グラフの固有値について

2011SE063 市川智彦

指導教員：小藤俊幸

1　はじめに

現代社会においてネットワークは重要である. 社会的なネットワークは大規模なものになっていて，手計算で求めることは非常に難しい. ネットワークをグラフに対応する行列の固有値を調べるとグラフの特性がわかる，例えば，固有値を求めたことにより，グラフの閉歩道の個数が分かる.

実際的な問題を考えるためには大規模的なグラフを解析しなければならない，大規模なグラフを手計算で求めることは非常に難しい. したがって，グラフ，隣接行列，ラプラシアン行列を定義し固有値を求めるために数値計算法のひとつであるシルベスター二分法を学び，実験を行った.

2　グラフ

グラフ G とは，集合の対 $(V(G)$，$E(G))$ のことである. ここに，$V(G)$ は空集合ではなく，$E(G)$ は $V(G)$ の相異なる元の非順序集合のことである.$E(G)$ は空集合でもよい.$V(G)$ をグラフ G の点集合あるいは頂点集合といい，$V(G)$ の元の点あるいは頂点という.$V(G)$ は有限集合とする. また，$E(G)$ を G の辺集合といい，$E(G)$ の元を G の辺という. 記述の簡略化を考えて，混乱が生じない場合は $V(G)$，$E(G)$ をそれぞれ V，E で表す. 図 1 に例を示す. [3] $V(G)=\{v_1, v_2，v_3，v_4，v_5\}$，$E(G)=\{\{v_1，v_2\}$，$\{v_1$ ，$v_4\}$，$\{v_2，v_3\}$，$\{v_2，v_4\}$，$\{v_3，v_4\}$，$\{v_4，v_5\}\}$

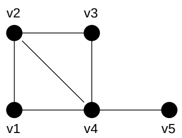

図 1　グラフ

3　行列

3.1　隣接行列

G は位数 p のグラフで，$V(G)=\{v_1，v_2，\cdots，v_p\}$ とする. この時，G の隣接行列 $A(G)=(a_{ij})$ とは，その成分 a_{ij} が

$$a_{ij}=\begin{cases} 1 & v_iv_j \in E(G) \\ 0 & v_iv_j \notin E(G) \end{cases} \tag{1}$$

で定められる p × p 行列のことである. 混乱の恐れがないときは $a(G)$ を単に A で表す. 行列 A は次の性質を持つ.[2]

1. A は各成分が 0 か 1 の対称行列
2. 主対角線の成分はすべて 0

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

図 2　隣接行列

$$L=\begin{pmatrix} 2&-1&0&-1&0\\ -1&3&-1&-1&0\\ 0&-1&2&-1&0\\ -1&-1&-1&4&-1\\ 0&0&0&-1&1 \end{pmatrix}$$

図 3　ラプラシアン行列

3. 第 i 行 (列) の成分の和は点 v_i の次数に等しい

図 2 に図 1 の隣接行列の例を示す.

3.2　ラプラシアン行列

$V(G)=\{v_1，v_2，\cdots，v_p\}$ であるグラフ G に対して，次数行列 $C=(c_{ij})$ とは $p\times p$ 行列で，$c_{ij}=0\,(i\neq j)$ で定められる対角行列である. また，このとき，

$$L\,(G)=C\,(G)-A\,(G) \tag{2}$$

で定めれる $p\times p$ 行列をグラフ G のラプラシアン行列，あるいはラプラシアンと言う. ここに，$A(G)$ は隣接行列である. 混乱のないときは (2) を $L=C-A$ と略記する.[2] 図 3 に図 1 のラプラシアン行列の例を示す.

4　グラフの固有値

位数 p のグラフ G の固有値とは，G の隣接行列の固有値である.G の隣接行列を A とするとき，G の固有値は，次の λ に関する方程式の p 個の解のことである.

$$\det(\lambda I_p - A)=0 \tag{3}$$

ここに，det 行列は A の行列を意味し，I_p は $p\times p$ 単位行列を意味する. λ に関する多項式 $\det(\lambda I_p - A)$ は G の固有多項式といい，$\phi(G;\lambda)$ で表す. 隣接行列の定義から

$$\phi(G;\lambda)=\sum_{k=0}^{p} a_k\lambda^{p-k} \tag{4}$$

とすると，$a_0=1$ でその他の全ての $a_i(1\leq i\leq p)$ は整数である.[2]

4.1　グラフの固有値の性質

1. グラフ G の固有値はすべて実数であり，その和は零である.[2]

2. G は位数 p の連結グラフとし，Δ は G の最大次数とする. このとき，G の任意の固有値 λ に対して $\mid \lambda \mid \leq \Delta$ が成立 [2]
3. G は位数 p の連結グラフとし，Δ は G の最大次数とする. このとき，G が正則グラフであるための必要十分条件は，G が Δ を固有値に持つことである.[2]

