、社交网络分析和文本聚类等方面至关重要。关于那个内容，一个很好的教程是 https://csustan.csustan.edu/~tom/Clustering/GraphLaplacian-tutorial.pdf

- 【定义】图的邻接矩阵$A(G)$
- 【定理（Perron-Frobenius）】设A是每个分量都非负不可约矩阵（例如连通图的邻接矩阵）
  - $\lambda_1 > 0$，且$\lambda_1 = \rho(A)$是A的单根

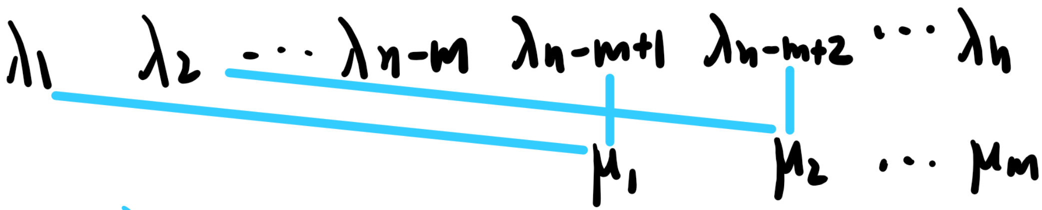
    【remark】我们定义图的谱半径就是$\rho(G) := \lambda_1(A(G))$，这个命题说明$\rho(G) = \rho(A(G))$对于连通图是成立的
  - $X > 0$，其中X是属于λ_1的特征向量（特征向量非负）
  - 如果$B - A > 0$，$B \neq A$，则$\rho(B) > \rho(A)$
  - 【重要】令r_i为A的第i行和，$r_{\min} = \min r_i$，$r_{\max} = \max r_i$，则：

    $$r_{\min} \leq \rho(A) \leq r_{\max},$$

    且等号成立当且仅当$r_{\min} = r_{\max}$

    【remark】在图论中的体现：对于连通图，其谱半径满足$\delta \leq \rho(G) \leq \Delta$
- 【定理（Cauchy交错定理）】A实对称矩阵，$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$，$B$是$A$的$m$阶主子式，$\mu_1 \geq \cdots \geq \mu_m$，则有：

  $$\lambda_i \geq \mu_i \geq \lambda_{n-m+i}, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

  $\lambda_1 \geq \mu_1 \geq \lambda_{n-m+1}$

  $\lambda_2 \geq \mu_2 \geq \lambda_{n-m+2}$

  【remark】在图论中体现为，如果G'是G的子图，则$\lambda_1(G) \geq \lambda_1(G')$，特别地，如果是真子图，则$\lambda_1(G) > \lambda_1(G')$
- 【定理】n阶连通图直径是d，$A(G)$不同特征值的数目为s，则$n \geq s \geq d + 1$.

  【recall】A的最小多项式m_A的次数就是s

  【证明】用反证法，设$s \leq d$，G中有两个点v_i和v_j，使得$d(v_i, v_j) = s$

  代入最小多项式得

  $$0 = m_A(A) = A^s + \cdots,$$

  回忆邻接矩阵幂元素的含义，$(A^k)_{i,j}$表示从顶点v_i到顶点v_j的不相同的长度为s途的个数，由于$d(v_i, v_j) = s$，所以存在一条从v_i到v_j的长度为s的路，所以$(A^s)_{i,j} \geq 1$，而对于任何$1 \leq l \leq s - 1$，如果$(A^l)_{i,j} \neq 0$，则存在从v_i到v_j的长度为l的途，于是存在v_i到v_j的长度至多为$l \leq s - 1$的路，这与$d(v_i, v_j) = s$矛盾.

综上所述$0=0_{i,j}=(A^s)_{i,j}\neq 0$，矛盾.

【remark】这个给出了直径的一个上界，也就是$d\leq s-1$，其中s是不同特征值的个数.

