[文章编号] 1007－7405(2016)01－0077－04

图的 Normalized Laplacian 多项式系数

廖丽雯，陈海燕

（集美大学理学院，福建 厦门 361021）

[摘要] 首先利用图的一级半子图给出了 Normalized Laplacian 特征多项式系数的一个组合表达式，然后在此表达式的基础上，用组合方法证明了 Normalized Laplacian 谱和图的结构之间的一系列关系式.

[关键词] Normalized Laplacian 矩阵；一级半子图；Normalized Laplacian 谱

[中图分类号] O 157.1

The Cofficients of the Normalized Laplacian Polynomial

LIAO Li-wen，CHEN Hai-yan

（School of Science，Jimei University，Xiamen 361021，China）

Abstract：A combinatoric expression for the cofficients of the normalized Laplacian polynomial in terms of elementary subgraphs of the graph was given. Then based on the expression，a series of relations between the normalized Laplacian spectrum and the structure of the graph were proved.

Keywords：Normalized Laplacian matrix；elementary subgraph；Normalized Laplacian spectrum

0 引言

设 G 是一个 n 个顶点 m 条边的简单连通图，则 G 的邻接矩阵是一个 $n\times n$ 矩阵，记为 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$，其中 $a_{ij}=\begin{cases}1, & \text{如果 } i \text{ 与 } j \text{ 相邻,}\\ 0, & \text{否则.}\end{cases}$

$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$ 称为图 G 的 Laplacian 矩阵，这里 $\boldsymbol{D}=diag(d_1,d_2,\cdots,d_n)$ 表示图 G 的度对角矩阵. 令 $\sigma(M;x)=\det(xI-M)=x^n+a_1x^{n-1}+a_2x^{n-2}+\cdots+a_n$ 表示矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的特征多项式. 众所周知，当 $\boldsymbol{M}$ 分别为图 G 的邻接矩阵和 Laplacian 矩阵时，系数 a_i 可以由 G 的一些子图来刻画[1-2]. 很自然地，对其他和图 G 相关的矩阵，可以考虑类似的问题. 本文主要考虑图 G 的 Normalized Laplacian 特征多项式系数和图的结构之间的关系.

定义1 设 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 分别表示图 G 的邻接矩阵和度对角矩阵，则图 G 的 Normalized Laplacian 矩阵定义为：$\mathscr{L}=(\ell_{ij})_{n\times n}=\boldsymbol{D}^{-1/2}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A})\boldsymbol{D}^{-1/2}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$，其中 $\boldsymbol{D}^{-1/2}=diag(1/\sqrt{d_1},1/\sqrt{d_2},\cdots,1/\sqrt{d_n})$，即 $\ell_{ij}=\begin{cases}1, & \text{如果 } i=j,\\ -1/\sqrt{d_id_j}, & \text{如果 } i \text{ 与 } j \text{ 相邻,}\\ 0, & \text{否则.}\end{cases}$

[收稿日期] 2014－12－27 [修回日期] 2015－04－22
[基金项目] 福建省自然科学基金资助项目（2011J01015）
[作者简介] 廖丽雯（1989—），女，硕士生，从事组合图论方向研究. 通信作者：陈海燕（1970—），女，教授，博士，从事组合图论方向研究，E-mail：chey6@sohu.com.

图 G 的 Normalized Laplacian 矩阵和图 G 上随机游动的转移概率矩阵有紧密的联系，它的许多性质已被人们所熟知，如：1）$\mathscr{L}$ 是半正定矩阵；2）0 是 $\mathscr{L}$ 的特征值，且它的所有特征值位于闭区间 $[0,2]$. 其他更多性质可参见文献［3］.

设图 G 的 Normalized Laplacian 特征多项式为：$\chi(G;x) = \det(xI-\mathscr{L}) = \det[(x-1)I + \boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}] = (x-1)^n + b_1(x-1)^{n-1} + b_2(x-1)^{n-2} + \cdots + b_n$.

本文首先给出 b_i 和 G 的子图之间的关系式，并在此基础上得到 Normalized Laplacian 谱和图的结构之间的一些关系. 下面用 $r(G)$，$s(G)$ 分别表示图 G 的秩与余秩，即 $r(G)=n-c$，$s(G)=m-n+c$，这里 c 表示图 G 的连通分支数.

1 Normalized Laplacian 多项式系数

定义 2 每个分支是一条边或一个圈的简单图称为一级半图. 图 G 的一级半生成子图是指包含图 G 中所有顶点的一级半子图.

