Tampereen yliopisto

Olga Keski-Suni

# VIERUSMATRIISIEN SPEKTREISTÄ

Informaatioteknologian ja viestinnän tiedekunta
Kandidaattitutkielma
Toukokuu 2025

# Tiivistelmä

Olga Keski-Suni: Vierusmatriisien spektreistä
Kandidaattitutkielma
Tampereen yliopisto
Matematiikan ja tilastollisen data-analyysin kandidaattiohjelma
Toukokuu 2025

---

Tässä tutkielmassa tarkastellaan yksinkertaisten, suuntamattomien graafien vierusmatriisien ominaisarvoja. Työn tarkoitus on esitellä keskeisiä lauseita vierusmatriisien ominaisarvoihin liittyen ja johdatella lukijaa graafien spektraaliteoriaan.

Tutkielman alussa esitellään peruskäsitteitä, kuten graafin ja vierusmatriisin määritelmät sekä esitellään tarvittavia apulauseita vierusmatriiseille. Luvussa 3 esitellään graafin spektrin ja Rayleigh'n osamäärän määritelmät sekä todistetaan lauseita yleisille graafeille keskittyen erityisesti graafin suurimpaan ominaisarvoon. Viimeisenä luvussa 4 keskitytään säännöllisten ja kaksijakoisten graafien ominaisarvoihin.

Avainsanat: graafi, graafiteoria, verkkoteoria, vierusmatriisi, ominaisarvo, spektraaliteoria

Tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck -ohjelmalla.

# Sisällys

# 1 Johdanto

Tämä tutkielma käsittelee yksinkertaisten ja suuntaamattomien graafien vierusmatriisien ominaisarvoja. Tutkielmassa todistetaan keskeisiä lauseita vierusmatriisien ominaisarvoille yleisesti sekä erityisesti säännöllisille ja kaksijakoisille graafeille.

Luvussa 2 esitellään tarvittavia esitietoja: graafin ja vierusmatriisin määritelmät sekä kolme vierusmatriiseihin liittyvää apulausetta.

Luvussa 3 siirrytään käsittelemään vierusmatriisien ominaisarvoja. Ensin määritellään graafin spektri ja todistetaan lause, jonka mukaan graafin ominaisarvoista saadaan selvitettyä siinä esiintyvien särmien ja kolmioiden määrä. Tämän jälkeen määritellään vektorin $v$ Rayleigh'n osamäärä matriisin $A$ suhteen, joka on erittäin tärkeä käsite myöhempien lauseiden todistuksissa. Todistetaan, että Rayleigh'n osamäärää rajoittaa alhaalta matriisin pienin ominaisarvo ja ylhäältä sen suurin ominaisarvo. Tämän jälkeen päästään todistamaan kaksi keskeistä lausetta, jotka kirjallisuudessa usein esitetään osana tunnettua Perronin–Frobeniuksen lausetta. Näiden lauseiden mukaan yhtenäisen graafin suurin ominaisarvo on yksinkertainen, sitä vastaa alkioiltaan positiivinen ominaisvektori ja graafin kaikki muut ominaisarvot ovat itseisarvoltaan sitä pienempiä. Seuraavaksi osoitetaan, että graafin suurinta ominaisarvoa rajoittaa graafin maksimiaste ja keskimääräinen aste. Lisäksi osoitetaan, että graafin suurin ominaisarvo ei voi olla pienempi kuin sen aligraafin suurin ominaisarvo.

Luvussa 4 käsitellään säännöllisten ja kaksijakoisten graafien ominaisarvoja. Aliluvussa 4.1 todistetaan $k$-säännölliset graafit karakterisoiva lause. Tämän jälkeen osoitetaan, että $k$-säännöllisen graafin ominaisarvoista saadaan pääteltyä myös sen komplementtigraafin ominaisarvot. Lopuksi määritetään täydellisen graafin spektri. Aliluvussa 4.2 karakterisoidaan kaksijakoiset graafit ja määritetään täydellisen kaksijakoisen graafin spektri.

Lukijan odotetaan hallitsevan graafiteorian ja lineaarialgebran perusteet. Graafien matriisiesitysten ennalta tunteminen ei kuitenkaan ole välttämätöntä. Lähteenä tässä tutkielmassa on käytetty pääasiassa Knauerin kirjan *Algebraic Graph Theory: Morphisms, Monoids and Matrices* lukuja 2, 5 ja 8.

# 2 Esitietoja

Tässä luvussa käsitellään tarvittavia esitietoja graafien matriisiesityksiin liittyen ennen kuin siirrytään käsittelemään niiden ominaisarvoja ja -vektoreita. Määritellään muistutukseksi graafi ja sen vierusmatriisi sekä esitellään kolme apulausetta.

**Määritelmä 2.1** (vrt. [1, s. 2])**.** Graafi $G$ on pari $(V(G), E(G))$, missä joukon $V(G)$ alkiot ovat *solmuja* ja joukon $E(G)$ alkiot ovat *särmiä*. Särmä on järjestämätön pari $\{v_1, v_2\} \in V^2$.

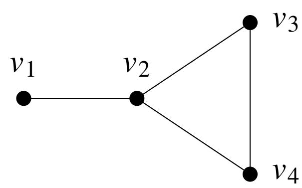
Graafi on *yksinkertainen*, kun kahden solmun välillä voi olla korkeintaan yksi särmä. Jos särmät olisivat järjestettyjä pareja, niin graafi olisi *suunnattu*. *Luuppi* on graafin solmusta itseensä menevä särmä. Tästä eteenpäin graafilla tarkoitetaan aina yksinkertaista ja suuntamatonta graafia, jossa ei ole luuppeja. Myös särmättömät graafit voidaan sulkea pois tarkasteluista.