- 【定理】
  - 记号：$N_k(i,j)$，G中从v_i到v_j长度为k的不同途的条数

    根据邻接矩阵的性质，$N_k(i,j)=(A^k)_{i,j}$

    C_k：G中长度为k的闭途的条数

    N_k：G中长度为k的途的总条数
  - $C_k=\mathrm{Tr}\,A^k=\sum_{i=1}^n\lambda_i^k$
  - $m=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^n\lambda_i^2$

    【证明】G中长度为2的闭途的条数，由于是简单图（没有重边），就等于边数的两倍（每条边正着来回走和倒着来回走），于是$m=\frac{1}{2}C_2=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,A^2$.
  - 三角形个数=$\frac{1}{6}\sum_{i=1}^n\lambda_i^3$

    【证明】仿照上面显然
  - $N_k=\sum_{j=1}^n\left(\sum_{i=1}^n V_{ij}\right)^2\lambda_j^k$

    $V=(V_{ij})$是A的正交特征向量构成的矩阵
- 【定理】A是二部图，当且仅当其谱相对于原点对称

  【证明】
  - 如果是二部图，则$A(G)=\begin{pmatrix}0 & B\\ B^T & 0\end{pmatrix}$. 设$X$是相对于特征值$\mu$的特征向量，断言$-\mu$也是特征值. 事实上设$X=\begin{pmatrix}Y\\ Z\end{pmatrix}$计算可得

    $BZ=\mu Y$，$B^TY=\mu Z$，再考虑$X'=\begin{pmatrix}Y\\ -Z\end{pmatrix}$，计算

    $A(G)X'=\begin{pmatrix}-BZ\\ B^TY\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\mu Y\\ \mu Z\end{pmatrix}=-\mu\begin{pmatrix}Y\\ -Z\end{pmatrix}=-\mu X'$，所以$-\mu$也是特征值.
  - 如果谱关于远点对称，则$C_k=\mathrm{Tr}\,A^k=\sum_{i=1}^n\lambda_i^k=0$对所有$k$是奇数. 因此$A$不存在奇数长度的闭途，特别地不存在奇圈，因此是二部图.

  【remark】一个更强的充分条件：如果λ_1是$A(G)$是最大特征值，而$-\lambda_1$也是$A(G)$的特征值，则G是二部图
- 【定理，一个覆盖数的上界】

  设$\alpha(G)$表示G的覆盖数，则

  $$\alpha(G)\leq p_0+\min(p_-,p_+)$$

  其中p_-，p_+分别表示$A(G)$的负、正惯性指数，$p_0=\dim\ker A(G)$

  【证明】设$s=p_0+\min(p_-,p_+)$，如果$\alpha(G)>s$，则存在G顶点集的子集V'使得$|V'|=\alpha(G)$，而且$G[V']$是空图，于是A有如下形式：

  $$A=\begin{pmatrix}0 & B\\ B^T & C\end{pmatrix}$$

  其中0是$\alpha\times\alpha$矩阵，根据Cauchy交错定理，考虑α阶子矩阵0可知$\lambda_i(G)\geq 0\geq\lambda_{n-\alpha+i}(G)$对所有$i=1,2,\cdots,\alpha$

  所以，$s=p_0+\min(p_-,p_+)\geq\alpha$，矛盾.
- 【定理，色数的上界】

  G连通图，则$\chi(G)\leq\lambda_1+1$且等号成立当且仅当是完全图或者奇圈

  【证明】χ为色数，所以存在导出子图H使得$\delta(H)\geq\chi(G)-1$.

