Zastosowania grafów w bioinformatyce. Wypisy z wykładów.
Wykład V. Algebraiczna teoria grafow I

Wprowadzone pojęcia: macierz przyległości, wartość własna, wektor własny, ślad macierzy.

Podstawowe twierdzenia

Poniżej macierz A oznacza zawsze macierz przyległości pewnego grafu $G = (V, E)$ o $n = |V|$ wierzchołkach, a $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots, \geqslant \lambda_n$ oznaczają wartości własne tej macierzy.

Twierdzenie 1. *Jeśli $B = [b_{ij}] = A^k$, to b_{ij} jest liczbą spacerów w G zaczynających się w wierzchołku i, a kończących się w wierzchołku j.*

Twierdzenie 2. *Jeśli G jest grafem d-regularnym, to d jest wartością własną A (tzn. $\lambda_1 = d$) odpowiadającą wektorowi własnemu $[1, 1, , \ldots, 1]$. Wartość ta jest niezdegenerowana (tzn. $\lambda_2 < d$) wtedy i tylko wtedy, gdy G jest spójny.*

Twierdzenie 3. *Wszystkie wartości własne macierzy A są rzeczywiste, a odpowiadające im wektory własne mają rzeczywiste współrzędne.*

Twierdzenie 4. *Wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne.*

Twierdzenie 5. *Istnieje baza ortogonormalna przestrzeni $\mathbb{R}^n$ składająca się z wektorów własnych macierzy A.*

Twierdzenie 6. *Jeśli C jest macierzą, której kolumnami są wektory bazy ortonormalnej składającej się z wektorów własnych A, a Λ oznacza macierz, na której przekątnej znajdują się wartości własne A, a wszystkie wyrazy poza przekątną są równe zeru, to*

$$\Lambda = CAC^T \quad i \quad A = C^T \Lambda C\,.$$

W szczególności, dla dowolnego k mamy

$$A^k = C\Lambda^k C^T\,.$$

Twierdzenie 7. $\mathrm{Tr}[A^k] = \sum_i \lambda_i^k$*, gdzie każdą wartość własną liczymy z odpowiadającą jej krotnością. W szczególności:*

$\mathrm{Tr}[A] = \sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$,
$\mathrm{Tr}[A^2] = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = \sum_{v \in V} \deg(v) = 2|E|$,
$\mathrm{Tr}[A^3] = \sum_{i=1}^n \lambda_i^3$ *jest liczbą trójkątów w G pomnożoną przez sześć.*

Twierdzenie 8. *Jeśli macierz spełnia pewne równanie, to każda wartość własna macierzy A takie równanie również spełnia.*

Czyli, na przykład, jeśli dla macierzy A zachodzi

$$A^5 - 4A^4 + 3A + 5I = 0,$$

to dla każdej wartości własnej mamy

$$\lambda^5 - 4\lambda^4 + 3\lambda + 5 = 0\,.$$

Zauważmy, że pierwsze z tych równań dotyczy macierzy, a drugie liczb.