计算机科学
COMPUTER SCIENCE

有向图的埃尔米特拉普拉斯矩阵研究

刘楷文，黄增峰

引用本文

刘楷文，黄增峰. 有向图的埃尔米特拉普拉斯矩阵研究[J]. 计算机科学, 2023, 50(1): 69-75.

LIU Kaiwen, HUANG Zengfeng. Hermitian Laplacian Matrix of Directed Graphs[J]. Computer Science, 2023, 50(1): 69-75.

相似文章推荐（请使用火狐或 IE 浏览器查看文章）

Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

基于微观行为的自适应多注意力会话推荐

Modeling User Micro-Behavior via Adaptive Multi-Attention Network for Session-based Recommendation

计算机科学, 2022, 49(11): 117-125. https://doi.org/10.11896/jsjkx.210900061

面向网络安全训练评估的受训者行为描述模型

Model for the Description of Trainee Behavior for Cyber Security Exercises Assessment

计算机科学, 2022, 49(6A): 480-484. https://doi.org/10.11896/jsjkx.210800048

基于矩阵论的一致性控制算法收敛速度分析

Matrix Theory Aided Convergence Analysis of Consensus Behavior in FANET with Beacon Loss

计算机科学, 2021, 48(6): 288-295. https://doi.org/10.11896/jsjkx.201000137

有向图*k*顶点导出子图的DNA粘贴算法

DNA Sticker Algorithm for *k*-vertex Induced Sub-graphs of Directed Graphs

计算机科学, 2019, 46(1): 309-313. https://doi.org/10.11896 / j.issn.1002-137X.2019.01.048

基于数据源向图的数据库设计中数据关系的表示工具

Representation Tool of Data Relations in Database Design Based on Data Source-target Digraph

计算机科学, 2017, 44(Z6): 470-474. https://doi.org/10.11896/j.issn.1002-137X.2017.6A.105

计算机科学 COMPUTER SCIENCE
http://www.jsjkx.com
DOI:10.11896/jsjkx.211100067

有向图的埃尔米特拉普拉斯矩阵研究

刘楷文[1]　黄增峰[2]
1 复旦大学计算机科学技术学院　上海 200433
2 复旦大学大数据学院　上海 200433
(jwliu19@fudan.edu.cn)

摘　要　拉普拉斯矩阵对于无向图的研究具有重要意义,其特征值反映了图的部分结构与性质,据此可以设计有效的算法以解决图上一些相关的任务,如划分、聚类等。将拉普拉斯矩阵推广至有向图,一大难点是失去了对称性,特征值可能为复数。为了规避该问题,最近的研究引入了 k 次单位根作为边权,定义了复数域上的拉普拉斯矩阵,该矩阵是埃尔米特矩阵。文中提出了有向边的旋转角的概念,对该矩阵进行了推广,证明了其具有与无向图拉普拉斯矩阵类似的代数性质;给出了有向图的约束方程组和有向环路的定义,证明了拉普拉斯矩阵最小特征值为 0、约束方程组有解以及图中任意有向环路旋转角为 $2l\pi(l\in\mathbb{Z})$ 这三者间的等价性。最后给出了一些相关推论及应用。

关键词:谱方法;有向图;埃尔米特拉普拉斯矩阵;有向环路
中图法分类号　TP301.6

Hermitian Laplacian Matrix of Directed Graphs

LIU Kaiwen[1] and HUANG Zengfeng[2]
1 School of Computer Science,Fudan University,Shanghai 200433,China
2 School of Data Science,Fudan University,Shanghai 200433,China

Abstract　Laplacian matrix plays an important role in the research of undirected graphs. From its spectrum,some structure and properties of a graph can be deduced. Based on this,several efficient algorithms have been designed for relevant tasks in graphs,such as graph partitioning and clustering. However,for directed graphs,the Laplacian is no longer symmetric,resulting in the complex eigenvalues,which are meaningless in most scenes. To circumvent this,the k'th root of unity are introduced as the weights of directed edges in recent researches,and the corresponding Hermitian Laplacian is defined. In this paper,the rotation angle of a directed edge and the generalized Hermitian Laplacian are introduced. It is shown that the Hermitian Laplacian has inherited some useful algebraic properties from ordinary Laplacian. To study the relations between directed graphs and the related Hermitian Laplacian,the definitions of constraint equations and directed cycle are proposed. It is proved that the following three statements are equivalent:1)the minimum eigenvalue of Hermitian Laplacian is equal to 0;2)the constraint equations have at least a solution;3)for each directed cycle in the graph,its rotation angle is equal to $2l\pi(l\in\mathbb{Z})$. Finally,some corollaries and applications are presented.

