Frivillig opgave: Egenværdier og egenvektorer

Jonas S. Juul

January 9, 2018

1 Hvad finder jeg i dette dokument?

Kurset "Lineær Algebra" er en generel introduktion til Lineær Algebra, af og til tonet mod et specifikt fagområde – f.eks. fysik. Det forstås at lineær algebra er vigtigt, at man bruger det hele tiden, og eksempler såsom spinsystemer betragtes for at give fornemmelsen af at det virkelig passer: Lineær algebra *er* vigtigt, og vi bruger det faktisk hele tiden. Men Lineær Algebra er et førsteårskursus og ud over enkelte opgaver i Speciel Relativitetsteori, forbliver anvendelsen af faget et løfte, som (forhåbentligt) bliver indfriet i de senere år på fysikstudiet. Dette dokument har to formål; 1) At give en udfordrende opgave i beregning af egenværdier og egenskaber ved egenvektorer; 2) at give et konkret eksempel på anvendelsen af lineær algebra, egenværdier og egenvektorer, som jeg selv stødte på efter mit 3. år på fysik.

I de følgende sektioner vil du stifte bekendskab med dele af et forskningsprojekt jeg udførte på sommerskolen *Kupcinet-Getz International Summer School* (link) i Israel. Det er et projekt indenfor det matematiske felt graf-teori, som er relateret til emner indenfor biokompleksitet og matematisk fysik. Jeg vil give en kort introduktion til (en af) baggrunden(e) for projektet, og herefter formulere opgaver, som guider gennem dele af beviserne jeg lavede på sommerskolen og i tiden efter. Til sidst vil jeg formulere nogle tanker jeg går med, og hvis du synes det er interessant og sjovt, så kan du forsøge at hjælpe mig med at finde svar på dem. Projektet er lavet sammen med min gode ven Chris H. Joyner, som er matematiker og Post Doc. (den midlertidige stilling som kommer efter PhD hvis man vil være forsker..) på Queen Mary University i London. Vi har sammenfattet vores resultater i en artikel, som endnu ikke er online, så hvis du laver denne opgave er du blandt de 10 første i verden, som ser disse resultater.

Der er en øl/sodavand på højkant til en rigtig flot besvarelse, som kan sendes til mig på email. (Helst inden uge 1 af blok 3, men jo før jo bedre).
Rigtig god fornøjelse!
Jonas S. Juul
(*jonas.juul@nbi.ku.dk*)

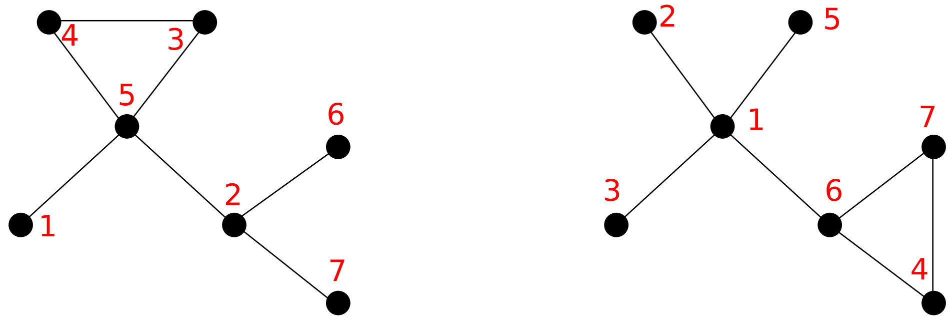

Figure 1: Eksempel på to grafer bestående at “punkter”, forbundet af “linjer”. Punkterne er i hver af graferne nummereret med tallene 1-7. Nummereringen er arbitrær, og er ikke del af graferne – det er noget vi tilføjer for at holde styr på punkterne, og kunne beskrive graferne matematisk. Graf-isormorfisme problemet forsøger at finde en hurtig metode til at vurdere om to grafer i virkeligheden er den samme.

