

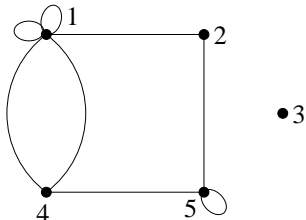
第1章 图中的游动

给定有限集 S 及整数 $k \geq 0$, 我们用 $\binom{S}{k}$ 表示 S 的 k 元子集所构成的集合. 有些不太正式地, 重集 (multiset) 可视为包含重复元素的集合, 例如 $\{1, 1, 3, 4, 4, 4, 6, 6\}$. 我们仅关心每个元素出现的次数, 而不关心这些元素的次序. 因此如 $\{2, 1, 2, 4, 1, 2\}$ 和 $\{1, 1, 2, 2, 2, 4\}$ 是同一个重集: 它们都包含了两个 1, 三个 2, 一个 4 (且没有其他元素). 我们称重集 M 是在集合 S 上 (on S) 的, 如果 M 的每个元素都属于 S . 从而上例中的重集是在集合 $S = \{1, 3, 4, 6\}$ 上的或在任何包含 S 的集合上的. 记 $\left(\binom{S}{k}\right)$ 为 S 上所有 k 元重集所构成的集合. 例如, 若 $S = \{1, 2, 3\}$, 则 (用简化记号)

$$\binom{S}{2} = \{12, 13, 23\}, \quad \left(\binom{S}{2}\right) = \{11, 22, 33, 12, 13, 23\}.$$

下面定义所谓的图. 直观地说, 图有顶点和边, 其中每条边“连接”两个 (允许相同) 顶点. 有可能两条不同的边 e 和 e' 连接相同的两个顶点. 要区分这样的两条边, 我们需要下面更确切的定义. 有限图 (graph) G 由顶点集 (vertex set) $V = \{v_1, \dots, v_p\}$ 和边集 (edge set) $E = \{e_1, \dots, e_q\}$, 以及一个函数 $\varphi: E \rightarrow \left(\binom{V}{2}\right)$ 组成. 约定若 $\varphi(e) = uv$ ($\{u, v\}$ 的简写), 则 e 连接 u 和 v 或等价地 e 与 u 和 v 关联 (incident). 我们称顶点 u 和 v 是邻接的 (adjacent), 如果至少有一条边与 u 和 v 关联. 如果 $\varphi(e) = vv$, 则称 e 为 v 的自环 (loop). 如果一些边 e_1, \dots, e_j ($j > 1$) 满足 $\varphi(e_1) = \dots = \varphi(e_j) = uv$, 就说 u 和 v 之间有重边 (multiple edge). 一个没有自环和重边的图称为简单图 (simple graph). 此时可以将 E 看作 $\binom{V}{2}$ 的子集 [为什么].

图 G 的邻接矩阵 (adjacency matrix) 是复数域上的 $p \times p$ 阶矩阵 $A = A(G)$, 其 (i, j) -元 a_{ij} 等于与 v_i 和 v_j 相关联的边的条数. 故 A 是一个实对称矩阵 (从而有实特征值), 其迹为 G 中自环的个数. 例如, 若 G 为图



则

$$\mathbf{A}(G) = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

图 G 中一个从 u 到 v 的长 (length) 为 ℓ 的游动 (walk) 是一个序列

$$v_1, e_1, v_2, e_2, \dots, v_\ell, e_\ell, v_{\ell+1},$$

满足:

- v_i 是 G 中的顶点;
- e_j 是 G 中的边;
- 对 $1 \leq i \leq \ell$, 边 e_i 的顶点是 v_i 和 v_{i+1} ;
- $v_1 = u$ 且 $v_{\ell+1} = v$.

1.1 定理 对任意整数 $\ell \geq 1$, 矩阵 $\mathbf{A}(G)^\ell$ 的 (i, j) -元等于 G 中从 v_i 到 v_j 的长为 ℓ 的游动的条数.