Keywords　Spectral method,Directed graph,Hermitian laplacian matrix,Directed cycle

1　引言

谱方法在图论研究与应用中起着基础且重要的作用,一般来说它的研究对象为图的邻接矩阵和拉普拉斯矩阵以及其他的一些变种矩阵,如转移概率矩阵,从这些矩阵的谱中往往能推导出图的特定结构与性质[1]。对于无向图,目前已有许多使用谱方法的理论研究,涉及无向图的诸多性质,如扩张性(Expansion)[2]、随机游走的收敛性[3]等。理论研究也促进了相关算法的设计,如谱聚类[4-6]、图像分割[7-8]等。

相比无向图,有向图的研究相对较少,主要原因是,若直接将无向图的邻接矩阵推广至有向图,则会失去对称性,即特征值不一定属于实数域,导致无向图中的一些结论失去意义。因此,邻接矩阵和拉普拉斯矩阵在有向图上的推广并没有统一的定义。目前两种矩阵在实数域上的推广,分别基于转移概率矩阵[9-10]和若尔当标准形[11-12]。

文献[13]从整数环 Z_k 上的方程组最大满足问题(Max-2-Lin(k))出发,引入了 k 次单位根($x^k=1$)作为有向边的权值,构造了对应的有向图,同时定义了相应的复数域上的拉普拉斯矩阵。该矩阵是埃尔米特矩阵,因此有实数特征值。文献[13]还给出了其最小特征值与方程组满足程度之间的关系。文献[14-15]承接文献[13]的研究,分别引入 i,$\lceil 2\pi k \rceil$ 次单位根作为有向边的权值,设计了有向图的聚类算法。

到稿日期:2021-11-05　返修日期:2022-05-06
通信作者:黄增峰(huangzf@fudan.edu.cn)

然而，文献[13]着重于方程组的研究，忽略了在该情形下拉普拉斯矩阵与有向图的联系；其次，上述研究为了解决特定问题，只考虑了特殊情况，对于更一般的情形，有向图及其相关矩阵的性质仍不甚明了。

本文的贡献主要有两个方面：

(1)引入了有向边旋转角的概念，对文献[13]定义的拉普拉斯矩阵进行了推广，并证明了推广后的拉普拉斯矩阵仍具有相似的基本性质；以文献[13]研究的方程组为桥梁，建立了拉普拉斯矩阵最小特征值与有向图的联系，证明了拉普拉斯矩阵最小特征值为0、约束方程组有解以及图中任意有向环路旋转角为 $2l\pi(l\in\mathbb{Z})$ 这三者间的等价性。

(2) 对于一般有向图，给出了使得拉普拉斯矩阵最小特征值为0的构造方法；证明了当最小特征值为0时，其特征向量可视为从点集到复平面的嵌入映射，并保持顶点间的有向约束，则图划分可以转换为复平面上的点划分；讨论了该矩阵在有向图划分和知识图谱嵌入上的应用。

综上所述，本文给出了一种一般性的有向图拉普拉斯矩阵的定义，并探究了该矩阵的谱性质与有向图结构特征间的联系。最新的研究[16]表明，许多图深度学习算法缺乏有效手段来表示有向图的结构特征，如边的有向性等，而本文提出的有向图拉普拉斯矩阵，在该方向具有一定的应用价值。

2 符号定义及基本性质

本节首先给出了复数域上有向图相关矩阵的定义，然后给出了一些基本性质。为了简单起见，本文仅考虑简单图，即图中没有重边和自环。其中，重边指1条以上相同起点和终点的有向边，自环指1条起点和终点相同的有向边。

有向图 $G=(V,E,w)$ 由点集 V(编号1到 n)、边集 E(编号1到 m)和权重函数 $w:V\times V\to\mathbb{R}_{\geqslant 0}$ 组成。若从顶点 u 出发到顶点 v 有一条有向边，记为 $u\to v$，则其权重记为 $w(u,v)$。顶点 u 的入度定义为所有入边的权重之和 $d_u^{\text{in}}=\sum_{v:v\to u}w(v,u)$，类似地，其出度 $d_u^{\text{out}}=\sum_{v:u\to v}w(u,v)$ 定义为所有出边的权重之和，其总度数为 $d_u=d_u^{\text{in}}+d_u^{\text{out}}$。对于任意点集 V 的子集 S，定义其容积 $vol(S)=\sum_{u\in S}d_u$。