2 Faglig introduktion til projektet

Der er flere forskellige grunde til at interessere sig for egenværdier og egenvektorer af de matricer vi skal se på i dette projekt, men jeg vil fokusere på én bestemt begrundelse, som man ikke behøver kende noget til kvantemekanik for at forstå. Betragt de to “grafer” (matematisk udtryk for en samling af “punkter” forbundet af “linjer”, mange fysikere ville kalde dem “netværk” i stedet) i Figur 1. Ved at se på disse to grafer (og ignorere numrene) kan vi se at de to grafer er forskellige: Man kan ikke nummerere punkterne i graferne (fra 1 til 7) på en måde således at punkt i har præcis de samme linjer til andre punkter i begge grafer for alle $i = 1 \ldots 7$.

I dette tilfælde består vores grafer kun af 7 punkter og 7 linjer, så det er med det samme muligt at se forskel på graferne med det blotte øje, men hvad hvis der var 10.000 punkter og 30.000 punkter? I så fald kunnen vi (nok) ikke forsøge at se forskel med øjet, men måtte have fat i værktøjskassen med lineær algebra. **Men hvorfor vil vi gerne kende forskel på graferne?** Der er mange anvendelser, men én kunne være følgende: En kemiker finder en kemisk forbindelse, og vil tjekke hvilken forbindelse det er i en database. I så fald må forbindelsens bestanddele (og linjerne imellem dem) tjekkes mod en række forskellige muligheder i databasen og det reduceres til spørgsmålet “er grafen af punkter og linjer i min kemiske forbindelse den samme som grafen i databasen?”. Og det er dette spørgsmål som mange mennesker søger svar på (Det hedder “graph isomorphism problem” – du kan google det hvis du er interesseret).

Én metode til at kende forskel på grafer kunne være

1. Repræsenter graferne på en bestemt matrixform
2. Udregn *noget* for begge matricer, sammenlign resultaterne og hvis resultaterne ikke er ens kan konkluderes at graferne er forskellige.

Når man har fundet en matrixrepræsentation kunne én mulighed for det *noget* man skal udregne for matricerne være matricernes egenværdier. Det er korrekt, at hvis to grafers matrixrepræsentationer har forskellige egenværdier, så er graferne helt sikkert forskellige, men desværre vides nu at ikke alle forskellige grafer har forskellige egenværdier for alle matrixrepræsentationer: to forskellige grafer godt have præcis samme egenværdier (for alle de matricer man har tænkt på). For nogle år siden blev der så fremført en hypotese: Måske kan vi kende forskel på grafer, som er forskellige, men har samme egenværdier, ved at kigge på nogle bestemte egenskaber i matricernes egenvektorer. Det er dén hypotese vi gerne vil modbevise i dette projekt.

3 Opgaver

3.1 Matrixrepræsentation

Vi skal fokusere på "Laplace"-repræsentationen af graferne. Laplace-matricen for en graf konstrueres ud fra to kvadratiske matricer. Den første matrix er "Degree"-matricen D, som er en diagonalmatrix med indgangen D_{ii} lig antallet af linjer fra punktet i til andre punkter. F.eks. er $D_{11} = 1$ og $D_{22} = 3$ for grafen til venstre i Figur 1.

Den anden matrix er "Adjacency"-matricen ("ved-siden-af"-matricen), som også er en (symmetrisk) kvadratisk matrix, og defineret ved

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{, hvis der findes en linje mellem punkt } i \text{ og punkt } j \\ 0 & \text{, ellers} \end{cases} \tag{1}$$

Vi definerer så Laplace-matricen som

$$L = D - A \tag{2}$$

Opgave: Opskriv matricerne D, A og L for de to matricer i Figur 1

3.2 Egenværdier I

Opgave: Regn egenværdierne og de tilhørende egenvektorer af Laplace-matricerne for de to grafer i Figure 1 f.eks. vha. Maple eller Matlab.

For fremtiden ignorerer vi alle par af egenværdier og egenvektorer for hvilke det enten er sandt at 1) Egenvektoren har mindst én indgang som er 0, eller 2) egenrummet har dimension større end 1 (dvs der findes flere egenværdier med samme værdi). Vi refererer til par af egenværdier og egenvektorer, som ikke sorteres fra på disse kriterier som *generiske* egenværdier/-vektorer. **Opgave: Konkluder at matricerne har de samme generiske egenværdier**.