证明 这是矩阵乘法定义的直接推论. 令 $\mathbf{A} = (a_{ij})$. $\mathbf{A}(G)^\ell$ 的 (i, j) -元由下式给出

$$(\mathbf{A}(G)^\ell)_{ij} = \sum a_{ii_1} a_{i_1 i_2} \cdots a_{i_{\ell-1} j},$$

其中和式遍历所有满足 $1 \leq i_k \leq p$ 的序列 $(i_1, \dots, i_{\ell-1})$. 但因为 a_{rs} 是 v_r 和 v_s 之间的边数, 所以上面和式中的项 $a_{ii_1} a_{i_1 i_2} \cdots a_{i_{\ell-1} j}$ 恰为从 v_i 到 v_j 的具有如下形式的长为 ℓ 的游动的条数 (可能为 0):

$$v_i, e_1, v_{i_1}, e_2, \dots, v_{i_{\ell-1}}, e_\ell, v_j$$

(因为有 a_{ii_1} 种方式选择 e_1 , $a_{i_1 i_2}$ 种方式选择 e_2 , 等等.) 从而对所有的 $(i_1, \dots, i_{\ell-1})$ 求和正好给出了所需的从 v_i 到 v_j 的长为 ℓ 的游动的条数. \square

我们希望用定理 1.1 得到 $(\mathbf{A}(G)^\ell)_{ij}$ 的具体公式, 即 G 中从 v_i 到 v_j 的长为 ℓ 的游动的条数. 我们的公式要用到 $\mathbf{A}(G)$ 的特征值. $\mathbf{A}(G)$ 的特征值也简称为 G 的特征值 (eigenvalue). 回顾一下, 一个 $p \times p$ 阶实对称矩阵 M 有 p 个线性无关的实特征向量, 事实上这些向量可以选为标准正交的 (即单位长度的且正交的). 设 M 的实标准正交的特征向量为 u_1, \dots, u_p , 其对应的特征值为 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$. 若无特别说明, 所有向量 u 都将视为 $p \times 1$ 列 (column) 向量. 我们用 t 表示转置, 因此 u^t 是 $1 \times p$ 行 (row) 向量. 于是向量 u 和 v 的点积 (或标量积、

内积) 就是 $u^t v$ (正常矩阵乘法). 特别地, $u_i^t u_j = \delta_{ij}$ (Kronecker delta 记号^①). 令 $U = (u_{ij})$ 表示以 u_1, \dots, u_p 为列向量的矩阵, 记为 $U = [u_1, \dots, u_p]$. 因为 U 是正交矩阵, 所以

$$U^t = U^{-1} = \begin{bmatrix} u_1^t \\ \vdots \\ u_p^t \end{bmatrix}$$

是以 u_1^t, \dots, u_p^t 为行的矩阵. 由线性代数的理论可知, 矩阵 U 将 M 对角化 (diagonalize), 即

$$U^{-1} M U = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p),$$

其中 $\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ 表示依次以 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ 为对角元的对角矩阵.

1.2 推论 在前面的图 G 中固定两个顶点 v_i 和 v_j . 设邻接矩阵 $A(G)$ 的特征值为 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$. 则存在实数 c_1, \dots, c_p 使得对任意 $\ell \geq 1$ 都有

$$(A(G)^\ell)_{ij} = c_1 \lambda_1^\ell + \dots + c_p \lambda_p^\ell. \quad (1.1)$$

事实上, 如果 $U = (u_{rs})$ 是满足 $U^{-1} A U = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ 的实正交矩阵, 那么

$$c_k = u_{ik} u_{jk}.$$

证明 我们有 [为什么]

$$U^{-1} A^\ell U = \text{diag}(\lambda_1^\ell, \dots, \lambda_p^\ell).$$

于是

$$A^\ell = U \cdot \text{diag}(\lambda_1^\ell, \dots, \lambda_p^\ell) U^{-1}.$$

对等两边的 (i, j) -元 (并用等式 $U^{-1} = U^t$) 可得 [为什么]

$$(A^\ell)_{ij} = \sum_k u_{ik} \lambda_k^\ell u_{jk},$$

得证. □

要应用推论 1.2 我们必须能够计算特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ 以及对角化矩阵 U (或特征向量 u_i). 但在一个有趣的特殊情形下, 我们无需计算 U . 图 G 的一个闭游动 (closed walk) 是一个起点与终点相同的游动. G 中从 v_i 出发的长为 ℓ 的闭游动的条数就是 $(A(G)^\ell)_{ii}$, 因此长为 ℓ 的闭游动的总 (total) 条数 $f_G(\ell)$ 由下式给出