**Määritelmä 2.2** (vrt. [1, s. 313])**.** Olkoon $G = (V, E)$ graafi ja $n = |V|$. Graafin G *vierusmatriisi* on $n \times n$-matriisi, jonka rivin $i$ ja sarakkeen $j$ alkio on

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{kun } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases}$$

**Esimerkki 2.1.** Graafin $G = (\{v_1, v_2, v_3, v_4\}, \{\{v_1, v_2\}, \{v_2, v_3\}, \{v_2, v_4\}, \{v_3, v_4\}\})$ vierusmatriisi on

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




**Kuva 2.1.** Graafi $G$.

Graafeille on olemassa muitakin matriisiesityksiä kuin vierusmatriisi, kuten Laplacen matriisi ja tapausmatriisi, mutta näitä ei käsitellä tässä tutkielmassa. Koska vierusmatriisit ovat reaalisia, niin tästä eteenpäin oletetaan kaikkien käsiteltävien matriisien olevan reaalisia.

Käytetään graafin $G$ vierusmatriisista merkintää $A(G)$. *Positiivisella (epänegatiivisella) matriisilla* tarkoitetaan sellaista matriisia, jonka kaikki alkiot ovat positiivisia (epänegatiivisia). Olkoon $\mathbf{v} = (v_1, \ldots, v_n) \in \mathbb{R}^n$. Vektorista, jonka alkiot ovat vektorin $\mathbf{v}$ alkioiden itseisarvoja, käytetään merkintää $|\mathbf{v}| = (|v_1|, \ldots, |v_n|)$. Vektorin $\mathbf{v}$ normista käytetään tavanomaista merkintää $\|\mathbf{v}\|$.

Seuraavia aputuloksia tarvitaan vierusmatriisien ominaisarvoja käsitellessä.

**Apulause 2.1.** Olkoon $G = (V, E)$ graafi, $A$ sen vierusmatriisi ja $r \in \mathbb{N}$. Käytetään matriisin $A^r$ alkioista merkintää $a_{ij}^{(r)}$. Tällöin solmusta $v_i$ solmuun $v_j$ on $a_{ij}^{(r)}$ kappaletta $r$-pituisia polkuja.

*Todistus* (vrt. [3, s. 33]). Todistetaan lause induktiolla luvun $r$ suhteen.

*Perusaskel.* Kun $r = 0$, niin saadaan identiteettimatriisi $A^0$. Graafissa $G$ on $n$ kappaletta nollan pituisia eli tyhjiä polkuja, yksi kustakin solmusta itseensä. Siispä väite on tosi.

*Induktioaskel.* Tehdään induktio-oletus, että jollakin $r \in \mathbb{N}$ matriisin $A^r$ alkiosta $a_{ih}^{(r)}$ saadaan $r$-pituisten polkujen määrä solmusta $v_i$ solmuun $v_h$. Olkoon $n = |V|$. Oletetaan, että $v_j$ on solmun $v_h$ vierussolmu. Koska solmujen $v_h$ ja $v_j$ välillä on yhden särmän mittainen polku, niin solmujen $v_i$ ja $v_j$ välisiä $(r + 1)$-pituisia polkuja on induktio-oletuksen ja tuloperiaatteen nojalla $a_{ih}^{(r)} a_{hj}$ kappaletta. Kun käydään läpi kaikki mahdolliset solmut $v_h$, missä $h = 1, 2, \ldots, n$, saadaan $(r + 1)$-pituisia polkuja siis yhteensä $\sum_{k=1}^{n} a_{ik}^{(r)} a_{kj}$ kappaletta. Lisäksi matriisitulon määritelmän mukaan

$$a_{ij}^{(r+1)} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}^{(r)} a_{kj},$$

joten väite on tosi. □

Graafin $G$ *komponentti* on sen yhtenäinen aligraafi. Seuraava apulause valaisee yhteyttä graafin komponenttien ja sen vierusmatriisin rakenteen välillä.

**Apulause 2.2.** Graafilla $G$ on $s$ komponenttia $G_1, \ldots, G_s$, jos ja vain jos on olemassa sellainen permutaatiomatriisi $P$, että

$$P\,A(G)\,P^{-1} = \begin{bmatrix} A(G_1) & & & 0 \\ & A(G_2) & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & A(G_s) \end{bmatrix}.$$

*Todistus* (vrt. [3, s. 29]). Permutaatiomatriisin rivit ovat identiteettimatriisin rivit sopivassa järjestyksessä. Matriisi $P$ permutoi vasemmalta kerrottuna matriisin $A(G)$ rivit ja $P^{-1}$ permutoi oikealta kerrottuna sen sarakkeet. Permutoiminen siis vastaa graafin solmujen uudelleen numeroimista.

Yhtenäisyys määrittää ekvivalenssirelaation joukossa $V$, joten $V$ jakautuu ekvivalenssiluokkiin $V_1, \ldots, V_s$. Nämä solmujoukot indusoivat yhtenäiset aligraafit $G_1, \ldots, G_s$. Graafin solmut voidaan numeroida siten, että ensimmäisenä on aligraafin $G_1$ solmut, toisena aligraafin $G_2$ solmut ja niin edelleen. Tuloksena saadaan lohkodiagonaalisessa muodossa oleva vierusmatriisi. □

**Apulause 2.3.** Matriisin $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ominaisarvoille $\lambda_i$ on voimassa

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = \mathrm{tr}(A).$$

*Todistus.* Ks. [2, s. 24] □

# 3 Yleisiä tuloksia vierusmatriiseille

Graafin spektriksi kutsutaan sen vierusmatriisiin spektriä, joka koostuu matriisin ominaisarvoista monikertoineen. Spektriä ja erityisesti suurinta ominaisarvoa tarkastelemalla saadaan selville varsin paljon hyödyllistä tietoa graafin ominaisuuksista.