给定有向图 G，考虑映射 $\theta:V\times V\to\mathbb{R}_{\geqslant 0}$，即每条有向边对应于复平面内的一个旋转角($\theta$ 为可调参数，本文主要研究其通用性质)，因此其复数域上的邻接矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 可定义为：

$$\boldsymbol{A}_{u,v}=w(u,v)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}+w(v,u)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{v,u}}$$

显然 $\overline{\boldsymbol{A}_{v,u}}=\boldsymbol{A}_{u,v}$，因此邻接矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是埃尔米特矩阵。同时，定义有向图 G 的度数矩阵 $\boldsymbol{D}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为对角矩阵，并且对于每个顶点 u 满足 $\boldsymbol{D}_{u,u}=d_u$。因此，类比于无向图，有向图 G 的拉普拉斯矩阵可以定义为 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$，其对应的归一化拉普拉斯矩阵为 $\boldsymbol{N}=\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{-1/2}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$。通过简单计算可知，$\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{N}$ 都为埃尔米特矩阵。

图1给出了一个包含3个节点的简单有向图示例，其原始边权都为1，赋予每条有向边一个旋转角，则其最终边权如图1所示。

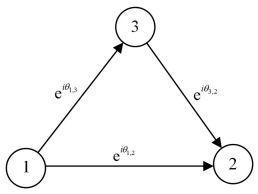


图1 简单有向图示例

Fig. 1 Example simple directed graph

图1所对应的拉普拉斯矩阵为：

$$\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}2 & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{1,2}} & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{1,3}}\\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{1,2}} & 2 & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{3,2}}\\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{1,3}} & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{3,2}} & 2\end{bmatrix}$$

类似地，根据无向图拉普拉斯矩阵的关联矩阵分解，可以定义有向图 G 的复关联矩阵(Incidence Matrix) $\boldsymbol{B}=[\boldsymbol{\chi}_1,\boldsymbol{\chi}_2,\cdots,\boldsymbol{\chi}_m]^*$。其中，$\chi_j=\boldsymbol{\delta}_u-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{u,v}}\boldsymbol{\delta}_v$，$u$ 为第 j 条边的起点，v 为第 j 条边的终点，$\boldsymbol{\delta}_u$ 为 n 维列向量，满足第 u 维值为1，其他值为0，因此 $\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{m\times n}$。最后定义边权矩阵 $\boldsymbol{W}\in\mathbb{R}^{m\times m}$，它是对角矩阵，对角线上的值为对应边的权重。

注意，图中任意一条有向边 $u\to v$ 在边集 E 中都有对应编号 j。为了简化符号，本文会同时使用 (u,v) 和 j 指代同一条有向边。

下面通过定理1给出上述矩阵的一些基本性质。文献[13]证明了当 $\theta=2\pi l/k$，$l,k\in\mathbb{Z}_{>0}$ 时，定理1中的性质(3)—性质(5)成立。本文用不同的证明方法，证明了更一般的情形。

定理1 给定有向图 G 和映射 θ，则其对应的拉普拉斯矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和归一化拉普拉斯矩阵 N 有如下性质：

(1)边分解。$\boldsymbol{L}=\sum_{j\in E}w(u_j,v_j)\boldsymbol{\chi}_j\boldsymbol{\chi}_j^*$，其中 u_j，v_j 分别为有向边 j 的起点和终点。

(2)关联矩阵分解。$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{B}^*\boldsymbol{W}\boldsymbol{B}$。

(3)二次型。对于任意 $x\in\mathbb{C}^n$，有：

$$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}=\sum_{(u\to v)\in E}w(u,v)\left|x_u-x_v\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}\right|^2$$

$$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}=\sum_{(u\to v)\in E}w(u,v)\left|\frac{x_u}{\sqrt{d_u}}-\frac{x_v}{\sqrt{d_v}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}\right|^2$$

