

グラフ上のラプラシアンとスペクトルについて

Laplacians of graphs and Spectrum

兵庫県立大学物質理学研究科

野村 祐司 (Yuji Nomura)

Graduate School of Material Science, University of Hyogo

概要

グラフ上の離散ラプラシアン（隣接行列）のスペクトルとグラフの幾何学的，グラフ論的構造との間にある関係についての入門的解説を行う．基本的なグラフの隣接行列の固有値の紹介，隣接行列の n 乗と歩道の個数の関係およびグラフの直径と固有値の関係を述べる．さらに正則グラフと2部グラフのスペクトルによる特徴付けを行う．

1 Introduction

1.1 グラフと離散ラプラシアン（隣接行列）の定義

グラフとは，頂点とそれらを結ぶ辺とからなる図形である．グラフ G の頂点 (vertex) の集合を

$$V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_m\},$$

辺 (edge) の集合を

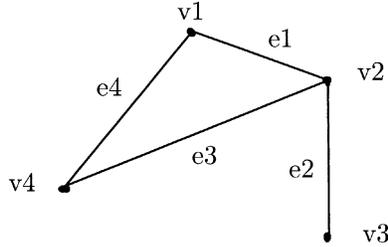
$$E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$$

とする．辺 e_i の両端の頂点が v_j と v_k であるとき，

$$e_i = \{v_j, v_k\} \quad \text{または} \quad e_i = v_j v_k = v_k v_j$$

等と表す． v_j と v_k の順序は無視する（このとき，グラフ G は無向グラフであるという）．

例 1.1



この例においては $e_1 = \{v_1, v_2\}$ である.

$e_i = \{v_j, v_k\}$ のとき,

- ・ 頂点 v_j と頂点 v_k は隣接している
- ・ 頂点 v_j と辺 e_i は接続している

という.

ループ (両端点が同じ頂点である辺) や多重辺 (2つの頂点 u, v を結ぶ辺が複数ある場合) を持たないグラフを単純グラフという. グラフ G の頂点と辺の交互列 $v_0 e_0 v_1 e_1 \cdots e_{k-1} v_k$ で, すべての $0 \leq i < k$ に対して $e_i = \{v_i, v_{i+1}\}$ を満たすものを, 長さ k の歩道 (walk) という. さらに, $v_i \neq v_j$ ($i \neq j$) が成り立つとき, 即ち頂点がすべて異なる歩道を道 (path) という.

グラフ G のどの2頂点も, ある道で結ばれているとき, G は連結であるという. 以下では $\#V(G)$ が有限な連結単純グラフを主に考えることにする.

頂点 $v \in V(G)$ に対して, v と接続している辺の個数を v の次数 (degree) といい, $\deg(v)$ と表す. 例えば例 1.1 においては, $\deg(v_2) = 3$ である.

定義 1.1 (隣接行列) $\#V(G) = n, V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ とし,

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \{v_i, v_j\} \in E(G) \\ 0 & \text{それ以外のとき} \end{cases} \quad (1)$$

とする. このとき行列 $A = [a_{ij}]_{i,j=1,\dots,n}$ をグラフ G の隣接行列 (*adjacency matrix*) という.

注意: 隣接行列 A は実対称行列である. また G にはループがないことから対角成分については, $a_{i,i} = 0$ ($i = 1, \dots, n$) となる.

例 1.2 例 1.1 のグラフの隣接行列は以下である.