Suuntamattoman, yksinkertaisen graafin vierusmatriisi on aina reaalinen ja symmetrinen, joten sen ominaisarvot ovat myös reaalisia. Vierusmatriisi on myös aina diagonalisoituva, joten sen jokaisella ominaisarvolla on yhtä suuri algebrallinen ja geometrinen kertaluku. Voidaan siis lyhyesti puhua ominaisarvon kertaluvusta.

Graafin $G$ ominaisarvon $\lambda$ kertaluvusta käytetään merkintää $m(\lambda)$. Vierusmatriisin $A(G)$ pienimmästä ominaisarvosta käytetään merkintää $\lambda(G)$ ja suurimmasta merkintää $\Lambda(G)$. Graafin spektri on vielä syytä määritellä täsmällisesti:

**Määritelmä 3.1** (vrt. [3, s. 36])**.** Olkoot $\lambda_i$, $i = 1, \ldots, n$ matriisin $A$ ominaisarvot suuruusjärjestyksessä. Merkitään $\lambda = \lambda_1 < \cdots < \lambda_n = \Lambda$. Graafin $G$ *spektri* on sen vierusmatriisin $A$ ominaisarvojen joukko monikertoineen:

$$\mathrm{Spec}(G) = \begin{pmatrix} \lambda & \ldots & \lambda_i & \ldots & \Lambda \\ m(\lambda) & \ldots & m(\lambda_i) & \ldots & m(\Lambda) \end{pmatrix}.$$

Suurinta ominaisarvoa $\Lambda$ kutsutaan graafin $G$ *spektraalisäteeksi*.

Graafin ominaisarvojen avulla saadaan muun muassa tietoa graafin rakenteesta.

**Lause 3.1.** *Olkoon $G = (V, E)$ graafi ja $\lambda_i$ sen ominaisarvot. Tällöin*

(i)
$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 0,$$

(ii)
$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 = 2|E| \quad ja$$

(iii)
$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^3 = 6k,$$

*missä $k$ on graafissa $G$ olevien kolmioiden lukumäärä.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 37]). Olkoon $A = A(G)$.

(i) Graafissa $G$ ei ole luuppeja, joten sen vierusmatriisin jälki on 0. Lauseen 2.3 perusteella siis $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = \mathrm{tr}(A) = 0$.

(ii) Lauseen 2.1 perusteella matriisin $A^2$ diagonaalilla on graafin $G$ solmujen asteet. Koska $A\mathbf{v} = \lambda_i \mathbf{v} \Rightarrow A^k\mathbf{v} = \lambda_i^k \mathbf{v}$ kaikilla $k \in \mathbb{Z}_+$, niin lauseen 2.3 perusteella

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 = \mathrm{tr}(A^2) = \sum_{v \in V} \deg(v) = 2|E|.$$

(iii) Edelleen lauseen 2.1 perusteella matriisin $A^3$ diagonaalialkiot kertovat kustakin solmusta lähtevien kolmisärmäisten polkujen eli kolmioiden määrän. Koska jokainen kolmio koostuu kolmesta eri solmusta ja jokaisessa diagonaalialkiossa esiintyy sama, eri suuntiin kulkeva kolmio kahteen kertaan, niin kolmioiden määrä on

$$k = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^3,$$

josta saadaan

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^3 = 6k.$$

□

Silloin kun graafin ominaisarvojen laskeminen on hankalaa, voi olla mielekkäämpää laskea niille pelkkiä ylä- ja alarajoja. Eräs apuväline näiden rajojen löytämiseen on niin kutsuttu Rayleigh'n osamäärä.

**Määritelmä 3.2** (vrt. [3, s. 161])**.** Olkoon $A$ symmetrinen $n \times n$-matriisi ja $\mathbf{v} = (v_1, \ldots, v_n) \in \mathbb{R}^n$. Lukua

$$R(A, \mathbf{v}) = \frac{\mathbf{v}^\top A\mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}} = \frac{\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} v_i v_j}{\sum_{i=1}^{n} v_i^2}$$

kutsutaan vektorin $\mathbf{v}$ *Rayleigh'n osamääräksi* matriisin $A$ suhteen. Jos sekaannuksen vaaraa ei ole, merkitään $R(A, \mathbf{v}) = R(\mathbf{v})$.

Rayleigh'n osamäärä osoittautuukin pian erittäin hyödylliseksi työkaluksi, sillä sitä rajoittaa ylhäältä matriisin suurin ominaisarvo ja alhaalta sen pienin ominaisarvo.

**Lause 3.2.** *Jos $A$ on symmetrinen matriisi, niin kaikilla $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ on voimassa*

$$\lambda = \lambda(A) \leq R(\mathbf{v}) \leq \Lambda(A) = \Lambda.$$

*Lisäksi*

$$\lambda = R(\mathbf{v}) \quad tai \quad \Lambda = R(\mathbf{v}),$$

*jos ja vain jos* $\mathbf{v}$ *on ominaisarvoa* $\lambda$ *tai* $\Lambda$ *vastaava ominaisvektori.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 161–162]). Olkoot $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n$ maksimaalinen ortonormaali joukko matriisin $A$ ominaisvektoreita, joka samalla muodostaa ortonormaalin kannan vektoriavaruudelle $\mathbb{R}^n$. Valitaan mielivaltainen lineaarikombinaatio $\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{u}_i$, jolloin

$$R(\mathbf{v}) = \frac{\mathbf{v}^\top A \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{u}_i^\top A \alpha_i \mathbf{u}_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{u}_i^\top \alpha_i \mathbf{u}_i} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{u}_i^\top \lambda_i \alpha_i \mathbf{u}_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{u}_i^\top \alpha_i \mathbf{u}_i} = \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i \alpha_i^2}{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2}.$$

Tästä seuraa, että

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^n \lambda \alpha_i^2}{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2} \overset{\lambda \leq \lambda_i}{\leq} R(\mathbf{v}) \overset{\lambda_i \leq \Lambda}{\leq} \Lambda.$$

Jos $\mathbf{v}$ on ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori, niin

$$R(\mathbf{v}) = \frac{\mathbf{v}^\top A \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}^\top \Lambda \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}} = \Lambda.$$

Jos $\mathbf{v}$ puolestaan ei ole ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori, niin matriisilla $A$ on ainakin kaksi erisuurta ominaisarvoa eli $\lambda < \Lambda$ ja $\lambda \leq R(\mathbf{v}) < \Lambda$. Pienimmän ominaisarvon $\lambda$ tapaus todistetaan vastaavasti.