(4)$\boldsymbol{L}$ 与 $\boldsymbol{N}$ 都为半正定矩阵。

(5)令 $\boldsymbol{\lambda}$ 为 $\boldsymbol{N}$ 的一个特征值，则有 $0\leqslant\lambda\leqslant 2$。

证明：首先假设有向图 G 为弱连通图，即任意两个顶点间都有至少一条无向路径相连。

(1)对于任意有向边 $j\in E$，有(此处为简化符号，暂时忽略下标)：

$$\begin{aligned}w(u,v)\boldsymbol{\chi}_j\boldsymbol{\chi}_j^*&=w(u,v)(\boldsymbol{\delta}_u-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{u,v}}\boldsymbol{\delta}_v)(\boldsymbol{\delta}_u^*-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}\boldsymbol{\delta}_v^*)\\&=w(u,v)(\boldsymbol{\delta}_u\boldsymbol{\delta}_u^*+\boldsymbol{\delta}_v\boldsymbol{\delta}_v^*-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}\boldsymbol{\delta}_u\boldsymbol{\delta}_v^*-\\&\quad\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_{u,v}}\boldsymbol{\delta}_v\boldsymbol{\delta}_u^*)\end{aligned}$$

容易看出，对于有向边 j，括号内前两项表示在其起点和终点的对角项上加上边 j 的权值，后两项则表示在其起点和终点的交叉项上加上边 j 的权值乘以边 j 在复平面上所对应的角度。

因此，遍历图中所有有向边后，前两项的加和恰为上述

定义的度数矩阵 $\boldsymbol{D}$，后两项的加和恰为上述定义的邻接矩阵 $\boldsymbol{A}$，根据拉普拉斯矩阵的定义 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}$，(1)成立。

(2)根据关联矩阵定义 $\boldsymbol{B}=[\boldsymbol{\chi}_1,\boldsymbol{\chi}_2,\cdots,\boldsymbol{\chi}_m]^*$，容易看出(2)为(1)的矩阵形式。

(3)首先考虑 $\boldsymbol{L}$，根据(2)有：

$$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{B}^*\boldsymbol{W}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{B}\boldsymbol{x})^*\boldsymbol{W}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{x})$$

根据定义有 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^m$，通过简单计算得到：

$$(\boldsymbol{B}\boldsymbol{x})_i=\boldsymbol{\chi}_i^*\boldsymbol{x}=x_u-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}x_v$$

其中，u,v 为有向边 i 的起点和终点，然后将 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$ 代入原式有：

$$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}=\sum_{(u\to v)\in E}w(u,v)\,|x_u-x_v\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}|^2$$

因为 $\boldsymbol{N}=\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{-1/2}$，考虑 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{x}$，然后代入上式有：

$$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{y}=\sum_{(u\to v)\in E}w(u,v)\left|\frac{x_u}{\sqrt{d_u}}-\frac{x_v}{\sqrt{d_v}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}\right|^2$$

(4)矩阵 $\boldsymbol{M}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 为半正定矩阵，当且仅当 $\boldsymbol{M}$ 为埃尔米特矩阵，且对于任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}\geqslant 0$。根据(3)，显然 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{N}$ 都为半正定矩阵。

(5)显然 $\lambda\geqslant 0$，因为 $\boldsymbol{N}$ 为半正定矩阵。因此只需证 $\lambda\leqslant 2$。根据定义 $\boldsymbol{N}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$，则有 $\lambda=1-\mu$，其中 μ 为 $\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$ 的一个特征值。问题转化为证明对所有 $\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2}$ 的特征值 μ，都有 $|\mu|\leqslant 1$。

令 $\rho(\boldsymbol{M})$ 表示方阵 $\boldsymbol{M}$ 的谱半径，$\|\boldsymbol{M}\|_1$ 为方阵 $\boldsymbol{M}$ 的 1-范数，即 $\boldsymbol{M}$ 的最大绝对列之和。则有：

$$\begin{aligned}|\mu|&\leqslant\rho(\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2})\\&=\rho(\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1})\\&\leqslant\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1}\|_1\\&=\max_{1\leqslant j\leqslant n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{A_{i,j}}{d_j}\right|\\&=1\end{aligned}$$

其中，方阵的谱半径为其所有特征值绝对值的最大值，因此第一个不等式成立；第一个等式成立则是因为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1}=\boldsymbol{D}^{1/2}(\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{-1/2})\boldsymbol{D}^{-1/2}$，即两个矩阵相似，其谱半径相同；而谱半径为所有矩阵诱导范数的下界，则第二个不等式成立；最后根据矩阵 1-范数的定义，第二个等式成立。

