Конспект к лекции 4. (Санкт-Петербург, 9 апреля 2017 г.)

9 Матрица графа.

Граф с n вершинами описывается *матрицей смежности* M размерности $n \times n$, в которой элемент m_{ij} равно числу рёбер, соединяющих i-ую и j-ую вершины графа. Эта матрица симметрична. Если граф однородный и степень каждой вершины равна d, то сумма чисел в каждой строке и каждом столбце матрицы равна d.

Различные свойства графа удобно описывать в терминах этой матрицы:

- (i, j)-й элемент матрицы M^k есть число путей длины k, идущих из вершины i в вершину j;
- если разделить матрицу M на d, то получится матрица, у которой сумма любой строки и любого столбца равна 1. Умножение на эту матрицу описывает случайное блуждание: если $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n)^\perp$ есть вектор-столбец, состоящий из вероятностей, описывающих некоторое распределение на вершинах графа, то вектор $(\frac{1}{d}M\mathbf{p})$ задает распределение через один шаг случайного блуждания (мы выбираем случайную вершину v согласно распределению $\mathbf{p}$ и переходим к её соседу, выбрав случайно одно из d рёбер, выходящих из v).

Последнее наблюдение показывает, что случайное блуждание по графу (из текущей вершины мы равновероятно переходим по одному из рёбер в соседнюю вершину, затем в соседнюю вершину к соседней, и так далее) связано со степенями матрицы M/d: чем ближе эти степени к матрице равномерного перемешивания (в которой все элементы равны $1/n$), тем более равномерно распределен результат случайного блуждания.

Изучать степени матрицы удобно в собственном базисе матрицы. Мы увидим, что в терминах собственных чисел матрицы M выражаются многие комбинаторные свойства графа. Для начала сделаем несколько простых наблюдений:

- матрица M симметрична и потому имеет ортогональный собственный базис над вещественным полем, с вещественными собственными значениями;
- поскольку сумма всех чисел в каждой строке равна d, вектор-столбец $(1, 1, \dots, 1)^\perp$ является собственным вектором и имеет собственное значение d;
- все собственные значения не превосходят d по модулю: поскольку суммы элементов во всех строках матрицы равны d, то максимум модулей координат собственного вектора при умножении на M увеличивается не более чем в d раз;

- если граф состоит из нескольких компонент связности, то имеется несколько собственных векторов с собственным значением d (для вершин одних компонентах связности берём единицы, для других нули);
- напротив, если граф связен, то собственный вектор со значением d единственный: возьмём максимальную по модулю координату этого вектора (вершину графа), она равна среднему по соседям, и потому во всех соседях должно быть то же значение; то же верно для соседей соседей, и т.д.;
- для двудольного графа имеется собственный вектор со значением $-d$: надо в одной доле взять единицы, а в другой минус единицы;
- если имеется собственный вектор со значением $-d$, то граф имеет двудольную связную компоненту (возьмём максимальную по модулю координату собственного вектора; в её соседях будет то же число с противоположным знаком, и так далее: связная компонента этой вершины делится на две доли).

На лекции мы вычислили все собственный числа полного графа с n вершинами с петлями.

Упражнение 9.1 *Найдете все собственный числа полного графа с n вершинами без петель.*

Замечание: Докажите, что если у d-регулярного графа есть двудольная компонента связности, то у его матрицы есть собственное число $-d$. Верно и обратное: если у матрицы графа есть собственное число $-d$, то в графе имеется двудольная компонента связности.

Упражнение 9.2 *Докажите, что спектр регулярного графа симметричен относительно нуля тогда и только тогда, когда граф является двудольным.*

Упражнение 9.3 *Докажите, что спектр линейного оператора (сумма диагональных элементов матрицы) не зависит от выбора базиса.*

Упражнение 9.4 *Пусть спектр графа G (с n вершинами и m рёбрами, без петель и кратных рёбер) состоит из чисел $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$.*

(а) Чему равна сумма $\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^2$?

(б) Чему равна сумма $\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^3$?

Напомним также, что максимальное по модулю собственное число всякой симметричной матрицы M равно максимуму абсолютной величины *отношения Рэлея* по всем ненулевым векторам:

$$|\lambda_1| = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{|\mathbf{x} M \mathbf{x}^{\perp}|}{||\mathbf{x}||^2}.$$

Далее, если $\mathbf{x}_1$ есть собственный вектор, соответствующий собственному значению λ_1, то модуль второго (по абсолютной величине) собственное число матрицы может быть определено как максимум модуля отношения Рэлея по всем векторам, ортогональным $\mathbf{x}_1$:

$$|\lambda_2| = \max_{\mathbf{x}\perp\mathbf{x}_1} \frac{|\mathbf{x}M\mathbf{x}^{\perp}|}{||\mathbf{x}||^2}.$$