□

**Seuraus 3.1.** *Graafille* $G$ *on voimassa* $\Lambda(G) > 0$.

*Todistus.* Olkoon $\mathbf{v} = (1, \ldots, 1) = \mathbf{1}$ ja $n$ graafin $G$ solmujen määrä. Koska $A = A(G)$ on epänegatiivinen ja se ei ole nollamatriisi, niin lauseen 3.2 perusteella

$$\Lambda(G) \geq R(A, \mathbf{v}) = \frac{\mathbf{1}^\top A \mathbf{1}}{\mathbf{1}^\top \mathbf{1}} = \frac{\sum_{i,j=1}^n a_{ij}}{n} > 0.$$

□

Seuraavat kaksi lausetta esitetään yleensä osana niin kutsuttua Perronin–Frobeniuksen lausetta, joka on eräs keskeisimmistä tuloksista graafien spektraaliteoriassa. Lauseen tarkka sisältö vaihtelee hieman eri lähteiden välillä. Alun perin lause käsitteli vain positiivisia matriiseja, mutta siitä kehiteltiin myöhemmin yleisempi versio myös epänegatiivisille matriiseille. Tämä epänegatiivisten matriisien versio on luonnollisesti hyödyllisempi graafiteoriassa, sillä sitä voidaan soveltaa vierusmatriiseihin.

**Lause 3.3.** *Olkoon $A$ symmetrinen ja epänegatiivinen matriisi. Olkoon $\Lambda = \Lambda(A)$, $\lambda = \lambda(A)$ ja $\mathbf{v} = (v_1, \ldots, v_n) \in \mathbb{R}^n$ ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori. Tällöin $|\mathbf{v}| = (|v_1|, \ldots, |v_n|)$ on myös ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori ja $|\lambda| \leq \Lambda$.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 162]). Koska $a_{ij} \geq 0$ kaikilla $i, j \in \{1, \ldots, n\}$, niin määritelmän 3.2 mukaisesti $R(|\mathbf{w}|) \geq R(\mathbf{w})$ ja $R(|\mathbf{w}|) \geq 0$ kaikilla $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$. Lauseen 3.2 perusteella

$$R(|\mathbf{w}|) \leq \Lambda \Leftrightarrow -R(|\mathbf{w}|) \geq -\Lambda \Rightarrow -R(|\mathbf{w}|) \leq R(\mathbf{w}).$$

Kun

$$(*) \qquad A\mathbf{w} = \lambda \mathbf{w},$$

niin edelleen

$$-\Lambda \leq -R(|\mathbf{w}|) \leq \lambda \overset{(*)}{=} R(\mathbf{w}) \leq R(|\mathbf{w}|) \leq \Lambda$$

ja siis $|\lambda| \leq \Lambda$.

Jos $\mathbf{v}$ on ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori, niin $\Lambda = R(\mathbf{v}) \leq R(|\mathbf{v}|) \leq \Lambda$. Tästä saadaan jälleen lauseen 3.2 avulla pääteltyä, että myös $|\mathbf{v}|$ on ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori. □

**Lause 3.4.** *Olkoon $G$ yhtenäinen graafi. Tällöin graafin $G$ suurin ominaisarvo $\Lambda$ on yksinkertainen. Lisäksi ominaisarvoa $\Lambda$ vastaavan jokaisen ominaisvektorin alkiot ovat nollasta poikkeavia ja keskenään saman merkkisiä.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 162–163]). Koska $G$ on yhtenäinen, niin lauseen 2.2 perusteella sen vierusmatriisia $A$ ei voi esittää lohkodiagonaalisessa muodossa.

(a) Osoitetaan ensin, että vektorin $\mathbf{v}$ alkiot ovat nollasta poikkeavia, kun $A\mathbf{v} = \Lambda\mathbf{v}$.

Tehdään vastaoletus, että vektorilla $\mathbf{v} = (v_1, \ldots, v_s, v_{s+1}, \ldots, v_n)$ on nollan suuruisia alkioita. Graafin $G$ solmut voidaan numeroida siten, että $v_{s+1}, \ldots, v_n = 0$. Lauseen 3.3 perusteella $A|\mathbf{v}| = \Lambda|\mathbf{v}|$, joten

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\,|v_j| = \Lambda|v_i| = 0 \quad \text{kaikilla } i = s+1, \ldots, n.$$

Auki kirjoitettuna siis

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1s} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} & \dots & a_{ss} & \dots & a_{sn} \\ a_{(s+1)1} & \dots & a_{(s+1)s} & \dots & a_{(s+1)n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{ns} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |v_1| \\ \vdots \\ |v_s| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \Lambda \begin{bmatrix} |v_1| \\ \vdots \\ |v_s| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Koska $A$ on epänegatiivinen ja alkiot $|v_i|, i \leq s$ ovat positiivisia, niin matriisin vasemmassa alakulmassa on nyt nollista koostuva lohko. Koska $A$ on symmetrinen, niin sama pätee myös matriisin oikeaan yläkulmaan. Tällöin $A$ olisi kuitenkin lohkodiagonaalimuodossa, mikä on ristiriita.