$$f_G(\ell) = \sum_{i=1}^p (A(G)^\ell)_{ii}$$

^① δ_{ij} 的值在 $i = j$ 时为 1, 其他情况为 0. —译者注

$$= \text{tr}(\mathbf{A}(G)^\ell),$$

其中 tr 表示迹 (即主对角线上元素的和). 回顾一下, 一个方阵的迹等于它的特征值的和. 若矩阵 M 有特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$, 那么 [为什么] M^ℓ 就有特征值 $\lambda_1^\ell, \dots, \lambda_p^\ell$. 因此我们证明了如下结果.

1.3 推论 如果 $\mathbf{A}(G)$ 有特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$, 那么 G 中长为 ℓ 的闭游动的条数为

$$f_G(\ell) = \lambda_1^\ell + \dots + \lambda_p^\ell.$$

到目前为止, 我们是在应用线性代数的各种方法和窍门来对图中的游动计数. 但有时我们也可以利用组合的推理来对图中的游动计数, 而这样的结果可以反过来确定 G 的特征值. 作为第一个简单的例子, 考察完全图 (complete graph) K_p , 其顶点集为 $V = \{v_1, \dots, v_p\}$, 且任意两个不同 (distinct) 的顶点之间都有一条边. 于是 K_p 有 p 个顶点, 有 $\binom{p}{2} = \frac{1}{2}p(p-1)$ 条边.

1.4 引理 令 J 表示 $p \times p$ 阶全 1 矩阵. 则 J 的特征值为 p (1 重) 和 0 ($p-1$ 重).

证明 由于所有的行都相等且非零, 秩 (J) = 1, 再由秩为 $p-m$ 的 $p \times p$ 矩阵至少有 m 个特征值等于 0, 可以推断 J 至少有 $p-1$ 个特征值等于 0. 因为 $\text{tr}(J) = p$ 而迹是所有特征值的和, 所以 J 的剩余特征值就是 p . \square

1.5 命题 完全图 K_p 的特征值有: 重数为 $p-1$ 的特征值 -1 , 重数为 1 的特征值 $p-1$.

证明 我们有 $\mathbf{A}(K_p) = J - I$, 其中 I 表示 $p \times p$ 单位矩阵. 如果矩阵 M 的特征值为 μ_1, \dots, μ_p , 那么 $M + cI$ (c 为常数) 的特征值就是 $\mu_1 + c, \dots, \mu_p + c$ [为什么]. 由引理 1.4 得证. \square

1.6 推论 完全图 K_p 中从顶点 v_i 出发的长为 ℓ 的闭游动的条数是

$$(\mathbf{A}(K_p)^\ell)_{ii} = \frac{1}{p}((p-1)^\ell + (p-1)(-1)^\ell). \quad (1.2)$$

(注意这也是由数 $1, 2, \dots, p$ 构成的序列 (i_1, \dots, i_ℓ) 的个数, 满足 $i_1 = i$, 任意两个相邻的数都不同, 且 $i_\ell \neq i_1$ [为什么].)

证明 由推论 1.3 和命题 1.5, K_p 中长为 ℓ 的闭游动的总条数为 $(p-1)^\ell + (p-1)(-1)^\ell$. 由图 K_p 的对称性, 从 v_i 出发的长为 ℓ 的闭游动的条数与 i 无关 (所有顶点“看起来一样”). 因此将闭游动的总条数除以 p (顶点数) 即得所求结果. \square

推论 1.6 的组合证明相当巧妙 (练习 1.1). 我们的代数证明则初显代数学在解决计数问题中的威力.

