グラフの固有値・固有ベクトルから分かること

田中 太初

情報基礎数理学 II 分野

2016 年 12 月 1 日
第 68 回情報科学談話会

- 主要な研究対象：

$$\text{距離正則グラフ} \fallingdotseq \text{非常に強い「正則性」を持ったグラフ}$$

1. ランダムウォーク・量子ウォーク等のモデルケースを提供
2. 種々の組合せ的・工学的対象の基礎空間の役割を果たす：

対象	基礎空間
ブロック符号	Hamming グラフ
組合せデザイン	Johnson グラフ
有限幾何の諸概念	双対極グラフ Grassmann グラフ
ネットワーク符号	双線型形式グラフ Grassmann グラフ

距離正則グラフの概説論文： Electron. J. Combin. (2016) #DS22

156 ページ
文献数 658

Distance-regular graphs

Edwin R. van Dam
Department of Econometrics and O.R.
Tilburg University
The Netherlands
Edwin.vanDam@uvt.nl

Jack H. Koolen
School of Mathematical Sciences
University of Science and Technology of China
and
Wu Wen-Tsun Key Laboratory of
Mathematics of CAS
Hefei, Anhui, 230026, China
koolen@ustc.edu.cn

Hajime Tanaka
Research Center for
Pure and Applied Mathematics
Graduate School of Information Sciences
Tohoku University
Sendai 980-8579, Japan
htanaka@tohoku.ac.jp

Submitted: Dec 19, 2014; Accepted: Apr 7, 2016
1st edition, Apr 15, 2016

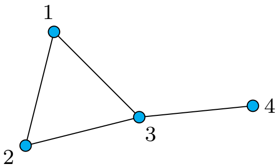
Mathematics Subject Classifications: 05E30, 05Cxx, 05Exx

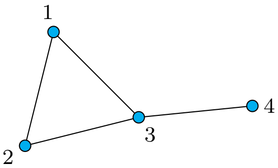
Abstract

This is a survey of distance-regular graphs. We present an introduction to distance-regular graphs for the reader who is unfamiliar with the subject, and then give an overview of some developments in the area of distance-regular graphs since the monograph 'BCN' [Brouwer, A.E., Cohen, A.M., Neumaier, A., *Distance-Regular Graphs*, Springer-Verlag, Berlin, 1989] was written.

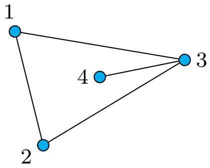
- 本日の内容について（専門家向けのタネ明かし）
  - about combinatorial optimization
  - more specifically, applications of Lovász's theta function to upper-bounding the independence number of a graph (Hoffman bound)
  - use the duality of SDP to identify ALL maximum independence sets
- ただし、学部 1 年生の線形代数学の知識のみを仮定

- グラフ＝「頂点」と「辺」の集まり：

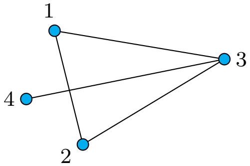



1
2
3
4

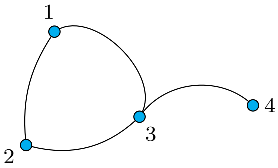
=


1
3
4
2

=


1
3
4
2

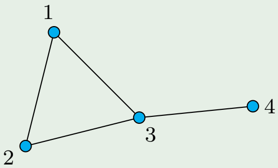
=


1
4
3
2

- $G = (V, E)$：グラフ
  - $V =$「頂点集合」
  - $E =$「辺集合」$\subset \binom{V}{2}$

V の 2 点部分集合全体の集合

Example

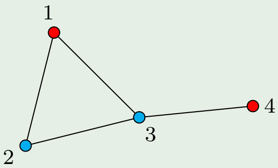


$$V = \{1, 2, 3, 4\}, \quad E = \big\{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}\big\}$$