(b) Nyt osoitetaan, että kaikilla vektorin $\mathbf{v}$ alkioilla on sama etumerkki. Merkitään

$$N_+(\mathbf{v}) := \{i \mid v_i > 0\},$$
$$N_-(\mathbf{v}) := \{j \mid v_j < 0\},$$

jolloin kohdan (a) perusteella

$$N_+(\mathbf{v}) \cup N_-(\mathbf{v}) = \{1, \dots, n\}.$$

Lauseiden 3.2 ja 3.3 perusteella $\Lambda = R(\mathbf{v}) = R(|\mathbf{v}|)$, eli

$$\sum a_{ij} v_i v_j = \sum a_{ij} |v_i||v_j|.$$

Kun $i \in N_+(\mathbf{v})$ ja $j \in N_-(\mathbf{v})$, niin selvästi $a_{ij} = 0$, kun $v_i v_j < 0$. Tämä tuottaisi jälleen lohkodiagonaalisen matriisin. Siispä $N_+(\mathbf{v}) = \emptyset$ tai $N_-(\mathbf{v}) = \emptyset$.

(c) Jotta $m(\Lambda) > 1$, niin täytyisi olla olemassa ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori $\mathbf{u}$, joka on ortogonaalinen vektorin $\mathbf{v}$ kanssa eli $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$. Tällöin vektorilla $\mathbf{u}$ täytyisi olla sekä negatiivisia että positiivisia alkioita. Tämä ei ole kohdan (b) perusteella mahdollista, joten $\Lambda$ on yksinkertainen ominaisarvo.

□

Minkä tahansa graafin suurin ominaisarvo on siis positiivinen, sitä vastaa epänegatiivinen ominaisvektori ja sen vastaluku antaa alarajan graafin pienimmälle ominaisarvolle. Yhtenäisellä graafilla suurin ominaisarvo on lisäksi yksinkertainen ja sitä vastaa positiivinen ominaisvektori.

Graafin suurimmasta ominaisarvosta saadaan myös ylä- ja alarajat graafin minimi- ja maksimiasteille.

**Lause 3.5.** *Olkoon $G = (V, E)$ n-solmuinen graafi, jonka suurin ominaisarvo on $\Lambda$ sekä $\delta$ sen minimiaste, $d$ keskimääräinen aste ja $\Delta$ maksimiaste. Tällöin*

$$\delta \leq d \leq \Lambda \leq \Delta.$$

*Todistus* (vrt. [3, s. 171]). Olkoon $A = A(G)$ ja $\mathbf{u} = \mathbf{1}$. Lauseen 3.2 perusteella

$$\Lambda \geq \frac{\mathbf{u}^\top A\mathbf{u}}{\mathbf{u}^\top \mathbf{u}} = \frac{\mathbf{1}^\top A\mathbf{1}}{\mathbf{1}^\top \mathbf{1}} = \frac{\sum_{v\in V} \deg(v)}{n} = d \geq \delta.$$

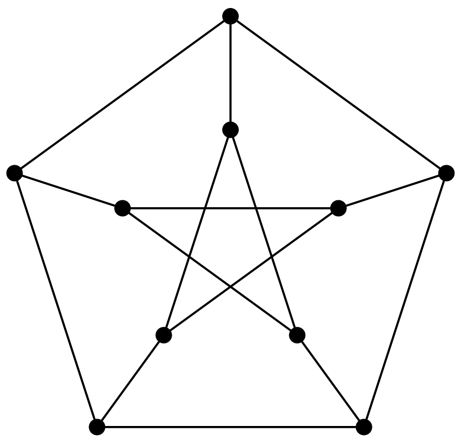
Olkoon $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori, jonka alkioiden voidaan lauseen 3.3 perusteella olettaa olevan epänegatiivisia. Koska ominaisvektori ei voi olla nollavektori, niin vektorin $\mathbf{x}$ suurin alkio on positiivinen. Merkitään $x_p = \max\{x_1, \ldots, x_n\}$. Nyt

$$\Lambda x_p = (A\mathbf{x})_p = \sum_{j=1}^{n} a_{pj} x_j \leq x_p \sum_{j=1}^{n} a_{pj} \leq x_p \Delta.$$

Siispä $\Lambda \leq \Delta$. □

**Esimerkki 3.1.** Petersenin graafin $P$ spektri on

$$\mathrm{Spec}(P) = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 3 \\ 4 & 5 & 1 \end{pmatrix}.$$



**Kuva 3.1.** Petersenin graafi.

Ominaisarvoista saadan lauseen 3.1 mukaisesti laskettua graafin särmien määrä

$$\frac{1}{2}(3^2 + 5 \cdot 1^2 + 4 \cdot (-2)^2) = \frac{1}{2}(9 + 5 + 16) = 15$$

ja kolmioiden määrä

$$\frac{1}{6}(3^3 + 5 \cdot 1^3 + 4 \cdot (-2)^3) = \frac{1}{6}(27 + 5 - 32) = 0.$$

Huomataan, että suurin ominaisarvo 3 on yksinkertainen ja että pienimmälle ominaisarvolle on voimassa $|\lambda(P)| = |-2| < 3 = \Lambda(P)$. Lisäksi graafin keskimääräinen aste ja maksimiaste on $3 = \Lambda(P)$.

Seuraavasta lauseesta käy ilmi, että graafin suurin ominaisarvo ei kasva, kun siitä poistetaan särmiä tai solmuja.