对 K_p 中一般游动应如何处理呢? 不难将矩阵 $\mathbf{A}(K_p)$ 具体地对角化 (或等价地, 计算特征向量), 但有一个更简单的特殊论证. 由二项式定理^①可得

$$(J - I)^\ell = \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^{\ell-k} \binom{\ell}{k} J^k. \quad (1.3)$$

现在对 $k > 0$ 有 $J^k = p^{k-1}J$ [为什么], 而 $J^0 = I$. (J^0 的“正确”值事先 (piori) 并不清楚, 但为使等式 (1.3) 成立必须取 $J^0 = I$.) 因此

$$(J - I)^\ell = \sum_{k=1}^{\ell} (-1)^{\ell-k} \binom{\ell}{k} p^{k-1}J + (-1)^\ell I.$$

再次应用二项式定理可得

$$(J - I)^\ell = \frac{1}{p}((p-1)^\ell - (-1)^\ell)J + (-1)^\ell I. \quad (1.4)$$

对 $i \neq j$ 对等两边 (i, j) -元可得

$$(\mathbf{A}(K_p)^\ell)_{ij} = \frac{1}{p}((p-1)^\ell - (-1)^\ell). \quad (1.5)$$

如果取 (1.4) 的 (i, i) -元就重新得到等式 (1.2). 注意一个有趣的事实: 如果 $i \neq j$ 那么

$$(\mathbf{A}(K_p)^\ell)_{ii} - (\mathbf{A}(K_p)^\ell)_{ij} = (-1)^\ell.$$

我们也可以用推论 1.6 来推导 (1.5), 应用

$$\sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p (\mathbf{A}(K_p)^\ell)_{ij} = p(p-1)^\ell,$$

此即 K_p 中长为 ℓ 的游动的总条数. 细节留给读者完成.

接着我们来说明如何从等式 (1.2) 自身来确定 $\mathbf{A}(K_p)$ 的特征值. 因此, 如果我们可以证明 (1.2) 而无需先计算 $\mathbf{A}(K_p)$ 的特征值 (恰如在前两段中的做法), 那么就给出了计算特征值的另一种方法. 我们的论证原则上适用于任何图 G , 而不仅仅是 K_p . 先说一个简单的引理.

1.7 引理 设 $\alpha_1, \dots, \alpha_r$ 和 β_1, \dots, β_s 是非零复数, 并使得对任意正整数 ℓ 都有

$$\alpha_1^\ell + \dots + \alpha_r^\ell = \beta_1^\ell + \dots + \beta_s^\ell. \quad (1.6)$$

则 $r = s$ 且这些 α 恰是这些 β 的重排.

^① 这里可以应用二项式定理是因为 I 和 J 可交换 (commute). 一般对没有交换性的 $p \times p$ 矩阵 A 和 B , 我们顶多可以说 $(A+B)^2 = A^2 + AB + BA + B^2$, 对更高幂次的情形类似.

证明 我们用生成函数 (generating function) 这一强大的工具. 令 x 为一个绝对值 (或模) 接近 0 的复数. 将式 (1.6) 乘以 x^ℓ 并对所有的 $\ell \geq 1$ 求和. 所得几何级数必然收敛, 且有

$$\frac{\alpha_1 x}{1 - \alpha_1 x} + \cdots + \frac{\alpha_r x}{1 - \alpha_r x} = \frac{\beta_1 x}{1 - \beta_1 x} + \cdots + \frac{\beta_s x}{1 - \beta_s x}. \quad (1.7)$$

这个等式对 (模) 足够小的复数成立. 通分可得一个多项式恒等式. 但如果两个关于 x 的多项式在无限多个点上相等, 那么它们是相同的多项式 [为什么]. 因此式 (1.7) 对所有 (all) 复数 x 成立 (忽略掉那些导致分母为零的 x 的值).

固定一个复数 $\gamma \neq 0$. 将式 (1.7) 乘以 $1 - \gamma x$ 并令 $x \rightarrow 1/\gamma$. 左边化为等于 γ 的 α_i 的个数, 而右边化为等于 γ 的 β_j 的个数 [为什么]. 于是这两个数对所有 γ 都相等, 引理得证. \square

1.8 例 设图 G 有 12 个顶点且 G 中长为 ℓ 的闭游动的条数等于 $3 \cdot 5^\ell + 4^\ell + 2(-2)^\ell + 4$. 那么由推论 1.3 和引理 1.7 [为什么] 可知 $A(G)$ 的特征值为 5, 5, 5, 4, -2, -2, 1, 1, 1, 1, 0, 0.