最后，考虑一般的简单有向图 G，假设其可划分为 k 个弱连通分量，每个弱连通分量 G_i 有对应的 $\boldsymbol{L}_i,\boldsymbol{N}_i$。经过对顶点适当的重新编号，有向图 G 对应的 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{N}$ 可以表示为 $\boldsymbol{L}_i,\boldsymbol{N}_i$ 的直和，因此不难验证上述性质对 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{N}$ 同样成立。证毕。

3 最小特征值与有向环路

本节给出了拉普拉斯矩阵 $\boldsymbol{L}$ 及归一化拉普拉斯矩阵 $\boldsymbol{N}$ 的最小特征值为 0 的充要条件。为了简单起见，本文假设有向图 G 为弱连通图，注意弱连通图的结论容易推广至一般有向图上。

根据瑞利商定理(Rayleigh Quotient)，$\boldsymbol{N}$ 的最小特征值可表示为：

$$\lambda_1(\boldsymbol{N})=\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n\setminus\{0\}}\frac{\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{x}}=\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n\setminus\{0\}}\frac{\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}}$$

则根据定理 1 容易看出，参数 θ 的选择会极大地影响 $\boldsymbol{N}$ 的最小特征值 $\lambda_1(\boldsymbol{N})$，且当 θ 为零映射时，有向图 G 会退化为无向图，此时 $\lambda_1(\boldsymbol{N})=0$。考虑非平凡映射 θ，G 为弱连通图，则 $\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}\neq 0$，因此 $\lambda_1(\boldsymbol{N})=0$ 当且仅当存在 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n\setminus\{0\}$，$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}=0$，即 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$。

根据定理 1，该二次型可按有向边分解为多个非负项之和，意味着每个非负项都为 0。则对 $\lambda_1(\boldsymbol{N})$ 的研究可以转化为对每一项为 0 的条件的研究，下面给出该条件的定义。

定义 1 给定有向图 G 和映射 θ，构造一次线性方程组如下，对第 j 条有向边 $u\to v$，其对应的第 j 个方程满足：

$$\gamma_u=\gamma_v+\theta_{u,v}+2k_{u,v}\pi$$

称该方程组为 (G,θ) 的约束方程组，其包含的 m 个方程分别对应每条有向边，$n+m$ 个变量分别对应 $\{\gamma_i\}_n,\{k_j\}_m$，其中 $\gamma_i\in\mathbb{R}$ 对应顶点 i 在复平面上的角度，$k_j\in\mathbb{Z}$ 为边 j 的松弛变量。

引理 1 给定有向图 G 和映射 θ，$\lambda_1(\boldsymbol{N})=0$ 当且仅当 (G,θ) 的约束方程组有解。

证明：首先是充分性证明。假设该方程组的一个解为 $\{\gamma_i\}_n,\{k_j\}_m$。对于图中顶点 u，令 $x_u=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_u}$，有 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\mathbb{C}^n\setminus\{0\}$，根据定理 1 有：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}&=\sum_{(u\to v)\in E}w(u,v)\,|x_u-x_v\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}|^2\\&=\sum_{(u\to v)\in E}w(u,v)\,|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_u}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_v}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}|^2\\&=\sum_{(u\to v)\in E}w(u,v)\,|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_u}(1-\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}k_{u,v}})|^2\\&=0\end{aligned}$$

然后证明必要性。若存在 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n\setminus\{0\}$，$\boldsymbol{x}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}=0$，则对于图中任意一条有向边 $u\to v$，根据三角不等式有：

$$0=|x_u-x_v\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}|\geqslant||x_u|-|x_v||$$

令 $r=|x_u|=|x_v|$，有 $x_u=r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_u}$，$x_v=r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_v}$，其中 $\gamma_u,\gamma_v\in\mathbb{R}$，显然 $r>0$，否则 $x=0$ 与假设相矛盾。因此，上式可以写为 $|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_u}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_v}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{u,v}}|=0$，其等价于 $\gamma_u=\gamma_v+\theta_{u,v}+2k_{u,v}\pi$，则 $\{\gamma_i\}_n,\{k_j\}_m$ 即为方程组的一个解。证毕。