- $G = (V, E)$: グラフ
  - V =「頂点集合」
  - E =「辺集合」$\subset \binom{V}{2}$

- $C \subset V$: 独立集合 $\iff$ C のどの 2 点も隣接しない

Example



$C = \{1, 4\}$ は独立集合

- $\alpha(G)$: G の独立数（独立集合の可能な最大サイズ）

- 符号理論：あらかじめ決められた信号のリスト（＝符号）を用いて送信者と受信者がやり取りを行う

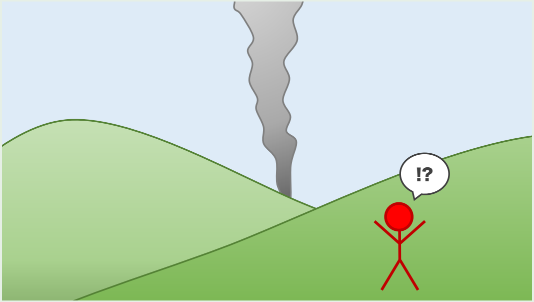
送信者 ⟶ $\boxed{\text{通信路}}$ ⟶ 受信者

ノイズ

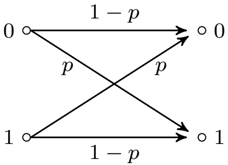
Example

- モールス信号
- 手旗信号
- 狼煙

etc.



- より「工学的」な符号理論では $0, 1$ の列を送信する
- ただし、小さな確率 p でエラーが起きる（2 元対称通信路）



- 長さ m の列で信号を定めるとき

$$
\text{符号} = \text{信号のリスト} = \{0, 1\}^m \text{ の部分集合}
$$

Example (戦国時代の狼煙風)

- $C = \{00000, 10101, 01010\}$ $(m = 5)$
  - $00000 \to$「敵襲」
  - $10101 \to$「兵糧を送れ」
  - $01010 \to$「異常なし」

- p が極微小な場合、$0, 1$ の列の送信の際にエラーが高々1ヶ所起こることまで想定すれば十分であろう

p や m の値、及び要求する情報伝達精度等に応じて設定

Example (失敗例)

- $C = \{00000, 10101, 01010\}$ $(m = 5)$
- 送信者：00000 を送信（敵襲）
- エラーが 1ヶ所発生
  1. 受信者：10000 を受信 $\Longrightarrow$ 00000（敵襲）と判断可
  2. 受信者：01000 を受信 $\Longrightarrow$ 00000（敵襲）or 01010（異常なし）???

Example (成功例)

- $C = \{00000, 10101, 01110\}$ $(m = 5)$

互いに 3ヶ所以上異なる

- $\alpha = \alpha_1 \cdots \alpha_5,\ \beta = \beta_1 \cdots \beta_5 \in \{0,1\}^5$

$$\begin{aligned} \partial(\alpha,\beta) &= \alpha,\beta \text{ の異なる箇所の個数} \\ &= \bigl|\{i \mid 1 \leqslant i \leqslant 5,\ \alpha_i \neq \beta_i\}\bigr| \end{aligned}$$

α, β の Hamming 距離

- $G = (V, E)$
  - $V = \{0,1\}^5$ （$2^5 = 32$ 頂点）
  - $E = \bigl\{\{\alpha,\beta\} \bigm| \{\alpha,\beta\} \in \binom{V}{2},\ \partial(\alpha,\beta) < 3\bigr\}$

Example (成功例)

- $C = \{00000, 10101, 01110\}$ は G の独立集合

Remark

- $|C|$ が大きい程「良い」符号
- 実際、$\alpha(G) = 4$ が成立：

$$C = \{00000, 10101, 01110, 11011\}$$

- $A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}$ ：$n \times n$ 行列

- $\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$ ：A の固有値 θ に関する固有ベクトル

  $\Longleftrightarrow A\boldsymbol{u} = \theta\boldsymbol{u}$

- $\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$

  $\boldsymbol{u} \bullet \boldsymbol{v} = u_1 v_1 + \cdots + u_n v_n$ ：$\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ の内積

Theorem (対称行列の対角化 (線形代数学 B より))

- $A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}$: $n \times n$ 対称行列（すなわち ${}^tA = A$）

  A の転置行列

- このとき A の固有値は全て実数であり、$\mathbb{R}^n$ は A の固有ベクトルからなる正規直交基底を持つ：
  - $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n \in \mathbb{R}^n$
  - $\boldsymbol{u}_i \bullet \boldsymbol{u}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (1 \leqslant i, j \leqslant n)$
  - $A\boldsymbol{u}_i = \theta_i \boldsymbol{u}_i \quad (1 \leqslant i \leqslant n)$