引理 1[4] 设 $\boldsymbol{A}$ 是图 G 的邻接矩阵，则有：$\det(A) = \sum\limits_{\Lambda}(-1)^{r(\Lambda)}2^{s(\Lambda)}$，其中：求和取遍图 G 中所有一级半生成子图 Λ；$r(\Lambda)$，$s(\Lambda)$ 分别表示子图 Λ 的秩与余秩.

定理 1 设图 G 的 Normalized Laplacian 特征多项式为：$\chi(G;x) = (x-1)^n + b_1(x-1)^{n-1} + b_2(x-1)^{n-2} + \cdots + b_n$，则 $b_i = \sum\limits_{\Lambda}(-1)^{r(\Lambda)}2^{s(\Lambda)}/\prod\limits_{j\in V(\Lambda)}d_j$，其中：求和号是取遍图 G 中所有含 i 个顶点的一级半子图 Λ；$r(\Lambda)$，$s(\Lambda)$ 分别表示子图 Λ 的秩与余秩.

证明 由行列式展开的性质知：$\det[(x-1)I + \boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}]$ 展开式中 $(x-1)^{n-i}$ 的系数 b_i 等于 $\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$ 中所有 i 阶主子式值之和. 而 $\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$ 中每个 i 阶主子式等于 $\boldsymbol{D}^{-1/2}$、$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{D}^{-1/2}$ 中对应 i 阶主子式之积. $\boldsymbol{D}^{-1/2}$ 的 i 阶主子式等于其对应 i 个对角元素之积，A 的 i 阶主子式等于这 i 个顶点诱导子图邻接矩阵的行列式，所以由引理 1，可得：$b_i = \sum\limits_{\Lambda}(-1)^{r(\Lambda)}2^{s(\Lambda)}/\prod\limits_{j\in V(\Lambda)}d_j$.

由定理 1，可以得到推论 1 和推论 2.

推论 1 图 G 的 Normalized Laplacian 特征多项式系数满足：1）$b_1=0$；2）$b_2 = -\sum\limits_{e=\{u,v\}\in E(G)}(1/d_ud_v)$；3）$b_3 = 2\sum\limits_{\Delta=\{u,v,w\}}(1/d_ud_vd_w)$（其中 Δ 表示 G 中点 u,v,w 构成的三角形）.

证明 因为 G 是简单图，所以 G 中不存在一个顶点的一级半子图，而两个顶点的一级半子图与图 G 的边一一对应，三个顶点的一级半子图与图 G 中的三角形一一对应，所以由定理 1 结论得证.

推论 2 1 是图 G 的 Normalized Laplacian 特征值当且仅当 0 是图 G 的特征值.

证明 1 是图 G 的 Normalized Laplacian 特征值当且仅当 $b_n=0$，而 $b_n = |A|/\prod\limits_{i=1}^{n}d_i = 0$ 当且仅当 $|A|=0$，即 0 是图 G 的特征值，得证.

2 Normalized Laplacian 谱与图的结构之间的关系

定理 2 图 G 是偶图当且仅当图 G 的 Normalized Laplacian 特征值关于 1 对称.

证明 必要性：若图 G 是偶图，则 G 中不存在奇数个点的一级半子图，所以由定理 1，可知 $b_i=0$（i 为奇数）. 即 $\chi(G;x)$ 可表示成：

$$\chi(G;x) = \begin{cases}(x-1)^n + b_2(x-1)^{n-2} + \cdots + b_{n-2}(x-1)^2 + b_n, & n\text{ 为偶数},\\ (x-1)[(x-1)^{n-1} + b_2(x-1)^{n-3} + \cdots + b_{n-1}], & n\text{ 为奇数}.\end{cases}$$

所以图 G 的 Normalized Laplacian 特征值关于 1 对称.

充分性：若图 G 的 Normalized Laplacian 特征值关于 1 对称，可知 $b_i=0$（i 为奇数）. 假设图 G 不

是偶图，即 G 中存在奇圈．设最小的奇圈长为 k，则由定理 1，可得 $b_k \neq 0$，矛盾，所以图 G 是偶图．

因为 0 是任意一个图的 Normalized Laplacian 特征值，所以若 G 是偶图，则由定理 2，2 一定是 G 的 Normalized Laplacian 特征值．下面证明一个比定理 2 更强的结论，首先需要下面的引理 2 和引理 3.