引理 1 说明最小特征值可以转化为方程组求解问题，文献[13]给出了当 $\theta=2\pi l/k$，$l,k\in\mathbb{Z}_{>0}$ 时，最小特征值和约束方程组的关系满足一个 Cheeger 型不等式，因此引理 1 可以视为在更一般的情形下该不等式的特殊情况。

通过进一步观察发现，约束方程组求解与有向图中的环路相关(不考虑边的方向性，环路中的边在对应无向图中形成环)，首先给出无环有向图的一个简单结论。

引理 2 给定有向图 G，若 G 中没有环路，则对于任意映射 θ，(G,θ) 的约束方程组有解。

证明：因为 G 为弱连通图，所以 G 中没有环路说明 G 为一棵树。任选一个顶点 v 作为 G 的根节点，令其对应的变量 $\gamma_v=\gamma_0$，其中 γ_0 为任意常数。则对于任意 v 的子节点 s，设其对应第 j 条边，令 $k_j=k_0$，其中 k_0 为任意整数常数，$\gamma_s=\pm(\theta_j+2k_j\pi)+\gamma_v$，其中正负号取决于边 j 的方向，容易验证其满足方程 j。而 s 又为其对应子树的根，因此递归可以找到一组 $\{\gamma_i\}_n,\{k_j\}_m$ 为方程组的一个解。证毕。

下面考虑有环图的情况。根据文献[17]，给出有向图中有向环路和其向量表示的定义。

定义 2 给定有向图 G，令 C 为 G 中的一个环路，定义 C 的方向为 $C=u_1u_2\cdots u_iu_1$，设边 j 为 C 中的一条有向边，其端点分别为 u_i,u_{i+1}，若边 j 为 $u_i\rightarrow u_{i+1}$，则称边 j 与 C 同向，反之则称边 j 与 C 反向。若 C 为 G 中的一个确定了方向的环路，则称 C 为 G 的一个有向环路。

定义 3 给定有向图 G，令 C 为 G 中的一个有向环路，定义 $\boldsymbol{z}_C\in\mathbb{C}^m$ 如下：

$$\boldsymbol{z}_C(j)=\begin{cases}1, & j\in C\text{ 且 }j\text{ 与 }C\text{ 同向}\\ -1, & j\in C\text{ 且 }j\text{ 与 }C\text{ 反向}\\ 0, & j\notin C\end{cases}$$

称 $\boldsymbol{z}_C$ 为有向环路 C 的向量表示。

注意到定义 1 中的约束方程组在形式上类似于电流网络中的电势差，区别在于定义 1 中的约束方程组多了一组变量 $\{k_j\}_m$。基尔霍夫电压律(Kirchhoff's Potential Law)说明，任意有向环路的电压之和为 0，因此可以考虑定义关于有向环路的变量来体现有向图的特征。

定义 4 给定有向图 G 和映射 θ，令 C 为 G 中的一个有向环路，定义 $\theta_C\in\mathbb{R}$ 为：

$$\theta_C=\sum_{j=1}^{m}\boldsymbol{z}_C(j)\theta_j=\langle\boldsymbol{z}_C,\boldsymbol{\theta}\rangle$$

称 θ_C 为有向环路 C 的旋转角。

对于有环图而言，约束方程组有解等价于将图完美地嵌入复平面，即找到一组节点在复平面上的坐标，使得每条有向边的两个端点与原点间的连线夹角恰为赋予该边的旋转角。以图 1 为例，节点 1,2,3 构成了一个有向环路，按照定义 4，旋转角为 $\theta_{1,2}-\theta_{3,2}-\theta_{1,3}$。容易看出，将图 1 嵌入复平面，一个必要的条件是 $\theta_{1,2}-\theta_{3,2}-\theta_{1,3}=2\pi l,l\in\mathbb{Z}$，如图 2 所示。引理 3 证明了这也是一个充分条件。

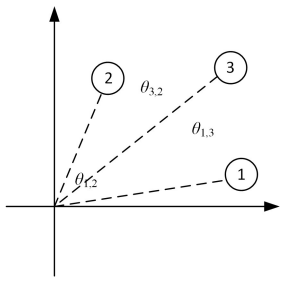


图 2 有向图的复平面嵌入

Fig. 2 Complex plane embedding of directed graph

引理 3 给定有向图 G 和映射 θ，(G,θ) 的约束方程组有解，当且仅当对 G 中任意有向环路 C，有 $\theta_C=2\pi l,l\in\mathbb{Z}$。