Remark

- $\mathbb{R}^n$ の任意のベクトル $\boldsymbol{v}$ は、上の正規直交基底で次のように表せる：

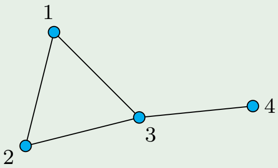
$$\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{v} \bullet \boldsymbol{u}_1)\boldsymbol{u}_1 + \cdots + (\boldsymbol{v} \bullet \boldsymbol{u}_n)\boldsymbol{u}_n$$

頂点集合　辺集合

- $G = (V, E)$：グラフ（$V = \{1, 2, \ldots, n\}$ とする）
- $A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}$ ：G の隣接行列

$$a_{i,j} = \begin{cases} 1, & \{i,j\} \in E \\ 0, & \{i,j\} \notin E \end{cases} \qquad (1 \leqslant i, j \leqslant n)$$

Example



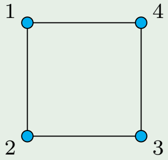
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Remark

- 隣接行列 A は常に対称行列

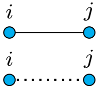
- 以後、G は k-正則と仮定（すなわち各頂点から出ている辺の本数が一定値 k）

Example



2-正則グラフ

- $A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}$: G の隣接行列　　$a_{i,j} = \begin{cases} 1, \\ 0, \end{cases}$



- $\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$
- $(A\mathbf{1})_i = \begin{pmatrix} a_{i,1} & \cdots & a_{i,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$

  $= a_{i,1} + \cdots + a_{i,n}$

  $=$ 頂点 i から出ている辺の本数

Lemma

- G : k-正則 $\Longleftrightarrow$ $\mathbf{1}$ は A の固有値 k に関する固有ベクトル

- $\theta_1 \geqslant \theta_2 \geqslant \cdots \geqslant \theta_n$ ：A の固有値

Remark

- $k = \theta_1$（すなわち k は A の最大固有値）

以下の議論では実際不要だが、表記上都合が良い

Theorem (Hoffman 限界)

- $\alpha(G) \leqslant \dfrac{-n\,\theta_n}{k - \theta_n}$

Today's Lesson

- 線形代数学の知識で Hoffman 限界を証明しよう!!

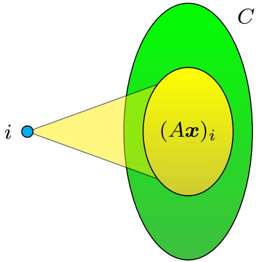
- C ：G の独立集合
- $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ ：C の特性ベクトル

$$x_i = \begin{cases} 1, & i \in C \\ 0, & i \notin C \end{cases} \qquad (1 \leqslant i \leqslant n)$$

1. $\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{x} = x_1^2 + \cdots + x_n^2 = |C|$

- $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ ：C の特性ベクトル　　$x_i = \begin{cases} 1, & i \in C \\ 0, & i \notin C \end{cases}$

- $$(A\boldsymbol{x})_i = \begin{pmatrix} a_{i,1} & \cdots & a_{i,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$
  $= a_{i,1}x_1 + \cdots + a_{i,n}x_n$
  $=$ 頂点 i と隣接する C の元の個数



2 $\color{red}{\boldsymbol{x} \bullet (A\boldsymbol{x})} = x_1(A\boldsymbol{x})_1 + \cdots + x_n(A\boldsymbol{x})_n \color{red}{= 0}$

$k = \theta_1$

- $\theta_1 \geqslant \theta_2 \geqslant \cdots \geqslant \theta_n$ ：A の固有値
- $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ ：A の固有ベクトルからなる $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底

$$A\boldsymbol{u}_i = \theta_i \boldsymbol{u}_i \quad (1 \leqslant i \leqslant n)$$

- $\boldsymbol{u}_1 = \dfrac{1}{\sqrt{n}}\mathbf{1}$ ：「$\boldsymbol{u}_1 \bullet \boldsymbol{u}_1 = 1$」となるように調整（正規化）

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

- $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)\boldsymbol{u}_1 + \cdots + (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)\boldsymbol{u}_n$
- $$\begin{aligned} A\boldsymbol{x} &= (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)A\boldsymbol{u}_1 + \cdots + (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)A\boldsymbol{u}_n \\ &= \theta_1(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)\boldsymbol{u}_1 + \cdots + \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)\boldsymbol{u}_n \end{aligned}$$