В частности, если первый собственный вектор имеет вид $\mathbf{x}_1 = (1, 1, \dots, 1)$, то

$$|\lambda_2| = \max_{\mathbf{x}\,:\,x_1+\ldots+x_n=0} \frac{|\mathbf{x}M\mathbf{x}^{\perp}|}{||\mathbf{x}||^2}.$$

Аналогичное утверждение верно и для собственных чисел матрицы, упорядоченных по убыванию (не по абсолютной величине):

Упражнение 9.5 *Пусть λ_i, $i = 1, \dots, n$ —собственные числа симметричной матрицы M, расположенные в порядке убывания,*

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_n,$$

и $\mathbf{x}_i$ соответствующие им собственные векторы. Докажите, что для $i = 2, \dots, n$

$$\lambda_i = \max_{\mathbf{x}\perp\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_{i-1}} \frac{\mathbf{x}M\mathbf{x}^{\perp}}{||\mathbf{x}||^2}.$$

10 Спектральный зазор и свойство перемешивания

В этой главе мы определим спектральный экспандер как однородный граф с достаточно большим *спектральным зазором*. Мы изучим простейшие свойства спектральных экспандеров и покажем, что спектральный зазор связан с некоторыми комбинаторными свойствами графа (свойством «быстрого перемешивания»).

Определение 10.1 *Регулярный граф степени d с n вершинами, у которого все собственные числа кроме одного по абсолютной величине не превосходят γd, будем называть* спектральным (n, d, γ)-экспандером*.*

Если $\gamma = 0$, это означает, что матрица графа является матрицей полного перемешивания (в каждой клетке матрицы стоит элемент $1/n$). Такое возможно лишь в случае $d = n$ (такой матрицей обладает полный граф с петлями). Если же значение γ положительно, но сравнительно мало, это означает, что граф в том или ином смысле обладает свойствами «хорошего перемешивания». Далее мы докажем два утверждения, несколько разным способом формализующие это соображение.

Лемма 10.1 (о перемешивании – expander mixing lemma) *Для произвольных (возможно, пересекающихся) множества вершин A и B в спектральном (n, d, γ)-экспандере число рёбер, ведущих из A в B, выполняется неравенство*

$$\left| |E(A,B)| - \frac{d \cdot |A| \cdot |B|}{n} \right| \leqslant \gamma d \sqrt{|A| \cdot |B|}.$$

Замечание 1: Леммой о перемешивании удобно пользоваться, когда множества вершин A и B достаточно велики (каждое из них занимает некоторую фиксированную долю среди n вершин графа), а параметр γ очень мал (значительно меньше, чем доли $|A|/n$ и $|B|/n$). Из леммы следует, что число рёбер между парой таких множеств A, B достаточно велико, т.е., спектральный экспандер обладает определённым свойством «сильной связности».

Замечание 2: Лемма о перемешивании и говорит, в частности, что один шаг случайного блуждания в спектральном экспандере (с достаточно малым значением параметра γ) довольно сильно приближает любое начальное распределение к равномерному. Чтобы заметить это, перепишем её утверждение в менее симметричном виде

$$\left| \frac{|E(A,B)|}{d|A|} - \frac{|B|}{n} \right| \leqslant \gamma \sqrt{\frac{|B|}{|A|}}.$$

Для интерпретации этого неравенства удобно рассмотреть равномерное распределения вероятностей на подмножестве вершин A. Мы выбираем случайную вершину из A и делаем один шаг случайного блуждания (переходим по случайно выбранному ребру в соседа данной вершины). Какова вероятность того, что в результате мы попадем в одну из вершин множества B? Мы можем утверждать, что эта вероятность равна $\frac{|E(A,B)|}{d|A|}$. Если бы итоговое распределение оказалось равномерным, то данная вероятность была бы равна доле множества B во всём графе, т.е., $|B|/n$. Хотя на самом деле получаемое распределение и не является равномерным, но вероятность попасть из случайной вершина A в какую-нибудь вершину множества B отличается от «идеальной» вероятности $|B|/n$ ненамного — не более, чем на $\gamma\sqrt{\frac{|B|}{|A|}}$.

Доказательство леммы о перемешивании: Обозначим $\mathbf{1}_A$ и $\mathbf{1}_B$ характеристические векторы множеств A и B (i-ая координата соответствующего вектора равен единице, если i-ая вершина графа принадлежит A или B соответственно; значение координаты равно нулю в противном случае). Заметим, что сумма квадратов координат вектора $\mathbf{1}_A$ есть в точности число элементов в множестве A; аналогично, сумма квадратов координат вектора $\mathbf{1}_B$ есть в точности число элементов в множестве B. Следовательно, евклидова норма этих векторов есть квадратный корень из числа элементов в A и B соответственно,

$$||\mathbf{1}_A||_2 = \sqrt{|A|},\ ||\mathbf{1}_B||_2 = \sqrt{|B|}.$$

Если M — матрица графа, то число рёбер, ведущих из A в B равно

$$|E(A,B)| = \mathbf{1}_A M \mathbf{1}_B^{\perp} \tag{1}$$

Мы должны оценить эту величину, используя определение спектрального экспандера.