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

このように、グラフ G から隣接行列 A が定まる。一方、 A が与えられれば、これからグラフ G は復元できる。よって標語的には

隣接行列 A はグラフ G のすべてを知っている！

といえる。 A は頂点の番号付けにも依存するが、番号を付け替えてもそれらの隣接行列は互いにユニタリー同値となることに注意する。

離散スペクトル幾何における大きなテーマの一つが、「離散ラプラシアン固有値、固有ベクトルと G の幾何学的、グラフ論的性質との間にある関係を調べる」ことにあるといつてよいであろう。本稿ではグラフ G の幾何学的構造と隣接行列 A のスペクトルとの関係について述べたい。

$V(G)$ 上の関数 $f(v_i)$, ($v_i \in V(G)$) に対して, $x_i = f(v_i)$, $\mathbf{x} = {}^t[x_1, \dots, x_n]$ とする。 A は \mathbf{x} に作用して,

$$(A\mathbf{x})_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j$$

と考えることとする。

注意：

$$(L\mathbf{x})_i = \sum_{j=1}^n \frac{1}{\deg(v_i)} a_{ij}x_j$$

という行列 $L = [b_{ij}]$, $b_{ij} = \frac{1}{\deg(v_i)} a_{ij}$ を推移確率行列といい、しばしば考察の対象となる。また $I - L$ を離散ラプラシアンと呼ぶことがある。

以下では $V(G) = n$ のとき、隣接行列 A の固有値を

$$\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_n$$

と表すことにする。 G が連結であるので、Perron-Frobenius の定理により λ_1 の多重度は 1 であることがわかる。

次の命題は隣接行列の定義から直ちに従う。

命題 1.1 $\#V(G) = n$, $V(G) = \{v_1, \dots, v_n\}$ とする。

(i) G の隣接行列 A の第 i 行の和は v_i の次数 $\deg(v_i)$ に等しい。即ち

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \deg(v_1) \\ \vdots \\ \deg(v_n) \end{bmatrix} \tag{2}$$

が成り立つ。

(ii)

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = \text{tr}A = 0 \quad (3)$$

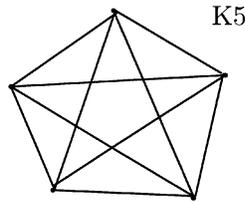
が成り立つ.

1.2 基本的なグラフとその隣接行列の固有値

以下にいくつかの基本的なグラフを紹介する.

1. 完全グラフ K_n

頂点数が n で, n 個の頂点が互いにすべて隣接しているグラフを完全グラフといい, K_n と表す. 例えば K_5 のグラフは以下である.



また K_5 の隣接行列は次のようになる.

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

注意: K_n に対して ${}^t[1, \dots, 1]$ は固有ベクトルであり, このとき対応する固有値は $\text{deg}(v) = n - 1$ である. 例えば K_5 のとき

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 4 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

となる. 実は $\#V(G) = n$ で $n - 1$ を固有値として持てば, $G = K_n$ であることが分かる (定理 3.1, 3.2 を参照).

2. 正則グラフ

G のすべての頂点 v の次数が等しいグラフを正則グラフという. 例えば完全グラフは正

則グラフである. このとき命題 1.1 により

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \deg(v) \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

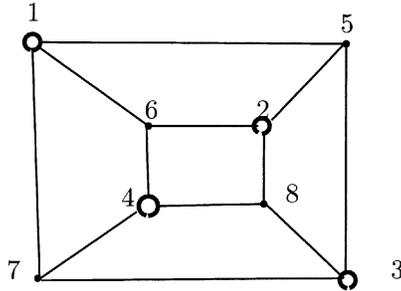
となる. 即ち ${}^t[1, \dots, 1]$ は $\deg(v)$ を固有値とする固有ベクトルである.

3. 2部グラフ

$V(G)$ を 2 つの互いに素な集合 V_1, V_2 に分割し, 任意の辺は V_1 の頂点と V_2 の頂点を結んでいるようにできるとき, $V(G)$ を 2部グラフであるという.

例 1.3

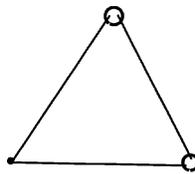
以下は 8 頂点からなる 2部グラフの例である. V_1 は \circ 達の, V_2 は \bullet 達の集合とすると上の定義の分割になっている.



実は次が成り立つことが知られている.