3.3 Blade og loops

I nogle projekter skal man have en "god idé" og i dette er ideen følgende: Vi vil fokusere på grafer, som har par af "blade". Et *Blad* er et punkt som har én linje til et andet punkt, som f.eks. punkt 1, 6 og 7 i venstre graf og punkt 3, 2 og 5 i højre graf i Figur 1. Et *par af blade* er to blade, hvis eneste forbindelse er til det samme punkt, f.eks. punkterne 6 og 7 i den venstre graf, som har linjer til punkt 2.

Opgave: Forestil dig en graf, som har et par af blade. Nummerer disse punkter (f.eks. med 1 og 2) og det punkt de er har en linje til (f.eks. 3). Vis at vektoren $v_0 = (1 \quad -1 \quad 0 \quad \ldots \quad 0)^t$ er egenvektor til Laplace-matricen for denne graf. Hvad er den tilhørende egenværdi?

Opgave: Forestil dig samme graf, men hvor bladene 1 og 2 nu er forbundet med en linje. Vis at $v_0 = (1 \quad -1 \quad 0 \quad \ldots \quad 0)^t$ også er egenvektor for Laplace-matricen for denne graf. Hvad er den tilhørende egenværdi nu?

Ved at indsætte en linje mellem de to blade har vi skabt en "trekant" af punkter forbundet af linjer – det kalder vi et *loop*.

3.4 Egenvektorer

Vi ved altså nu at Laplacematricen, L, for en graf, $\mathcal{G}$, med et par af blade har egenvektoren v_0 og Laplacematricen, $\bar{L}$, for grafen, $\bar{\mathcal{G}}$, som er identisk, bortset fra at den også har en linje mellem paret af bladene, også har egenvektor v_0.

Opgave: Argumenter for at v_0 ikke er en generisk egenvektor

Opgave: Argumenter for at der for alle generiske egenvektorer, v_i, gælder at indgang 1 er lig indgang 2. altså $v_i(1) = v_i(2)$.

Opgave: Skriv $\bar{L} = L + P$, hvor P er en matrix. Bestem P

Opgave: Argumenter for at alle egenvektorer for L også er egenvektorer for $\bar{L}$

Opgave: Konkluder at alle egenværdier er ens for L og $\bar{L}$ på nær egenværdien der tilhører v_0

Opgave: Forklar hvordan man fra én graf kan konstruere 2 grafer med samme generiske egenværdier og egenvektorer (Hint: kan de to grafer i Figur 1 konstrueres ud fra den samme "moder"-graf?)

3.5 Fortegnsskift

Vi har altså fundet en måde at konstruere grafer med ens generiske egenværdier og egenvektorer. Der findes uendeligt mange forskellige grafer med par af blade, og vi konkluderer at vi kan skabe uendeligt mange par af grafer med ens egenværdier og egenvektorer.

I Introduktionen blev nævnt at man håbede at kunne kende forskel på forskellige grafer med ens egenværdier ved at sammenligne nogle bestemte egenskaber i de generiske egenvektorer til laplace matricerne for graferne. Der var 2 egenskaber man havde i tankerne at sammenligne. Nu vil vi vise at én af dem ikke duer: At tælle antallet af fortegnsskift i generisk egenvektor i over linjer i grafen.

Definition: Fortegnsskift i egenvektor n. Sorter egenværdierne af laplacematricen fra mindst til størst, og nummerer dem $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_N$. Tag nu en egenvektor v_n. Til denne vektor knytter vi tallet μ_n, som er antallet af linjer der forbinder to punkter i og j, hvor fortegnet af $v_n(i)$ er forskelligt fra fortegnet af $v_n(j)$. Vi kan skrive det matematisk: Hvis $\mathcal{E}(G)$ er linjerne i grafen, og en linje mellem punkterne i og j skrives (i, j), skriver vi $\mu_n = \{(i, j) \in \mathcal{E}(G) : v_n(i)v_n(j) < 0\}$ for generiske egenvektorer v_n.