1. $\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 + \cdots + (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)^2$
2. $\boldsymbol{x} \bullet (A\boldsymbol{x}) = \theta_1(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 + \cdots + \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)^2$

1. $\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{x} = |C|$
2. $\boldsymbol{x} \bullet (A\boldsymbol{x}) = 0$

---

1. $\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 + \cdots + (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)^2$
2. $\boldsymbol{x} \bullet (A\boldsymbol{x}) = \theta_1(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 + \cdots + \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)^2$

$$
\begin{aligned}
-\theta_n|C| &= {\color{red}0} - \theta_n|C| \\
&= \theta_1(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 + \theta_2(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_2)^2 + \cdots + \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)^2 \quad (\text{2 より}) \\
&\quad - \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 - \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_2)^2 - \cdots - \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)^2 \quad (\text{1 より}) \\
&\geqslant \theta_1(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 \\
&\quad - \theta_n(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2 \\
&= (k - \theta_n)(\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)^2
\end{aligned}
$$

$\geqslant 0$

$k = \theta_1$

- $-\theta_n|C| \geqslant (k-\theta_n)(\boldsymbol{x}\bullet\boldsymbol{u}_1)^2$
  $$\iff \frac{(\boldsymbol{x}\bullet\boldsymbol{u}_1)^2}{|C|} \leqslant \frac{-\theta_n}{k-\theta_n}$$

- $\boldsymbol{u}_1 = \dfrac{1}{\sqrt{n}}\mathbf{1}$
- $\boldsymbol{x}\bullet\boldsymbol{u}_1 = \dfrac{x_1+\cdots+x_n}{\sqrt{n}} = \dfrac{|C|}{\sqrt{n}}$

$$\Longrightarrow \frac{(\boldsymbol{x}\bullet\boldsymbol{u}_1)^2}{|C|} = \frac{1}{|C|}\cdot\left(\frac{|C|}{\sqrt{n}}\right)^2 = \frac{|C|}{n}$$

$$\Longrightarrow |C| \leqslant \frac{-n\,\theta_n}{k-\theta_n}$$ ······ Hoffman 限界が証明できた!!

$k = \theta_1 \geqslant \theta_2 \geqslant \cdots \geqslant \theta_n$

- 不等号が生じた箇所を検討すると、次が分かる：

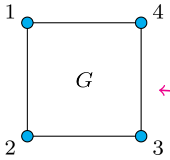
Lemma

- $|C| = \dfrac{-n\,\theta_n}{k - \theta_n}$ $\iff$ 各 $2 \leqslant i \leqslant n$ に対して「$\theta_i > \theta_n$」ならば「$\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_i = 0$」
$\iff$ $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{u}_1$ 及び「$\theta_i = \theta_n$」となる $\boldsymbol{u}_i$ 達の一次結合で表せる

$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_1)\boldsymbol{u}_1 + (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_2)\boldsymbol{u}_2 + \cdots + (\boldsymbol{x} \bullet \boldsymbol{u}_n)\boldsymbol{u}_n$

Exercise

- ここまでの議論を次の例で検証しよう!!

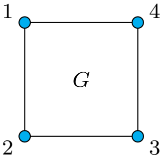


Hamming グラフ

$1 \leftrightarrow 00 \quad 4 \leftrightarrow 01$

$2 \leftrightarrow 10 \quad 3 \leftrightarrow 11$

- $\alpha(G) = 2$
- 最大独立集合は $\{1, 3\}$ 及び $\{2, 4\}$ の二つ



- $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
- $\boldsymbol{u}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_4 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
- $A\boldsymbol{u}_1 = \underset{k=\theta_1}{2}\,\boldsymbol{u}_1, \quad A\boldsymbol{u}_2 = \underset{\theta_2}{0}\,\boldsymbol{u}_2, \quad A\boldsymbol{u}_3 = \underset{\theta_3}{0}\,\boldsymbol{u}_3, \quad A\boldsymbol{u}_4 = \underset{\theta_4}{-2}\,\boldsymbol{u}_4$

- $\boldsymbol{u}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\\0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-1\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_4 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\\-1\end{pmatrix}$
- $A\boldsymbol{u}_1 = 2\,\boldsymbol{u}_1, \quad A\boldsymbol{u}_2 = 0\,\boldsymbol{u}_2, \quad A\boldsymbol{u}_3 = 0\,\boldsymbol{u}_3, \quad A\boldsymbol{u}_4 = -2\,\boldsymbol{u}_4$

- C : 独立集合
- $|C| \leqslant \dfrac{-n\,\theta_n}{k-\theta_n} = \dfrac{-4\cdot(-2)}{2-(-2)} = 2$

成分は 0 と 1 のみ!!