「 G が 2部グラフである $\iff G$ は長さが奇数の閉じた歩道を持たない」

明らかに以下の K_3 は 2部グラフではない (また, 長さ 3 の歩道を持っている!).



例 1.3 のグラフの隣接行列は, 図のように頂点の番号を付ければ以下となる.

$$A = \left(\begin{array}{cccc|cccc} & & & & 1 & 1 & 1 & 0 \\ & & & & 1 & 1 & 0 & 1 \\ & & & & 1 & 0 & 1 & 1 \\ & & & & 0 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 0 & & & & \\ 1 & 1 & 0 & 1 & & & & \\ 1 & 0 & 1 & 1 & & & & \\ 0 & 1 & 1 & 1 & & & & \end{array} \right)$$

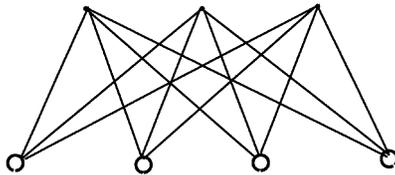
4. 完全2部グラフ $K_{m,n}$

G は2部グラフで V_1, V_2 を定義の条件をみたす $V(G)$ の分割とする. ここで $\#V_1 = m, V_2 = n$ ($m+n = \#V(G)$) とする. 任意の V_1 と V_2 の頂点が隣接しているとき, G を完全2部グラフといい, $K_{m,n}$ と表す.

例 1.4

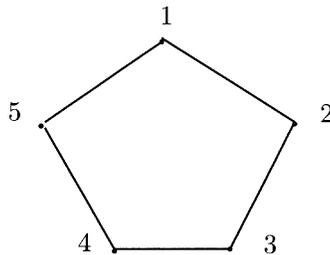
次は完全2部グラフ $K_{3,4}$ のグラフである.

$K_{3,4}$



5. サイクル C_n , 道 P_n

長さが n で次数2の正則グラフをサイクルといい, C_n と表す. 以下は C_5 のグラフである.



C_5 の頂点の番号付けを図のようにすると, 隣接行列は

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

である.

また n 個の頂点からなる道を P_n と表す.

P7



これは P_7 のグラフである.

以下に具体的なグラフの隣接行列の固有値を記す.

1. K_n

$$\begin{pmatrix} n-1 & -1 \\ 1 & n-1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

この表において上段は固有値, 下段は対応する固有値の多重度を表す. いまの場合, 固有値 $n-1$ (多重度 1), -1 (多重度 $n-1$) ということである. 以下の例においても同様である.

2. $K_{m,n}$

$$\begin{pmatrix} \sqrt{mn} & 0 & -\sqrt{mn} \\ 1 & m+n-1 & 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

3. C_n

$$\begin{pmatrix} 2 \cos \frac{2\pi k}{n}, & k = 0, 1, \dots, [\frac{n}{2}] \\ 1 & 2 & \dots & 2 & 1 & (n: \text{偶数}) \\ 1 & 2 & \dots & 2 & 2 & (n: \text{奇数}) \end{pmatrix} \quad (7)$$

4. P_n

$$\begin{pmatrix} 2 \cos \frac{\pi k}{n+1}, & k = 1, \dots, n \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (8)$$

2 固有値と歩道

2.1 隣接行列と歩道

グラフ G の隣接行列 A と G 内の歩道との関係について述べる. これらは A の固有値と G の幾何学的性質との間にある最も基本的な関係のひとつである.

定理 2.1 $\#V(G) = n$ とする. $m \in \mathbf{N}$ に対して A^m の i 行 j 列成分 $(A^m)_{ij}$ は, G 内の長さ m の $v_i - v_j$ 歩道の個数に等しい, 但し $v_i - v_j$ 歩道とは, v_i と v_j を結ぶ歩道のことである.