【否则，设H^*是使得$\delta(H^*)$最大的导出子图，设$d=\delta(H^*)$，假设G是不是$1+d$可着色的，取G的顶点数最少的不是$1+d$可着色的导出子图H，则H的所有子图都是$1+d$可着色的. 取H的最小度点v，考虑$H-v$，则$H-v$是$1+d$可着色的，取它的一个$1+d$正常染色，因为$d_H(v)=\delta(H)(v)\le\delta(H^*)=d$，所以$v$至多和$H-v$中的$d$个不同顶点相连，于是在这$1+d$种颜色中至少有一种在$v$处是可用的，于是得到了$H$的一个正常$1+d$染色，这和$H$的取法矛盾】

于是根据Perron-Frobenius的第三条可知：

$$\lambda_1(G)\ge\lambda_1(H)\ge\delta(H)\ge\chi(G)-1,$$

如果$\chi(G)=\lambda_1+1$，则$\lambda_1(G)=\lambda_1(H)$，因为$G$是连通图，所以$H=G$且$\delta(G)=\lambda_1(G)$，也就是$G$是正则图（根据Perron-Frobenius定理的第四条），所以$\chi(G)=\Delta+1$，根据Brooks定理可知G是完全图或者奇圈

- 【定理，色数的下界】

  设$\lambda_1(\lambda_1\neq 0)$和$\lambda_n$分别是$A(G)$的最大的和最小的特征值，则$\chi(G)\ge 1+\frac{\lambda_1}{-\lambda_n}$

  【证明】$\chi(G)=t$，则存在分划$S_1,\cdots,S_t$使得所有的导出子图$G[S_i]$是空图.

  【引理】A是n阶实对称矩阵，$S_1,\cdots,S_t$是$\{1,\cdots,n\}$的一个分划，A_{kk}是A的以S_k的指标为行和列的子矩阵，那么对于任何$0\le i_k\le|S_k|$，$k=1,2,\cdots,t$，都有：

  $$\lambda_{i_1+\cdots+i_t+1}(A)+\sum_{i=1}^{t-1}\lambda_{n-i+1}(A)\le\sum_{k=1}^{t}\lambda_{i_k+1}(A_{kk})$$

  在本题中我们取$i_k=0$，则有：

  $$\lambda_1(A)+\sum_{i=1}^{t-1}\lambda_{n-i+1}(A)\le 0,$$

  既然$\sum_{i=1}^{t-1}\lambda_{n-i+1}(A)\ge(t-1)\lambda_n$，我们有$\chi(G)\ge 1+\frac{\lambda_1}{-\lambda_n}$.

- 【remark】我们下面给出一系列用Rayleigh商得到的图的邻接谱半径的下界.

- 【定理，邻接谱的下界】

  - $\lambda_1\ge\delta$;
  - $\lambda_1\ge\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}d(v_i)=\frac{2m}{n}=\overline{d}\ge\delta$
  - (Hofmeister)

    $\lambda_1\ge\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}d^2(v_i)}{n}}$

    等号成立当且仅当$A(G)$是行正则或者具有如下形式：

    $$A(G)=\begin{pmatrix}0 & B\\ B^T & 0\end{pmatrix}$$

    其中B是行正则的.

  【证明】

  - 根据Perron-Frobenius定理，$A(G)$的最大特征值的一个下界是$A(G)$的最小行和，对应的就是最小度
  - 取$C=\frac{1}{\sqrt{n}}(1,1,\cdots,1)^T$，则：

    $$\rho(G)\ge C^TA(G)C=\frac{1}{n}(1,1,\cdots,1)\begin{pmatrix}d_{v_1}\\ \vdots\\ d_{v_n}\end{pmatrix}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}d(v_i)=\frac{2m}{n}.$$

  - 仍然是取$C=\frac{1}{\sqrt{n}}(1,1,\cdots,1)^T$，则：

$$\rho(G)\geq\sqrt{\rho(A(G)^2)}\geq\sqrt{\frac{1}{n}(d_{v_1},\cdots,d_{v_n})\begin{pmatrix}d_{v_1}\\ \vdots\\ d_{v_n}\end{pmatrix}}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n d(v_i)^2}{n}}$$

- 【定理，谱半径的上界】
  - G是m条边的图，则

    $$\lambda_1\leq\frac{-1+\sqrt{1+8m}}{2}.$$

    等号成立当且仅当G是空图或者是完全图

    【ref. R.P. Stanley, A bound on the spectral radius of graphs with edges, ***Linear Algebra and its Applications***, 87(1987), 267-269.】
  - G是m条边的n阶图，则：

    $$\lambda_1\leq\sqrt{2m-n+1},$$

    等号成立，当且仅当$G\cong K_{1,n-1}$或者$G\cong K_n$.