- $|C| = 2 \iff \boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{u}_1$ と $\boldsymbol{u}_4$ の一次結合

$$\iff \boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{u}_4 = \begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix} \text{ or } \boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{u}_4 = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$\iff C = \{1,3\} \text{ or } C = \{2,4\}$$

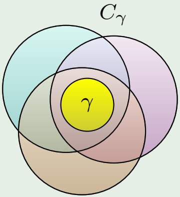
- $v \geqslant \ell \geqslant t$：自然数
- $\Omega = \{1, 2, \ldots, v\}$
- $C \subset \binom{\Omega}{\ell}$ ：t-交叉族

$\iff$「$|\alpha \cap \beta| \geqslant t$」が任意の $\alpha, \beta \in C$ について成立

Ω の ℓ 点部分集合全体の集合

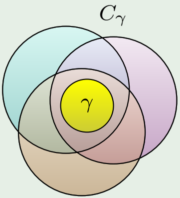
Example

- $\gamma = \{\gamma_1, \ldots, \gamma_t\} \in \binom{\Omega}{t}$
- $C_\gamma = \left\{\alpha \;\middle|\; \alpha \in \binom{\Omega}{\ell},\ \gamma \subset \alpha\right\}$
- $|C_\gamma| = \binom{v-t}{\ell-t}$



Example

- $\gamma = \{\gamma_1, \ldots, \gamma_t\} \in \binom{\Omega}{t}$
- $C_\gamma = \left\{\alpha \;\middle|\; \alpha \in \binom{\Omega}{\ell},\ \gamma \subset \alpha\right\}$
- $|C_\gamma| = \binom{v-t}{\ell-t}$



Theorem (Erdős–Ko–Rado の定理)

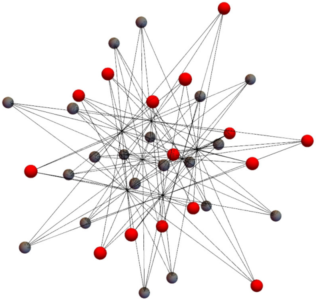
- $v \gg \ell$ とする
- 任意の t-交叉族 $C \subset \binom{\Omega}{\ell}$ に対して $|C| \leqslant \binom{v-t}{\ell-t}$ となる
- $|C| = \binom{v-t}{\ell-t}$ となるものは、上の例の形のものに限る

実際 $v > (t+1)(\ell - t + 1)$ で十分（Wilson, 1984）

- $G = (V, E)$
  - $V = \binom{\Omega}{\ell}$
  - $E = \left\{\{\alpha, \beta\} \;\middle|\; \{\alpha, \beta\} \in \binom{V}{2}, |\alpha \cap \beta| < t\right\}$
- $C \subset V$ ：t-交叉族 $\iff$ C ：G の独立集合

- 固有値・固有ベクトルの議論が有効!!

- $v = 7, \ell = 3, t = 1$ のとき
  - 右図：最小固有値 -3 に関する 6 次元固有空間への「V の埋め込み」
  - $\alpha(G) = \binom{7-1}{3-1} = 15$



- $t = 1$ のときは次の「安定性」も知られている

Theorem (Friedgut, 2008)

- 任意の $p \in (0, \frac{1}{2})$ に対して、次を満たす $c = c(p) > 0$ が取れる：
  - 「$\frac{\ell}{v} = p + o(1)$」とする
  - $C \subset \binom{\Omega}{\ell}$：1-交叉族
  - 「$|C| > (1 - \varepsilon) \cdot \binom{v-1}{\ell-1}$」ならば、ある $\gamma \in \binom{\Omega}{1}$ で

$$|C \backslash C_\gamma| < \varepsilon \cdot c(p) \cdot \binom{v}{\ell}$$

$\binom{\Omega}{\ell}$ のサイズ

となるものが取れる

- すなわち、「十分大きな」交叉族は、最適交叉族に「十分近い」!!