4.2 固有値と 閉歩道の個数

位数 p のグラフ G の固有値を λ_1, λ_2，$\cdots\lambda_p$ とし，長さ k の閉歩道の個数を c とすると，

$$c = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i^k \tag{5}$$

である.[3]

5 ラプラシアン行列の固有値

5.1 定理

ラプラシアン行列は対称行列であるから，固有値は全て実数である. ここで，ラプラシアン行列の固有値のことを，単にラプラシアン固有値という. 位数 p のグラフ G のラプラシアン行列の任意の固有値を μ とすると，

$$0 \leq \mu \leq p \tag{6}$$

が成り立つ.[3]

5.2 ラプラシアン固有値と 木の個数

位数 p のグラフ G のラプラシアン固有値を $\lambda_1, \lambda_2\cdots, \lambda_p$ とする. このときグラフ G の木の個数 t は以下で求められる.[1][2]

$$t = \frac{1}{p} \prod_{i=2}^{p} \lambda_i \tag{7}$$

6 固有値の数値計算法

6.1 シルベスター二分法

固有値の大小関係を高速に比較するため，固有値の計算に二分法を用いる. 二分法はシルベスターの慣性律をを利用する.
シルベスターの慣性律
A を対称行列，S を正則行列とし，$B = S^T AS$ とおくと A と B の正の固有値の数と A と B の負の固有値の数は等しい.
修正コレスキー分解
対称行列 A の首座小行列式 δ_k が全て 0 でないならば $A = LDL^T$ D:対角行列，L:対角成分が 1 の下三角行列と一意に分解できる. 上記した二つの定理を合わせると以下のことが言える. 対称行列 A の正の固有値の個数は修正コレスキー分解 $(A = LDL_T)$ の D の正の成分の個数にに等しい.

シルベスター二分法とは，固有値 λ が含まれる値の範囲を以下のように A のすべての固有値が含まれるように決定する.

$$\lambda_{inf} \leq \lambda_i \leq \lambda_{sup} \tag{8}$$

小さい方から i 番目の固有値を λ_i とする.λ_i が存在する上限 λ_i^{up} と λ_i^{low} を初期値として与える.$\lambda = (\lambda_i^{up} + \lambda_i^{low})/2$ として，範囲に含まれる固有値の数 $n(\lambda)$ を計算する.$n(\lambda)$ が i 以上のとき λ_i^{low} の値を λ で更新し、それ以外の場合は λ_i^{up} を更新する.$\lambda = (\lambda_i^{up} + \lambda_i^{low})/2$ と，$n(\lambda)$ を使い，上限と加減を繰り返し更新していく.[3] 以下で実際に図 1 に示すグラフについてシルベスター二分法を用いて固有値を求める.

6.2 シルベスター二分法の計算

図 1 の隣接行列 A は 3 章で求めた.
固有多項式 $\det[\lambda I - A] = \lambda(\lambda^4 - 6\lambda^2 - 4\lambda + 2)$
固有値 $[x = -1.749117547746521, x = 0.33490398537343, x = -1.271330370297698, x = 2.685543932670793, x = 0.0]$

6.3 ハウスホルダー法の計算

ハウスホルダー法で求めた結果，シルベスター二分法で求めた計算結果と同様に求められた。以下にハウスホルダー法でラプラシアン固有値を求めた結果を示す. 固有多項式 $\det[\lambda I - L] = (\lambda - 5)(\lambda - 4)(\lambda - 2)(\lambda - 1)\lambda$
固有値 $[4.999989510, 5.000003815]$, $[3.999990463, 4.000004768]$,
$[1.999992371, 2.000006676]$, $[0.999993324, 1.000007629]$, $[-0.000005722, 0.000008583]$

7 終わりに

あるグラフ G に対して，隣接行列 A とラプラシアン行列 L を求め，シルベスター二分法とハウスホルダー法を用いてグラフの固有値を求めた. 隣接行列 A の固有値から，(5) を用いるとグラフ G の長さ 3 の閉歩道の個数を求めることができる. 隣接行列の固有値をそれぞれ代入して求めると，閉歩道の個数は 12 個あるとわかった. また，(7) にラプラシアン行列の固有値をそれぞれ代入してグラフ G の全域木の個数を求めると，8 個であった. また全域木の個数はグラフ G のラプラシアン行列から第 (5,5) 成分の余因子からも同様に 8 個と求められた. このことから，あるグラフに対応する隣接行列，ラプラシアン行列を導き，それぞれの固有値を求めることで，グラフの性質がわかった.

参考文献

[1] Chris.Godsil，Gordon.F.Royle: Algebraic Graph Theory 2001 13.2 Trees p.52

[2] 竹中淑子: 線形代数的グラフ理論，培風館，1989.

[3] 仁平政一・西尾義典: グラフ理論序説，プレアデス出版，2005.