証明

$$(A^m)_{ij} = \sum_{l_1, \dots, l_m=1, \dots, n} a_{il_1} a_{l_1 l_2} \cdots a_{l_{m-1} j}$$

であり, $a_{il_1} a_{l_1 l_2} \cdots a_{l_{m-1} j} \neq 0$ となるのは

$$a_{il_1} = a_{l_1 l_2} = \cdots = a_{l_{m-1} j} = 1 \quad (9)$$

の時のみである. また (9) であるための必要十分条件は, 頂点の列 $v_i, v_{l_1}, \dots, v_{l_{m-1}}, v_j$ がこの順序で隣接していること, 言い換えれば $v_i - v_j$ 歩道が存在することであるので, $(A^m)_{ij}$ が G 内の $v_i - v_j$ 歩道の個数となることがわかる. ■

定理 2.2 $\#V(G) = n$ とする. このとき以下が成り立つ.

- (i) $(A^2)_{ii} = \deg(v_i)$
- (ii) $\sum_{i=1}^n \lambda_i = \text{tr} A = 0$
- (iii) $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = \text{tr} A^2 = \sum_{i=1}^n \deg(v_i) = 2\#E(G)$
- (iv) $\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 = (G \text{ 内の三角形の個数}) \times 6$

証明 (i) $a_{ij} = a_{ji}$ であり a_{ij} は 0 か 1 なので $a_{ij} a_{ji} = a_{ij}^2 = a_{ij}$ となる. よって命題 1.1

(i) により $(A^2)_{ii} = \sum_{j=1}^n a_{ij} a_{ji} = \sum_{j=1}^n a_{ij} = \deg v_i$ となる.

(ii) は命題 1.1 (ii) である.

(iii) 一つの辺には異なる 2 頂点が付随しているので, $\sum_{i=1}^n \deg(v_i) = 2\#E(G)$ となる. これと上の (i) から従う.

(iv) $\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 = \text{tr} A^3 = \sum_{i=1}^n (A^3)_{ii}$ なので, 定理 2.1 により $\sum_{i=1}^n \lambda_i^3$ はすべての長さ 3 の $v_i - v_i$ 歩道 ($i = 1, \dots, n$) の個数に等しい. 一方一つの三角形には長さ 3 の歩道が六つ対応することから, (iv) が成り立つことがわかる. ■

例 2.1

具体的なグラフに対して, 定理 2.2 を検証してみよう.

1. K_n について

(5) により固有値の二乗和は

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 1 \cdot (n-1)^2 + (n-1) \cdot (-1)^2 = (n-1)n.$$

一方

$$\#E(K_n) = {}_n C_2 = \frac{n(n-1)}{2}$$

となり, (ii) が成り立っている. また三乗和については

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 = 1 \cdot (n-1)^3 + (n-1) \cdot (-1)^3 = n(n-1)(n-2).$$

一方 K_n 内の三角形の個数は n 個の頂点から異なる 3 点を選ぶ場合の数だけあるので ${}_n C_3$ であることに注意すると, 定理 2.2 (iii) の右辺は

$${}_n C_3 \cdot 6 = \frac{n(n-1)(n-2)}{3!} \cdot 6 = n(n-1)(n-2)$$

となる.

2. $K_{m,n}$ について

(6) により隣接行列の固有値の二乗和は

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 1 \cdot (\sqrt{mn})^2 + (m+n-2) \cdot 0 + 1 \cdot (-\sqrt{mn})^2 = 2mn.$$

辺の個数は

$$\#E(G) = \#V_1 \cdot \#V_2 = m \cdot n$$

なので $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2\#E(G)$ となっている. 三乗和については

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 = 1 \cdot (\sqrt{mn})^3 + (m+n-2) \cdot 0 + 1 \cdot (-\sqrt{mn})^3 = 0$$

であり, 一方 $K_{m,n}$ は 2 部グラフなので三角形の個数は 0 である.