引理 2[5]　假设 $\boldsymbol{M}$ 是不可约非负实对称矩阵，则 $\boldsymbol{M}$ 的最大特征值是单根．

引理 3　令 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$，则 $(\boldsymbol{A}^k)_{ij} = 0$ 当且仅当 $(\boldsymbol{B}^k)_{ij} = 0$．

定理 3　连通图 G 是偶图当且仅当 2 是 G 的 Normalized Lapiacian 特征值．

证明　必要性已证．充分性：设 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$，则 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I} - \mathscr{L}$．若 0，2 分别是 $\mathscr{L}$ 最小和最大特征值，则 1 和 -1 就是 $\boldsymbol{B}$ 的最大和最小特征值．所以 $\boldsymbol{B}^2$ 的最大特征值 1 就不是单根，由引理 2 可知，$\boldsymbol{B}^2$ 是可约的，即存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使得 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{P}^{-1} = \begin{bmatrix} X & 0 \\ 0 & Y \end{bmatrix}$，其中 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Y}$ 都是非空方阵．所以图 G 的顶点可以分成两个部分 V_1 和 V_2，使得对 $\forall i \in V_1, \forall j \in V_2$，有 $(\boldsymbol{B}^2)_{ij} = 0$．再由引理 3 可得 $(A^2)_{ij} = 0$，即 G 中不存在从 V_1 到 V_2 长为 2 的途径．假设 V_1 中存在两个相邻的顶点 u_1，u_2，则从 V_2 中任取一点 v．令 $w_0(=u_1)w_1\cdots w_k(=v)$ 是 u_1 到 v 的一条最短路，设 k_0 是满足 $w_{k_0+1} \in V_2$ 的最小值．若 $k_0 > 0$，则 $w_{k_0-1}w_{k_0}w_{k_0+1}$ 是 V_1 到 V_2 的一条长为 2 的途径；若 $k_0 = 0$，则 $u_2w_0w_1$ 是 V_1 到 V_2 的一条长为 2 的途径，这与不存在从 V_1 到 V_2 长为 2 的途径矛盾．因此 V_1 中的点互不相邻．同理，V_2 中的点也互不相邻，所以 G 是偶图．

定理 4　设图 G 是有 m 个不同的 Normalized Lapiacian 特征值的连通图，则 $diam(G) \leqslant m-1$，其中 $diam(G)$ 表示图 G 的直径．

证明　假设 $diam(G) \geqslant m$，则存在 $s,t \in V(G)$ 使得 s,t 之间的距离 $d(s,t) = m$．即 $(\boldsymbol{A}^k)_{st} = 0$，$k < m$，$(\boldsymbol{A}^m)_{st} \neq 0$．由引理 3，对 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$，有 $(\boldsymbol{B}^k)_{st} = 0, k < m$，$(\boldsymbol{B}^m)_{st} \neq 0$．因为 G 有 m 个不同的 Normalized Lapiacian 特征值，所以矩阵 $\boldsymbol{B}$ 有 m 个不同的特征值，即 $\boldsymbol{B}$ 的最小多项式的次数为 m，所以存在常数 c_k 使得 $\boldsymbol{B}^m = \sum_{k=0}^{m-1} c_k \boldsymbol{B}^k$ 成立．但由 $(B^m)_{st} \neq 0$ 知，$\boldsymbol{B}^m$ 中的第 s 行 t 列的值不为 0，而 $\sum_{k=0}^{m-1} c_k \boldsymbol{B}^k$ 在 s 行 t 列的值为 0，矛盾．从而得到 $diam(G) \leqslant m-1$．

图 G 中最小圈的长称为这个图的围长，最小奇圈的长称为这个图的奇围长，记为 $og(G)$．下面的定理 5 和定理 6 给出系数 b_i 和图的奇围长、围长的关系．

定理 5　设图 G 的 Normalized Laplacian 特征多项式为：$\chi(G;x) = (x-1)^n + b_1(x-1)^{n-1} + b_2(x-1)^{n-2} + \cdots + b_n$，则图 G 的奇围长 $og(G)$ 等于序列 $b_1, b_3, b_5\cdots$ 中第一个非零数的下标．

证明　根据定理 1 可知，Normalized Lapiacian 特征多项式系数：$b_i = \sum_{\Lambda} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)} / \prod_{j \in V(\Lambda)} d_j$，其中：求和号是取遍图 G 中所有含 i 个顶点的一级半子图 Λ；$r(\Lambda)$，$s(\Lambda)$ 分别表示子图 Λ 的秩与余秩．