证明：首先证明必要性。对于 G 中任意有向环路 C，考虑 C 中的有向边对应的方程。设边 j 为 C 中的一条有向边，其端点分别为 u_i,u_{i+1}，根据 C 的方向对边 j 对应的方程稍作变形，得到：

$$\gamma_{u_i}=\gamma_{u_{i+1}}+\boldsymbol{z}_C(j)\cdot(\theta_j+2k_j\pi)$$

将 C 中的方程相加，发现对于 C 中任意顶点 u，γ_u 在等号两边恰好出现一次，抵消后得到：

$$\theta_C=\sum_{j=1}^{m}\boldsymbol{z}_C(j)\theta_j=\sum_{j\in C}\boldsymbol{z}_C(j)\theta_j=-\sum_{j\in C}2\,\boldsymbol{z}_C(j)k_j\pi$$

令 $l=-\sum_{j\in C}\boldsymbol{z}_C(j)k_j$，则必要性得证。

然后证明充分性。首先注意到，(G,θ) 的约束方程组写为矩阵形式后的表达式如下：

$$\boldsymbol{M\gamma}=\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}$$

其中，$\boldsymbol{M}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 为有向图 G 的实关联矩阵，即矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的第 j 行为 $(\boldsymbol{\delta}_u-\boldsymbol{\delta}_v)^{\mathrm{T}}$，$u,v$ 分别为有向边 j 的起点和终点，第二节中定义的复关联矩阵 $\boldsymbol{B}$ 可以看作 $\boldsymbol{M}$ 的推广。则问题转化为找到合适的 $\boldsymbol{\gamma}\in\mathbb{R}^n$ 及 $\boldsymbol{k}\in\mathbb{Z}^m$，使得上式成立。

注意到 $\boldsymbol{M}$ 是一个 $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}^m$ 的线性变换，而 $\mathbb{R}^m$ 可以看作由有向图 G 的边为基构成的线性空间。根据假设，G 是一个弱连通图，则可以在 G 中找到一个生成树 T。对 G 中的边重新编号，令 T 中的边编号为 $1,2,\cdots,n-1$，称为树边；不在 T 中的边编号为 $n,n+1,\cdots,m$，称为弦边(Chords)。若将弦边 $n-1+i$ 插入 T 中，则可得到一个由若干条树边和一条弦边构成的环 C_{n-1+i}，令其方向与边 $n-1+i$ 一致，称其为基本环。因此，有 $m-n+1$ 个基本环，令 $\{\boldsymbol{z}_{n-1+i}\}_1^{m-n+1}$ 为其向量表示，容易看出这组向量线性无关，因此是 $\mathbb{R}^m$ 的一个子空间的基。

令 $Z(G)$ 表示由 G 中所有有向环路的向量表示张成的子空间，根据文献[17]2.3 节中的定理 9，$Z(G)$ 的维数恰为 $m-n+1$，则 $\{\boldsymbol{z}_{n-1+i}\}_1^{m-n+1}$ 为 $Z(G)$ 的一组基。同时，注意到 $\boldsymbol{M}$ 的值域恰为 $Z(G)$ 的正交补(见文献[17]2.3 节中的练习 39)。考虑方程 $\boldsymbol{M\gamma}=\boldsymbol{\theta}+2\pi k$，若存在 $\boldsymbol{k}_0\in\mathbb{Z}^m$，使得 $\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0\in range(\boldsymbol{M})=Z(G)^{\perp}$，则方程 $\boldsymbol{M\gamma}=\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0$ 有解，设其为 $\boldsymbol{\gamma}_0\in\mathbb{R}^n$，这就找到了一组 $\boldsymbol{\gamma}_0\in\mathbb{R}^n,\boldsymbol{k}_0\in\mathbb{Z}^m$ 使得 $\boldsymbol{M\gamma}=\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}$ 成立。问题转化为找到合适的 $\boldsymbol{k}_0\in\mathbb{Z}^m$，使得 $\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0\in Z(G)^{\perp}$。