2.2 グラフの直径と隣接行列の相異なる固有値

隣接行列 A の相異なる固有値の個数によってグラフの直径を評価する不等式を紹介する. $u, v \in V(G)$ に対し, u と v を結ぶ道の中で最短のものの長さを u と v の距離といい $d(u, v)$ と表す. $u = v$ のときは $d(u, v) = 0$ とする.

$$\text{diam}(G) = \max_{u, v \in V(G)} d(u, v)$$

をグラフ G の直径と呼ぶ.

定理 2.3 グラフ G の隣接行列 A の相異なる固有値の個数を t とする (多重度は考えない). このとき

$$\text{diam}(G) \leq t - 1 \tag{10}$$

が成り立つ.

証明 $\text{diam}(G) \geq t$ とする. すると頂点 $v_i, v_j \in V(G)$ で $d(v_i, v_j) = t$ となるものが存在する. 定理 2.1 により

$$(A^t)_{ij} > 0, \quad (A^k)_{ij} = 0 \quad (1 \leq k \leq t-1)$$

となる. このことより $p(x)$ を次数 t の任意の多項式とすると,

$$(p(A))_{ij} \neq 0 \tag{11}$$

となる. 一方 A の相異なる固有値を $\lambda_{i_1}, \lambda_{i_2}, \dots, \lambda_{i_t}$ とすると, A の最小多項式は t 次式 $\tilde{p}(x) = \prod_{k=1}^t (x - \lambda_{i_k})$ で $\tilde{p}(A) = \mathbf{0}$ となり, 特に $(\tilde{p}(A))_{ij} = 0$ となる. しかしこれは (11) と矛盾する. ■

定理 2.3 が直接主張することは, 直径の大きいグラフの隣接行列の固有値はばらばらになりやすく, また相異なる固有値の個数が小さいグラフの直径は小さくなる, ということである.

例 2.2

いくつかのグラフにおいて定理 2.3 を検証してみる.

1. K_n では (5) により $t = 2$ であり, また明らかに $\text{diam}(K_n) = 1$ である.
2. $K_{m,n}$ では (6) により $t = 3$ であり, 完全 2 部グラフなので $\text{diam}(K_{m,n}) = 2$ である.
3. (7) により, C_8 では $t = 5$ であり, グラフの図より明らかに $\text{diam}(C_8) = 4$, C_5 では $t = 3$ であり, これもグラフの図より明らかに $\text{diam}(C_5) = 2$ である.
4. P_n では (8) により $t = n$ であり, $\text{diam}(P_n) = n - 1$ である.

上記の具体的なグラフでは, 全て定理 2.3 の不等式において等号が成立している.

3 正則グラフ, 2 部グラフのスペクトル

代表的なグラフである正則グラフ, 2 部グラフのスペクトルによる特徴付けを行う.

3.1 正則グラフのスペクトルによる特徴付け

まず次の定理は, 隣接行列の最大固有値と頂点の次数との関係を与える.

定理 3.1 $\#V(G) = n$ とする. このとき

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \deg(v_i) \leq \lambda_1 \leq \max_{1 \leq i \leq n} \deg(v_i) \tag{12}$$

が成り立つ.

証明 $\mathbf{x} = {}^t[1, \dots, 1]$ とする. min-max 原理と命題 1.1 (i) により

$$\lambda_1 \geq \frac{(A\mathbf{x}, \mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=1}^n \deg(v_i)}{n} \quad (13)$$

となる. 次に固有値 λ_1 に対応する固有ベクトルを ${}^t[x_1, \dots, x_n]$ とすると, Perron-Frobenius の定理により $x_i > 0$ ($i = 1, \dots, n$) となることに注意する. いま, $x_k = \max_{1 \leq i \leq n} x_i > 0$ とすると以下が成り立つ.

$$\begin{aligned} \lambda_1 x_k &= (A\mathbf{x})_k = \sum_{i=1}^n a_{ki} x_i \leq x_k \sum_{i=1}^n a_{ki} \\ &= x_k \deg(v_k) \leq x_k \max_{1 \leq i \leq n} \deg(v_i) \end{aligned} \quad (14)$$