**Lause 3.6.** *Olkoon $H$ graafin $G$ aligraafi. Tällöin $\Lambda(H) \leq \Lambda(G)$. Jos $H$ on solmuindusoitu aligraafi, niin tällöin lisäksi $\lambda(G) \leq \lambda(H)$.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 169]). Aligraafin muodostuksen voi jakaa kahteen vaiheeseen:

(1) Oletetaan, että $H$ on muodostettu graafista $G$ poistamalla $p$ solmua ilman, että jäljelle jäävien solmujen välisiä särmiä on poistettu. Graafi $H$ on tällöin solmuindusoitu aligraafi. Numeroidaan graafin $G$ solmut siten, että poistettavat solmut ovat siinä viimeisenä. Merkitään $m = n - p$. Matriisi $A(H) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ saadaan nyt matriisista $A(G) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ poistamalla siitä $p$ viimeistä riviä ja saraketta. Olkoon $\mathbf{v} = (v_1, \ldots, v_m)$, $\|\mathbf{v}\| = 1$ graafin $H$ ominaisvektori, joka vastaa ominaisarvoa $\Lambda(H)$ ja $\hat{\mathbf{v}} = (\hat{v}_1, \ldots, \hat{v}_n) = (v_1, \ldots, v_m, 0, \ldots, 0)$. Käytetään merkintää $a_{ij}, i, j = 1, \ldots, n$ matriisin $A(G)$ alkioista. Lauseen 3.2 ja määritelmän 3.2 perusteella nyt

$$\Lambda(H) = R(A(H), \mathbf{v}) = \sum_{i,j=1}^{m} a_{ij} v_i v_j = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} \hat{v}_i \hat{v}_j = R(A(G), \hat{\mathbf{v}}) \leq \Lambda(G).$$

Vastaavasti, kun $\mathbf{u}$ on ominaisarvoa $\lambda(H)$ vastaava ominaisvektori ja $\hat{\mathbf{u}} = (\hat{u}_1, \ldots, \hat{u}_n) = (u_1, \ldots, u_m, 0, \ldots, 0)$, niin

$$\lambda(G) \leq R(A(G), \hat{\mathbf{u}}) = R(A(H), \mathbf{u}) = \lambda(H).$$

(2) Oletetaan, että $H$ on muodostettu graafista $G$ poistamalla pelkkiä särmiä. Matriisit $A(G)$ ja $A(H)$ pysyvät nyt saman kokoisina. Todistetaan väite induktiolla poistettujen särmien lukumäärän suhteen.

*Perusaskel.* Olkoon $H = G \setminus e$, missä $e = \{x_i, x_j\} \in E(G)$. Olkoon $\mathbf{v} = (v_1, \ldots, v_n)$ graafin $H$ ominaisvektori, joka vastaa ominaisarvoa $\Lambda(H)$ ja $\|\mathbf{v}\| =$

1. Lauseen 3.3 nojalla $\mathbf{v}_l \geq 0$ kaikilla $l = 1, \ldots, n$. Lauseen 3.2 ja määritelmän 3.2 perusteella tällöin

$$\Lambda(H) = R(A(H), \mathbf{v}) = R(A(G), \mathbf{v}) - 2v_i v_j \leq R(A(G), \mathbf{v}) \leq \Lambda(G).$$

*Induktioaskel.* Tehdään induktio-oletus, että $\Lambda(H) \leq \Lambda(G)$, kun graafi $H$ on muodostettu graafista $G$ poistamalla $p$ särmää. Olkoon nyt $F = H \setminus e$, missä $e = \{x_i, x_j\} \in E(H)$. Olkoon $\mathbf{u}$ ominaisarvoa $\Lambda(F)$ vastaava ominaisarvo ja $\|\mathbf{u}\| = 1$. Jälleen

$$\Lambda(F) = R(A(F), \mathbf{u}) = R(A(H), \mathbf{u}) - 2u_i u_j \leq R(A(H), \mathbf{u}) \leq \Lambda(H) \leq \Lambda(G).$$

$\square$

# 4 Erikoisia graafeja

Tässä luvussa tarkastellaan säännöllisiä ja kaksijakoisia graafeja. Molemmat ovat suhteellisen yksinkertaisia graafeja, joten niiden spektreistä saadaan luonnollisesti selville yksityiskohtaisempaa tietoa.

## 4.1 Säännölliset graafit

Graafi on *$k$-säännöllinen*, jos sen jokaisen solmun aste on $k$. Seuraava lause osoittaa, että $k$-säännöllisyys on mahdollista nähdä graafin spektristä.

**Lause 4.1.** *Olkoon $G$ graafi ja $\Lambda = \Lambda(G)$. Seuraavat ehdot ovat yhtäpitäviä:*

(i) *Graafi $G$ on $k$-säännöllinen,*

(ii) $\Lambda = k$,

(iii) $\mathbf{v} = (1, \ldots, 1)$ *on ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori.*

*Lisäksi graafilla $G$ on täsmälleen $r = m(\Lambda)$ komponenttia.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 164]). (i) $\Rightarrow$ (ii): Koska $G$ on $k$-säännöllinen, niin sen vierusmatriisin $A$ jokaisen rivin summa on $k$, eli $A\mathbf{v} = k\mathbf{v}$, kun $\mathbf{v} = (1, \ldots, 1)$. Tällöin $k$ on vektoria $\mathbf{v}$ vastaava ominaisarvo. Koska $k$ on graafin $G$ keskimääräinen aste ja maksimiaste, niin lauseen 3.5 perusteella $k \leq \Lambda \leq k$ eli $\Lambda = k$.

(ii) $\Rightarrow$ (iii): Kun $\mathbf{v} = (1, \ldots, 1)$, niin

$$k = \frac{1}{n} \sum a_{ij} = R(\mathbf{v}).$$

Lauseen 3.2 perusteella $\mathbf{v}$ on nyt ominaisarvoa $\Lambda = k$ vastaava ominaisvektori.