Пусть $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$ — ортонормированный собственный базис матрицы M заданного графа, а $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ – соответствующие собственные числа. Будем считать, что собственные числа упорядочены по убыванию абсолютной величины:

$$|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \ldots \geqslant |\lambda_n|.$$

При этом

$$\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{n}}(1,1,\ldots,1),$$

а $\lambda_1 = d$, и $|\lambda_i| \leqslant \gamma d$ для $i > 1$. Разложим векторы $\mathbf{1}_A$ и $\mathbf{1}_B$ по собственному базису: $\mathbf{1}_A = \sum a_i \mathbf{e}_i$, $\mathbf{1}_B = \sum b_i \mathbf{e}_i$. Получаем

$$|E(A,B)| = \mathbf{1}_A M \mathbf{1}_B^{\perp} = (\sum_{i=1}^{n} a_i \mathbf{e}_i) M (\sum_{i=1}^{n} b_i \mathbf{e}_i)^{\perp}$$

Выделим первый член из суммы (1):

$$|E(A,B)| = d\frac{|A|}{\sqrt{n}} \cdot \frac{|B|}{\sqrt{n}} + \sum_{i=2}^{n} \lambda_i a_i b_i$$

Остается оценить сумму всех остальных членов этой суммы.

$$\left| |E(A,B)| - \frac{d \cdot |A| \cdot |B|}{n} \right| = |\sum_{i=2}^{n} \lambda_i a_i b_i| \leqslant \gamma d |\sum_{i=1}^{n} a_i b_i|$$
$$\leqslant \gamma d \cdot ||\mathbf{1}_A||_2 \cdot ||\mathbf{1}_B||_2 = \gamma d \cdot \sqrt{|A||B|},$$

и лемма доказана.

Упражнение 10.1 *Пусть граф G является спектральным (n,d,γ)-экспандером и множество S состоит из $n/2$ вершин этого графа. Рассмотрим следующее распределение вероятностей: выберем случайно вершину v из S (каждая вершина выбирается с вероятностью $\frac{1}{n/2}$), а затем выберем случайного соседа v. В результате этой процедуры мы получим некоторое распределение вероятностей на вершинах графа, которое мы обозначим $(p_1, \ldots, p_n)$. Докажите, что это распределение близко к равномерному в следующем смысле:*

$$\sum_{i=1}^{n} \left(p_i - \frac{1}{n}\right)^2 \leqslant \gamma^2/n.$$

Замечание: *это утверждение ещё раз показывает, что даже один шаг случайного блуждания на экспадере значительно приближает исходное распределение к равномерному.*

11 От спектрального экспандера к комбинаторному

В этом параграфе мы изучим связь между спектральным и комбинаторным определениями экспандера. Мы покажем, что всякий спектральный экспандер является однородным комбинаторным экспандером (и чем больше зазор между первым и вторым собственным числом у спектрального экспандера, тем более сильные свойства рёберного и вершинного расширения мы можем для гарантировать для этого графа).

Теорема 11.1 *Пусть граф G содержит n вершин, степень каждой вершины равна d и спектр матрицы графа состоит из чисел*

$$|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \ldots \geqslant |\lambda_n|.$$

Тогда для любого множества вершин S (непустого и не совпадающего со множеством всех вершин) $\frac{|E(S,\bar{S})|}{\frac{1}{n}\cdot|S|\cdot|\bar{S}|} \geqslant d - |\lambda_2|$.

Замечание: Если $\lambda_2 = d$, то в графе больше одной компоненты связности. Выбрав в качестве множества S одну из компонент связности, мы получим $|E(S,\bar{S})| = 0$ и $|\Gamma(S)| \leqslant |S|$. Так что в графе с нулевым зазором между первым и вторым собственным числом коэффициенты рёберного и вершинного расширения также равны нулю.

С помощью Теоремы 11.1 мы можем установить связь между спектральным и комбинаторным определениями экспандера:

Следствие 11.1 (спектральный зазор $\Longrightarrow$ рёберное расширение) *Для всякого спектрального (n,d,γ)-экспандера*

$$\min_{|S|\leqslant n/2} \frac{|E(S,\bar{S})|}{|S|} \geqslant \frac{d(1-\gamma)}{2},$$

так что $h_E(G) \geqslant \frac{1-\gamma}{2}$.