第 1 章注记

图的特征值与游动计数之间的联系被认为是“民间传说”. 图谱理论 (spectral graph theory) 研究各种与图相关的矩阵的谱 (特征值所构成的重集), 该课题起始于 1931 年对量子化学的研究. 第一篇数学论文由 L. Collatz 和 U. Sinogowitz 在 1957 年发表. 专著 Cvetković, Doob, and Sachs [22] 提供了很好的一般参考书目^①. 关于该课题还有两本教材, 一本是 Cvetković, Rowlinson, and Simić [23], 另一本是 Brouwer and Haemers [13].

第 1 章练习

注 对有 (*) 标记的练习的处理请参见书末的“部分练习提示”.

1. (巧题) 给出推论 1.6 的组合证明, 即 K_p 中某个顶点到其自身的长为 ℓ 的闭游动的条数是 $\frac{1}{p}((p-1)^\ell + (p-1)(-1)^\ell)$.
2. 假设图 G 有 15 个顶点且对任意 $\ell \geq 1$, G 中长为 ℓ 的闭游动的条数是 $8^\ell + 2 \cdot 3^\ell + 3 \cdot (-1)^\ell + (-6)^\ell + 5$. 记 G' 为在图 G 中每个顶点添加一个自环 (该顶点处已有自环

^① 所有引用文献都指向本书末的参考文献.

的除外) 所得到的图. 在图 G' 中有多少条长为 ℓ 的闭游动? (用线性代数的技巧. 也可以试试纯组合的方法.)

3. 具有顶点二部划分 (A, B) 的二部图 G 是一个以 A 和 B 的无交并 $A \cup B$ 为顶点集的图, 满足 G 中每一条边都关联一个 A 中顶点和一个 B 中顶点. 用游动计数的方法来说明 G 中的非零特征值成对 $\pm\lambda$ 出现.

也可以用矩阵 $\mathbf{A}(G)$ 的特征多项式 $f(x)$ 来给出一个等价的描述. 回顾 $p \times p$ 矩阵 A 的特征多项式定义为 $\det(A - xI)$. 当前的练习就等价于说, 如果 G 是二部图, 那么 $\mathbf{A}(G)$ 的特征多项式 $f(x)$ 可以写为 $g(x^2)$ (若 G 有偶数个顶点) 或 $xg(x^2)$ (若 G 有奇数个顶点), 其中 $g(x)$ 是一个多项式.

注 有时 $p \times p$ 矩阵 A 的特征多项式定义为 $\det(xI - A) = (-1)^p \det(A - xI)$. 我们采用定义 $\det(A - xI)$, 这使得其在 $x = 0$ 处的值等于 $\det A$.

4. 设 $r, s \geq 1$. 完全二部图 $K_{r,s}$ 有顶点 $u_1, u_2, \dots, u_r, v_1, v_2, \dots, v_s$, 且每个 u_i 和 v_j 之间都有一条边 (故共有 rs 条边).

(a) 通过纯组合论证, 计算 $K_{r,s}$ 中长为 ℓ 的闭游动的条数.

(b) 利用 (a) 推导 $K_{r,s}$ 的特征值.

5. (*) 设 H_n 是从完全二部图 K_{nn} 去掉 n 条顶点无交的边所得的图. 于是 H_n 有 $2n$ 个顶点和 $n(n-1)$ 条边, 每个顶点的度 (所关联的边的条数) 为 $n-1$. 证明 H_n 的特征值为 ± 1 (每个 $n-1$ 重) 和 $\pm(n-1)$ (每个 1 重).

6. 设 $n \geq 1$. 完全 p 部图 $K(n, p)$ 有顶点集 $V = V_1 \cup \dots \cup V_p$ (无交并), 每个 $|V_i| = n$, 且对 $i \neq j$, V_i 中任一顶点与 V_j 中任一顶点都连一条边. (如果 $u, v \in V_i$ 那么没有边 uv .) 因此 $K(1, p)$ 就是完全图 K_p , 而 $K(n, 2)$ 就是完全二部图 K_{nn} .