Opgave: Betragt grafen $\mathcal{G}$ med et par af blade og $\bar{\mathcal{G}}$ som skabes fra denne ved at indsætte en linje mellem et par af blade (samme situation som tidligere). Argumenter for at μ_n ikke ændrer sig for egenvektorerne af L og $\bar{L}$ når linjen indsættes mellem paret af blade.

Opgave: Forklar hvordan vi kan konstruere par af grafer, som er forskellige, men har samme generiske egenværdier og samme antal fortegnsskift i alle generiske egenvektorer n.

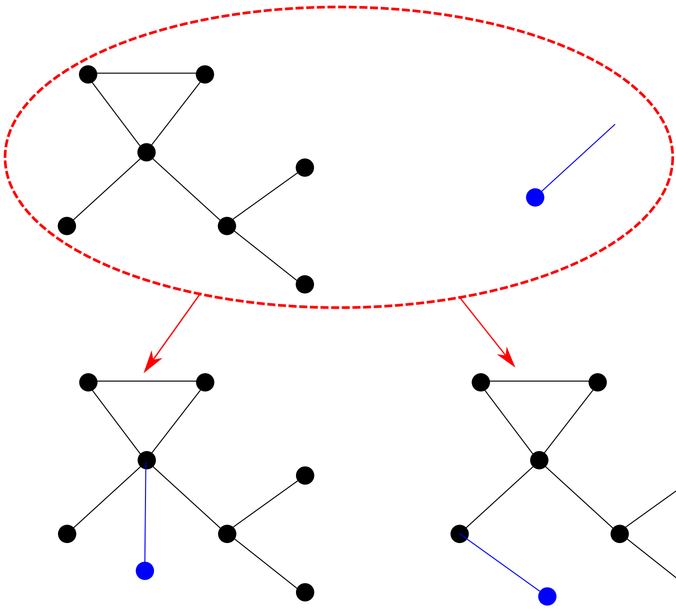

Figure 2: Illustration til fri opgave: Kan vi finde en måde at skabe par af grafer med samme egenværdier og samme antal fortegnsskift i alle generiske egenvektorer ved at "lime" to grafer sammen?

Opgave: Konkluder at vi kan konstruere uendeligt mange af disse

Vi har nu vist at der findes uendeligt mange par af grafer som både har samme egenværdier og samme antal fortegnsskift i alle generiske egenvektorer, og altså modbevist påstanden: "Hvis to grafer har samme egenværdier, men er forskellige, kan vi kende forskel på dem ved at tælle antallet af fortegnsskift i alle generiske egenvektorer og sammenligne resultatet for hver af graferne".

4 Fri opgave

Hvis du er grebet af opgaven og gerne vil finde ud af noget helt ny matematik kan du tænke over følgende opgave. I ovenstående opgave har vi skabt par af grafer med samme egenværdier og samme antal fortegnsskift i de generiske egenvektorer. Det har vi gjort ved at indsætte linjer imellem punkter i graferne. Ved denne algoritme får vi dog konstrueret nye grafer, som har det samme antal punkter som det vi starter ud med – graferne "vokser" ikke. Det ville være rigtig interessant at finde ud af om man i stedet for at blot indsætte linjer, kunne "lime" en graf $\mathcal{G}_1$ og en anden graf $\mathcal{G}_2$ sammen på to forskellige måder, og derved få to nye grafer som har samme egenværdier og samme antal fortegnsskift i egenvektorerne. Kan du komme op med en metode til at gøre dette?

Start f.eks. med at bruge Maple eller Matlab til at konstuere en "moder"-graf $\mathcal{G}_1$ og tilføj så en et punkt og en linje til denne graf, så du skaber en ny graf $\bar{\mathcal{G}_\infty}$. Sammenlign nu generiske egenværdier og fortegnsskift i egenvektorerne på forskellige sådanne $\bar{\mathcal{G}_\infty}$, og se om du får par, som har samme egenværdier og fortegnsskift i alle generiske egenvektorer. Når du har undersøgt dette vha computer finder du måske et mønster i hvilke "par" af grafer, som har samme egenværdier og samme antal fortegnsskift i egenvektorerne, og kan derfra matematisk bevise at den nyfundne metode virker. Jeg har forsøgt at illustrere denne metode at lave 2 nye grafer på i Figur 2.