不妨假设 $og(G) = 2k+1$，则当 $l < k$ 时，G 中不存在 $2l+1$ 个顶点的一级半子图，所以 $b_{2l+1} = 0$；当 $l = k$ 时，此时 $2k+1$ 个点的一级半子图只能是长为 $2k+1$ 的奇圈，这时 $b_{2k+1} = 2\sum_{C_{2k+1}} (1/\prod_{j \in V(C_{2k+1})} d_j) \neq 0$，所以 $og(G)$ 等于序列 $b_1, b_3, b_5\cdots$ 中第一个非零数的下标．

现在考虑围长．假设图 G 的围长为 g，当 $i < g$ 时，有：$b_i = \begin{cases} 0, & i = 2q+1, \\ \sum_{\Lambda} (-1)^q / \prod_{j \in V(\Lambda)} d_j, & i = 2q, \end{cases}$

其中 Λ 是含 q 条独立边的一级半子图．

当 $i = g$ 时，此时一级半子图的形式有 2 种可能，一种是一些独立的边（只当 g 为偶数时存在），

一种是长为 g 的圈. 相应地，定义：$\hat{b}_i = \begin{cases} b_i, & i = 2q+1, \\ b_i - \sum_{\Lambda_1} (-1)^q / \prod_{j \in V(\Lambda_1)} d_j, & i = 2q, \end{cases}$ 其中：$i = 1,2,3\cdots n$；Λ_1 是含 q 条独立边的一级半子图，则很容易得到定理 6.

定理 6 图 G 的围长等于序列 $\hat{b}_1$，$\hat{b}_2$，$\hat{b}_3\cdots$ 中第一个非零数的下标.

设 G 的邻接矩阵的特征多项式 $\sigma(G;x) = \det(x\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}) = x^n + a_1 x^{n-1} + a_2 x^{n-2} + \cdots + a_n$. 最后来看系数 a_i 和 b_i 之间的关系，根据文献［6］，$a_i = \sum_{\Lambda} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)}$，其中：求和号是取遍图 G 中所有含 i 个顶点的一级半子图 Λ；$r(\Lambda)$，$s(\Lambda)$ 分别表示子图 Λ 的秩与余秩. 和定理 1 中 b_i 的表达式比较可知，对一般图来说，a_i 和 b_i 之间并不存在明确的关系式，但对下面两个特殊的图类，却有简单的关系：1）若 G 是一个 d－正则图，则 $b_i = a_i/d_i$；2）若 G 是一个具有参数（n_1, n_2, d_1, d_2）的半正则偶图，则

$$b_i = \begin{cases} a_i = 0, & i = 2q+1, \\ a_i/(d_1 d_2)^q, & i = 2q. \end{cases}$$

由 1）和 2）可知，若一个正则图或半正则偶图的特征多项式已知，则可以得到它的 Normalized Lapiacian 特征多项式，如圈 C_n 和完全偶图 K_{n_1,n_2} 的特征多项式分别为：$\sigma(C_n;x) = -2 + \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k n \binom{n-k}{k} x^{n-2k}/(n-k)$；$\sigma(K_{n_1,n_2};x) = x^{n_1+n_2} - n_1 n_2 x^{n_1+n_2-2}$. 所以，$\chi(C_n;x) = -2 + \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1/4)^k n \binom{n-k}{k} (x-1)^{n-2k}/(n-k)$；$\chi(K_{n_1,n_2};x) = (x-1)^{n_1+n_2} - (x-1)^{n_1+n_2-2}$.

［参 考 文 献］

［1］SACHS H. Beziehungen zwischen den in einem Graphen enthaltenen Kreisen and seinem charakteristischen polynome. Publ Math Debrecen，1964，11：119-134.

［2］KEL'MANS A K，CHALNOKOV V M. A certain polynomial of a graph with the extremal number of trees. J Combin Theory Ser B，1974，16：197-214. DOI：10.1016/0095-8956(74)90065-3.

［3］CHUNG F R K. Spectral graph theory. Providence，Khode Island：America Mathematical Society，1997：186-199.

［4］HARARY F. The determinant of the adjacency matrix of a graph. SIAM Review，1962，4：201-210. DOI：10.1137/1004057.

［5］GANTMACHER F R. The theory of matrices. New York：Chelsea，1959：86-93.

［6］CVETKOVIĈ D，ROWLINSON P，SIMIĈ S. An introduction to the theory of graph spectra. London：London Mathematical Society，2010：52-58.

（责任编辑　马建华　英文审校　黄振坤）