    【ref Y. Hong, A bound on the spectral radius of graphs, ***Linear Algebra and its Applications***,108(1988), 135-140.】

    【证明】

    设A_i是$A(G)$的第i行向量，c_i是A的第i列和

    X是$A(G)$的长度是1的对应于$\rho(G)$的特征向量，$X(i)$是将X中的第j个分量替换成0，如果v_j和v_i之间没有边相邻，得到的向量，因为A_{ij}此时等于0，所以$A_iX(i)=A_iX.$

    因为$AX=\rho(G)X$，所以

    $$A_iX(i)=A_iX=\rho(G)X_i$$

    因此，根据Cauchy-Schwarz不等式：

    $$\rho(G)^2X_i^2=|A_iX(i)|^2\leq\|A_i\|^2\|X(i)\|^2=d_i\left(1-\sum_{j:v_iv_j\notin E(G)}X_j^2\right)$$

    对i求和可得：

    $$\rho(G)^2=2m-\sum_{i=1}^n d_i\left(\sum_{j:v_iv_j\notin E(G)}X_j^2\right).$$

    下面处理这个和式，

    $$\sum_{i=1}^n d_i\left(\sum_{j:v_iv_j\notin E(G)}X_j^2\right)=\sum_{i=1}^n d_iX_i^2+\sum_{i=1}^n d_i\left(\sum_{j:v_iv_j\notin E(G)}X_j^2\right)\geq\sum_{i=1}^n d_iX_i^2+\sum_{i=1}^n\left(\sum_{v_iv_j\notin E(G)}X_j^2\right)$$
    $$=\sum_{i=1}^n d_iX_i^2+\sum_i(n-d_i-1)X_i^2=n-1.$$

    因此就有：

    $$\rho(G)\leq\sqrt{2m-n+1}.$$

    如果想要最终取等号，那么上述所有不等号都取等号，也就是：

    $$\sum_{i=1}^n d_i\left(\sum_{j:v_iv_j\notin E(G)}X_j^2\right)=\sum_{i=1}^n\sum_{j:v_iv_j\notin E(G)}X_j^2.$$

所以这时候只能是：$d_i=1$或$d_i=n-1$（$1\le i\le n$），这说明：

- G是星图$K_{1,n-1}$，或者；
- G是完全图K_n

◦ G是m条边的n阶图，则，

$$\lambda_1\le\frac{(\delta-1)+\sqrt{(\delta-1)^2+4(2m-\delta(n-1))}}{2}.$$

等号成立当且仅当G是正则图，或者它的degree是δ或$n-1$.

【证明】

回忆：

$$r_v(A^2)=\sum_{uv\in E(G)}d(u),$$

其中r_v表示顶点v对应的行的行和。由此可知

$$r_v(A^2)=2m-d(v)-\sum_{uv\in E(G)}d(u)\le 2m-d(v)-(n-d(v)-1)\delta=2m+(\delta-1)d(v)-\delta(n-1),$$

所以

$$r_v(A(G)^2-(\delta-1)A(G))\le 2m-\delta(n-1),$$

根据Perron-Frobenius定理可知

$$\rho(A(G))^2-(\delta-1)\rho(G)\le 2m-\delta(n-1),$$

据此可知

$$\rho(G)\le\frac{\delta-1+\sqrt{(\delta+1)^2+4(2m-\delta n)}}{2}$$