Следствие 11.2 (спектральный зазор $\Longrightarrow$ вершинное расширение) *Для всякого спектрального (n,d,γ)-экспандера*

$$\min_{|S|\leqslant n/2} \frac{|\Gamma(S)\backslash S|}{|S|} \geqslant \frac{(1-\gamma)}{2},$$

т.е., $h_V(G) \geqslant \frac{1-\gamma}{2}$.

Следствие 11.3 (спектральный зазор $\Longrightarrow$ однородный экспандер) *Если в спектральном (n,d,γ)-экспандере без петель в каждой вершине добавить петлю, мы получим однородный комбинаторный $(n,d+1,\frac{1-\gamma}{2})$-экспандер.*

Доказательство теоремы: Пусть A есть множество вершин графа (размера не более $n/2$). Обозначим $\mathbf{1}_A$ и $\mathbf{1}_{\bar{A}}$ характеристические векторы самого множества A и его дополнения. Рассмотрим вектор

$$\mathbf{f} = |\bar{A}|\mathbf{1}_A - |A|\mathbf{1}_{\bar{A}},$$

сумма координат которого равна нулю. Его норма

$$||\mathbf{f}||^2 = |\bar{A}|^2 \cdot |A| + |A|^2 \cdot |\bar{A}| = |A| \cdot |\bar{A}| \cdot n$$

Далее мы подсчитаем значение $\mathbf{f}M\mathbf{f}^\top = \sum_{i,j} m_{ij} f_i f_j$. Рассмотрим вклад каждого ребра графа в эту сумму. Если ребро не является петлёй (ребро с концами (i,j), где $i \neq j$), то его вклад состоит из двух слагаемых $f_i f_j + f_i f_j$, что равняется

- $2|\bar{A}|^2$, если оба конца ребра лежат в A,
- $2|A|^2$, если оба конца ребра лежат в $\bar{A}$,
- $-2|A| \cdot |\bar{A}|$, если один конец ребра лежит в A, а другой в $\bar{A}$.

Если же концы рёбра совпадают (ребро является петлей с концами (i,i)), то его вклад в сумму вклад сумму $\sum_{i,j} m_{ij} f_i f_j$ состоит из единственного члена f_i^2. Это число равно

- $|\bar{A}|^2$, если i-ая вершина лежит в A,
- $|A|^2$, если i-ая вершина лежит в $\bar{A}$.

Удобно пересчитать эту сумму, подсчитывая вклад не по рёбрам, а по концам рёбер. В сумму входят слагаемые трёх видов:

- $|\bar{A}|$ для конца каждого ребра, ведущего из A в A (всего таких концов рёбер $d|A| - |E(A, \bar{A})|$),
- $|A|$ для конца каждого ребра, ведущего из $\bar{A}$ в $\bar{A}$ (всего таких концов рёбер $d|\bar{A}| - |E(A, \bar{A})|$),
- $-|A| \cdot |\bar{A}|$ от обоих концов каждого ребра, ведущего из A в $\bar{A}$ (таких рёбер $|E(A, \bar{A})|$).

(в первом и втором пункте мы считаем, что у петли один конец). Таким образом,

$$\mathbf{f}M\mathbf{f}^\top = (d|A| - |E(A, \bar{A})|) \cdot |\bar{A}|^2 + (d|\bar{A}| - |E(A, \bar{A})|) \cdot |A|^2 - 2|E(A, \bar{A})| \cdot |A| \cdot |\bar{A}|.$$

Учитывая, что $|A| + |\bar{A}| = n$, получаем

$$\mathbf{f}M\mathbf{f}^\top = dn|A| \cdot |\bar{A}| - |E(A, \bar{A})|n^2.$$

Разложим вектор $\mathbf{f}$ по векторам ортонормированного собственного базиса матрицы графа:

$$\mathbf{f} = (\mathbf{f}, \mathbf{e}_2) \cdot \mathbf{e}_2 + \ldots + (\mathbf{f}, \mathbf{e}_n) \cdot \mathbf{e}_n$$

(первый коэффициент в разложении $\mathbf{f}$ по собственному базису равен нулю, поскольку $\mathbf{f}$ ортогонален $\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{n}}(1, \dots, 1)$). Заметим, что

$$\left|\mathbf{f} M \mathbf{f}^\top\right| = \left|\sum_{i \geqslant 2} \lambda_i f_i^2\right| \leqslant |\lambda_2| \cdot ||\mathbf{f}||^2.$$

Сравнивая два выражения для величины $\mathbf{f} M \mathbf{f}^\top$, получаем

$$dn|A| \cdot |\bar{A}| - n^2 \cdot |E(A, \bar{A})| \leqslant \lambda_2 \cdot n|A| \cdot |\bar{A}|,$$

что и требовалось доказать.