(a) (*) 用推论 1.6 计算 $K(n, p)$ 中长为 ℓ 的闭游动的条数.

(b) 利用 (a) 推导 $K(n, p)$ 的特征值.

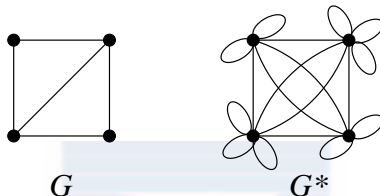
7. 设 G 是有限简单图, 有特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$. 用 $G(n)$ 表示将 G 中每个顶点 v 替换为 n 个顶点集 V_v 所得的图, 满足若 uv 是 G 的边, 则 V_u 中每个顶点与 V_v 中每个顶点都连一条边 (且没有更多的边). 例如, $K_p(n) = K(n, p)$. 用 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ 表示 $G(n)$ 的特征值.

8. 设 G 是 p 个顶点上的 (有限) 图. 记 G' 为如下所得的图: 在 G 的每个顶点 v 上添加一条与其关联的边 e_v , 而 e_v 的另一个顶点是一个新顶点 v' . 于是 G' 有 p 条新边和 p 个度为 1 的新顶点. 用组合或代数方法证明: 如果 G 有特征值 λ_i , 那么 G' 有特征值 $(\lambda_i \pm \sqrt{\lambda_i^2 + 4})/2$. (代数证明比组合证明简单得多.)

9. 设 G 是 (有限) 图, 它具有顶点 v_1, \dots, v_p 和特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$. 我们知道对任意 i, j 有实数 $c_1(i, j), \dots, c_p(i, j)$ 使得对所有 $\ell \geq 1$,

$$(\mathbf{A}(G)^\ell)_{ij} = \sum_{k=1}^p c_k(i, j) \lambda_k^\ell.$$

- (a) 证明 $c_k(i, i) \geq 0$.
- (b) 证明 $i \neq j$ 时可以有 $c_k(i, j) < 0$. (最简单的例子就可以证明.)
10. 设 G 是有限图, 它具有特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$. 用 G^* 表示与 G 的顶点集相同的图, 但在顶点 u 和 v (包含 $u = v$) 之间有 $\eta(u, v)$ 条边, 其中 $\eta(u, v)$ 是 G 中从 u 到 v 的长为 2 的游动的条数. 例如,



用 G 的特征值表示 G^* 的特征值.

11. (*) 用 K_n^o 表示在 n 个顶点的完全图的每个顶点添加一个自环所得的图. (从而 $\mathbf{A}(K_n^o) = J_n$, 就是 $n \times n$ 全 1 矩阵, 并且 K_n^o 有 $\binom{n+1}{2}$ 条边.) 用 $K_n^o - K_m^o$ 表示在 K_n^o 中去掉 K_m^o 的所有边所得的图, 即选 K_n^o 的 m 个顶点, 并去掉这些顶点之间的所有边 (包含自环). (于是 $K_n^o - K_m^o$ 有 $\binom{n+1}{2} - \binom{m+1}{2}$ 条边.) 计算图 $\Gamma = K_{21}^o - K_{18}^o$ 中长为 $\ell \geq 1$ 的闭游动的条数 $C(\ell)$.
12. (a) 设 G 是有限图, Δ 为 G 中顶点的最大度. 记邻接矩阵 $\mathbf{A}(G)$ 的最大特征值为 λ_1 . 证明 $\lambda_1 \leq \Delta$.
- (b) (*) 假设 G 是有 q 条边的简单图 (无自环或重边). 证明 $\lambda_1 \leq \sqrt{2q}$.
13. 设 G 是有至少两个顶点的有限图. 假设对某个 $\ell \geq 1$, 任意两顶点 u, v (包含 $u = v$) 之间的长为 ℓ 的游动数都是奇数. 证明存在非空顶点子集 S 使得 S 有偶数个元素, 而且 G 的任意顶点 v 都与 S 中的偶数个顶点相连. (顶点 v 与自己相连当且仅当 v 处有自环.)