(iii) $\Rightarrow$ (i): Oletuksen nojalla $A\mathbf{v} = \Lambda\mathbf{v}$. Koska $\mathbf{v} = \mathbf{1}$ on ominaisarvoa $\Lambda$ vastaava ominaisvektori, niin jokaiselle riville $i$ on voimassa $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} = \Lambda$. Täten jokaisen solmun aste on $\Lambda$.

Jos $G$ on yhtenäinen, niin lauseen 3.4 perusteella $m(\Lambda) = 1$. Jos $G$ ei ole yhtenäinen, niin sen jokaisella yhtenäisellä komponentilla on yksinkertainen ominaisarvo $\Lambda = k$. Yhteensä siis $m(\Lambda) = r$, kun graafilla $G$ on $r$ komponenttia.

□

Säännöllisen graafin ominaisarvoista saadaan pääteltyä myös sen komplementtigraafin ominaisarvot.

**Lause 4.2.** *Olkoon $G$ $k$-säännöllinen graafi, jolla on $n$ solmua ja jonka ominaisarvot ovat $k = \lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$. Tällöin graafilla $G$ ja sen komplementtigraafilla $\overline{G}$ on samat ominaisvektorit, ja komplementtigraafin $\overline{G}$ ominaisarvot ovat $n-1-k, -1-\lambda_2, \ldots, -1-\lambda_n$.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 91]). Komplementtigraafin $\overline{G}$ vierusmatriisi on $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$, missä $J$ on $n \times n$-ykkösmatriisi ja $I$ on $n \times n$-identiteettimatriisi. Olkoon $\{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n\}$ ortonormaali joukko matriisin $A(G)$ ominaisvektoreita. Lauseen 4.1 perusteella voidaan valita $\mathbf{u}_1 = (1, \ldots, 1)$. Komplementtigraafi $\overline{G}$ on $(n-1-k)$-säännöllinen, joten $\mathbf{u}_1$ on myös sen ominaisvektori vastaten ominaisarvoa $n-1-k$.

Kun $2 \leq i \leq n$, niin ominaisvektori $\mathbf{u}_i = (u_{i1}, \ldots, u_{in})$ on ortogonaalinen vektorin $\mathbf{u}_1$ kanssa ja siis $u_{i1} + \cdots + u_{in} = 0$. Tästä saadaan laskettua

$$A(\overline{G})\mathbf{u}_i = (J - I - A(G))\mathbf{u}_i = \mathbf{0} - \mathbf{u}_i - \lambda_i \mathbf{u}_i = (-1-\lambda_i)\mathbf{u}_i.$$

Siispä $\mathbf{u}_i$ on graafin $A(\overline{G})$ ominaisvektori, ja sitä vastaa ominaisarvo $-1-\lambda_i$. □

Graafi on *täydellinen*, jos sen jokaisesta solmusta lähtee särmä kaikkiin muihin solmuihin. Täydellisen graafin $K_n$ spektri on varsin helppo määrittää.

**Lause 4.3.** *Täydelliselle graafille $K_n$ on voimassa*

$$\operatorname{Spec}(K_n) = \begin{pmatrix} -1 & n-1 \\ n-1 & 1 \end{pmatrix}.$$

*Todistus* (vrt. [3, s. 39]). Tarkastellaan matriisin $A = A(K_n)$ karakteristista polynomia hyödyntäen rivi- ja sarakemuunnoksia sekä yläkolmiomatriisin determinantin laskusääntöä:

$$\begin{aligned} &|\lambda I - A| \\ &= \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \ldots & \ldots & -1 \\ -1 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & -1 \\ -1 & \ldots & \ldots & -1 & \lambda \end{vmatrix} \end{aligned}$$

$$\overset{\text{(vähennetään rivi 1 muista riveistä)}}{=} \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & \dots & -1 \\ -1-\lambda & \lambda+1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ -1-\lambda & 0 & \dots & 0 & \lambda+1 \end{vmatrix}$$

$$\overset{\text{(lisätään sarakkeet 2,...,n sarakkeeseen 1)}}{=} \begin{vmatrix} -(n-1)+\lambda & -1 & \dots & \dots & -1 \\ 0 & \lambda+1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \lambda+1 \end{vmatrix}$$

$$=(-(n-1)+\lambda)(\lambda+1)^{n-1}.$$

Nähdään, että $-1$ on $(n-1)$-kertainen nollakohta ja $n-1$ on yksinkertainen nollakohta.

□

## 4.2 Kaksijakoiset graafit

Graafi on *kaksijakoinen*, kun sen solmut voidaan jakaa kahteen erilliseen osajoukkoon siten, että jokaisen särmän päätesolmut kuuluvat eri osajoukkoihin. Kaksijakoinen graafi on *täydellinen*, kun kahden solmun välillä on särmä täsmälleen silloin, kun solmut kuuluvat eri osajoukkoihin.

Seuraava lause antaa kätevän työkalun yhtenäisen graafin kaksijakoisuuden selvittämiseen.

**Lause 4.4.** *Olkoon $G$ yhtenäinen graafi ja $\lambda(G) = \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_n = \Lambda(G)$ sen ominaisarvot. Seuraavat ehdot ovat yhtäpitäviä:*

(i) *Graafi $G$ on kaksijakoinen,*

(ii) *$\lambda_i = -\lambda_{n+1-i}$, eli jokaista ominaisarvoa $\lambda_i$ kohti myös $-\lambda_i$ on ominaisarvo,*

(iii) *$\Lambda(G) = -\lambda(G)$.*

*Lisäksi $m(\lambda_i) = m(-\lambda_i)$.*

*Todistus* (vrt. [3, s. 173–174]). (i) $\Rightarrow$ (ii): Olkoon $\{x_1, \dots, x_s\}$, $\{x_{s+1}, \dots, x_n\}$ graafin $G$ jako. Kaksijakoisen graafin vierusmatriisi on muotoa

$$A = \begin{bmatrix} 0 & B \\ B^\top & 0 \end{bmatrix},$$

missä $a_{ij} = 0$, kun $i, j \leq s$ ja kun $i, j \geq s + 1$.