よって $\lambda_1 \leq \max_{1 \leq i \leq n} \deg(v_i)$ が示された. ■

上の証明の中の (13) の不等式において等号が成立するのは, $\mathbf{x} = {}^t[1, \dots, 1]$ が固有値 λ_1 に対応する固有ベクトルとなるときなので, 命題 1.1 (i) により $\deg(v_i)$ が全て等しくなる場合, 即ち G が正則グラフであるときである. 次に (14) の中の最初の不等式の等号が成立するための条件を調べる. まず頂点 v_k と隣接している頂点 v_i については $a_{ki} = 1$ であるので, $x_i = x_k$ でなければならない. またこのような v_i に隣接している頂点上の固有ベクトルの値についても x_k と等しくなければならない. グラフが連結であることから, 以下同様にして全ての $i = 1, \dots, n$ に対して $x_i = x_k$ となる. 即ち隣接行列 A は ${}^t[1, \dots, 1]$ を固有ベクトルとして持つことがわかる. 再び命題 1.1 (i) により G は正則グラフとなる. G が正則グラフであれば, 明らかに (12) のどちらの不等式の等号も成立するので以下が示された.

定理 3.2 $\#V(G) = n$ とする. 以下の三つの条件は同値である.

- (i) G は正則グラフである.
- (ii) (12) のどちらかの不等式の等号が成立する.
- (iii) (12) の両方の不等式の等号が成立する.

例 2.3

K_n は $n-1$ 次正則であり, 最大固有値も $n-1$ である. 完全 2 部グラフ $K_{m,n}$ においては, $m \neq n$ のとき正則でなく (12) の中の不等式の等号も成立していない. 正則であることと $m = n$ であることは同値であるが, このとき確かに (12) の中の不等式の等号が成り立つことが確かめられる.

3.2 2部グラフのスペクトルによる特徴付け

2部グラフを隣接行列の固有値によって特徴付ける定理は以下である。

定理 3.3 $\#V(G) = n$ とする。以下の三つの条件は同値である。

- (i) G は 2部グラフである。
- (ii) 固有値は 0 について対称に現れる (多重度を込めて)。
- (iii) $\lambda_n = -\lambda_1$ が成り立つ。即ち最大固有値と最小固有値は 0 について対称である。

略証 (i) と (ii) の同値性のみを示す。 G を 2部グラフであるとし、 λ を隣接行列 A の固有値、 $\mathbf{x} = {}^t[x_1, \dots, x_n]$ を対応する固有ベクトルとする。 $V(G) = V_1 \cup V_2$ を 2部グラフの定義に現れる頂点集合の分割とし、 $V_1 = \{v_1, \dots, v_j\}$ 、 $V_2 = \{v_{j+1}, \dots, v_n\}$ とする。いまベクトル $\tilde{\mathbf{x}} = {}^t[x_1, \dots, x_j, -x_{j+1}, \dots, -x_n]$ をとると、 G が 2部グラフであることから

$$A\tilde{\mathbf{x}} = -\lambda\tilde{\mathbf{x}}$$

となることがわかる。即ち $-\lambda$ も A の固有値となる。 λ に 2 以上の多重度がある場合でも、上の固有ベクトルの作り方から、 $-\lambda$ も同じ多重度を持つことが示せる。次に (ii) を仮定する。すると任意の $k = 0, 1, \dots$ に対して

$$\text{tr}A^{2k+1} = 0$$

となる。定理 2.1 により G には長さが奇数の閉じた歩道は存在しないことになるので、 G は 2部グラフとなる。 ■

参考文献

- [1] N. Biggs. *Algebraic Graph Theory*, Cambridge Univ. Press, 1993.
- [2] D.M. Cvetkovic, M. Doob, I. Gutman, A. Torgasev. *Recent Results in the Theory of Graph Spectra*, North Holland, 1988.
- [3] A. Brouwer, W. Haemers. *Spectra of Graphs*, Springer, 2012