Olkoon $\lambda$ ominaisarvo ja $\mathbf{v}$ sitä vastaava ominaisvektori, eli

$$A\mathbf{v} = \begin{bmatrix} \sum_{i=s+1}^{n} a_{1i}v_i \\ \vdots \\ \sum_{i=s+1}^{n} a_{si}v_i \\ \sum_{i=1}^{s} a_{(s+1)i}v_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{s} a_{ni}v_i \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_s \\ v_{s+1} \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}.$$

Tästä nähdään, että $\hat{\mathbf{v}} = (v_1, \ldots, v_s, -v_{s+1}, \ldots, -v_n)$ on ominaisarvoa $-\lambda$ vastaava ominaisvektori.

Kuvaus $\mathbf{v} \mapsto \hat{\mathbf{v}}$ on isomorfismi ominaisavaruuksien $\mathrm{Eig}(G, \lambda)$ ja $\mathrm{Eig}(G, -\lambda)$ välillä. Koska $A$ on diagonalisoituva, niin $\dim(\mathrm{Eig}(G, \lambda)) = m(\lambda)$ kaikilla ominaisarvoilla $\lambda$. Täten $m(\lambda) = m(-\lambda)$ kaikilla $\lambda$.

Kohta (iii) seuraa suoraan kohdasta (ii).

(iii) $\Rightarrow$ (i): Kun $A\mathbf{v} = \lambda_1\mathbf{v}$, voidaan olettaa, että $\|\mathbf{v}\| = 1$. Oletuksen perusteella nyt $R(\mathbf{v}) = \sum a_{ij}v_iv_j = \lambda_1 = -\lambda_n$. Kolmioepäyhtälön perusteella

$$R(|\mathbf{v}|) = \sum a_{ij}|v_i||v_j| \geq \left|\sum a_{ij}v_iv_j\right| = |R(\mathbf{v})|$$

ja lauseen 3.2 perusteella

$$R(|\mathbf{v}|) \leq \lambda_n = |R(\mathbf{v})|,$$

eli

$$(*) \qquad \sum a_{ij}|v_i||v_j| = \left|\sum a_{ij}v_iv_j\right|.$$

Nyt $|\mathbf{v}|$ on ominaisarvoa $\lambda_n$ vastaava ominaisvektori, ja lauseen 3.4 perusteella sen kaikki alkiot ovat nollasta poikkeavia. Tällöin vektorin $\mathbf{v}$ alkiot $v_1, \ldots, v_s$ ja $v_{s+1}, \ldots, v_n$ ovat vastakkaista merkkiä ja $s \neq 0, n$, koska eri ominaisarvoja vastaavat ominaisvektorit ovat symmetrisen matriisin tapauksessa ortogonaaliset. Toisaalta yhtäsuuruus $(*)$ on mahdollinen vain, jos yhtälön oikean puolen summan sisällä ei ole erimerkkisiä termejä. On kaksi vaihtoehtoa:

- $a_{ij} = 0$, kun $v_iv_j < 0$, eli kun $i \leq s$ ja $j > s$ tai $i > s$ ja $j \leq s$. Matriisi $A$ on tällöin muotoa
$$A = \begin{bmatrix} & 0 \\ 0 & \end{bmatrix},$$
eli $G$ on epäyhtenäinen. Tämä on ristiriita, sillä $G$ on oletuksen mukaan yhtenäinen.

- $a_{ij} = 0$, kun $v_i v_j > 0$, eli kun $i, j \leq s$ tai $i, j > s$. Matriisi $A$ on tällöin muotoa

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

eli $G$ on kaksijakoinen.

Siispä $G$ on kaksijakoinen. □

Samaan tapaan kuin täydellisten graafien tapauksessa, saadaan täydellisen kaksijakoisen graafin spektri yleistettyä.

**Lause 4.5.** *Täydelliselle kaksijakoiselle graafille $K_{p,q}$ on voimassa*

$$\operatorname{Spec}(K_{p,q}) = \begin{pmatrix} -\sqrt{pq} & 0 & \sqrt{pq} \\ 1 & p+q-2 & 1 \end{pmatrix}.$$

*Todistus* (vrt. [3, s. 39]). Täydellisen kaksijakoisen graafin $K_{p,q}$ vierusmatriisi on muotoa

$$\begin{bmatrix} 0 & J \\ J^\top & 0 \end{bmatrix},$$

missä $J$ on $p \times q$-ykkösmatriisi. Vierusmatriisilla on nyt vain kaksi lineaarisesti riippumatonta riviä, eli ominaisarvon 0 kertaluku on $m(0) = p + q - 2$. Nollasta poikkeavia ominaisarvoja on siis täsmälleen kaksi, ja lauseen 4.4 perusteella $\Lambda(K_{p,q}) = -\lambda(K_{p,q})$. Koska lisäksi graafin $K_{p,q}$ särmien lukumäärä on $|E| = pq$, niin lauseen 3.1 perusteella saadaan

$$pq = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 = \frac{1}{2}(\lambda^2 + \Lambda^2) = \frac{1}{2}((-\Lambda)^2 + \Lambda^2) = \Lambda^2 \Leftrightarrow \Lambda = -\lambda = \sqrt{pq}.$$

□

# Lähteet


[1] Gross, J. L., Yellen J. *Handbook of Graph Theory*. CRC Press, 2004.

[2] Jin, X., Vong, S. *An Introduction to Applied Matrix Analysis*. World Scientific Publishing, 2016.

[3] Knauer, U. *Algebraic Graph Theory: Morphisms, Monoids and Matrices*. Walter de Gruyter, 2011.