令 $\boldsymbol{k}_0=(0,0,\cdots,0,-l_n,-l_{n+1},\cdots,-l_m)^{\mathrm{T}}$，其中 $l_{n-1+i}=\theta_{C_{n-1+i}}/2\pi$，$\theta_{C_{n-1+i}}$ 为基本环 C_{n-1+i} 的旋转角，则根据假设有 $l_{n-1+i}\in\mathbb{Z}$。下面证明 $\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0\in Z(G)^{\perp}$。注意到，对于基本环 C_{n-1+i} 有：

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{z}_{n-1+i},\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0\rangle&=\langle\boldsymbol{z}_{n-1+i},\boldsymbol{\theta}\rangle+2\pi\langle\boldsymbol{z}_{n-1+i},\boldsymbol{k}_0\rangle\\&=\theta_{C_{n-1+i}}-2\pi l_{n-1+i}\\&=0\end{aligned}$$

因此，$\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0$ 正交于 $\{\boldsymbol{z}_{n-1+i}\}_1^{m-n+1}$，考虑到 $Z(G)$ 由 $\{\boldsymbol{z}_{n-1+i}\}_1^{m-n+1}$ 张成，则 $\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0$ 正交于 $Z(G)$，即 $\boldsymbol{\theta}+2\pi\boldsymbol{k}_0\in Z(G)^{\perp}$。证毕。

根据上述引理，$\lambda_1(\boldsymbol{N})=0$ 的充要条件如下。

定理 2 给定有向图 G 和映射 θ，则以下条件等价。

(1)$\lambda_1(\boldsymbol{N})=\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$；

(2)(G,θ) 的约束方程组有解；

(3)对于 G 中任意有向环路 C，有 $\theta_C=2\pi l,l\in\mathbb{Z}$。

证明：(1)⇔(2)由引理 1 给出；(2)⇔(3)由引理 3 给出。证毕。

4 推论及应用

推论 1 给定有向图 G，存在非零映射 θ，使得对 G 中任意有向环路 C，有 $\theta_C=2\pi l,l\in\mathbb{Z}$。

证明：根据引理 3 的证明，可在 G 中找到一个生成树，并将有向边分为树边和弦边。对于树边 j，令 θ_j 为任意固定值；

对于弦边 $n-1+j$，令 θ_{n-1+j} 满足对基本环 C_{n-1+j} 有 $\theta_{C_{n-1+j}}=2\pi l, l\in\mathbb{Z}$。对于其他有向环路 C，其向量表示 $\boldsymbol{z}_C$ 可以表示成基本环 $\{\boldsymbol{z}_{n-1+j}\}_1^{m-n+1}$ 的线性组合，并且其系数为整数（考虑 C 中的弦边），则根据定义 4，θ_C 可表示为基本环旋转角之和，因此仍为 2π 的整数倍。证毕。

推论 1 说明了对于任意有向图 G，使得 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$ 的非平凡映射总是存在的，且由有向图中的基本环完全决定，这就给出了一个生成非平凡映射的算法。

推论 2 给定有向图 G 和映射 θ，若 (G,θ) 的约束方程组有解，设其解为 $\{\gamma_i\}_n$，$\{k_j\}_m$，则 $\lambda_1(\boldsymbol{L})$ 对应的特征向量为：

$$\boldsymbol{f}_1=\frac{1}{\sqrt{n}}(e^{i\gamma_1},e^{i\gamma_2},\cdots,e^{i\gamma_n})\in\mathbb{C}^n$$

证明：由引理 1 的证明易知 $\boldsymbol{f}_1^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{f}_1=0$。证毕。

推论 2 说明了当 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$ 时，其特征向量中每一维的坐标都在复平面中以零点为中心的圆上，若将 $\boldsymbol{f}_1$ 视为从点集 V 到复平面 $\mathbb{C}$ 的嵌入映射，则该映射保留了图中节点间的有向关系。下面给出例子说明该性质。

例 1　令有向图 $G=(S,T,E,w)$，其中 S,T 为点集，E 为边集，w 为边权函数。对于任意边 $j\in E$，j 可写作 $s\to t$，其中 $s\in S,t\in T$。称 G 为有向二分图。若令 $\theta=\theta_0$ 为 $\mathbb{R}_{\geqslant 0}$ 上的常映射，观察 G 中任意有向环路 C，容易看出 C 中有偶数条有向边，且一半与 C 同向，一半与 C 反向，因此 $\theta_C=0$。根据定理 2，此时 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$，且 (G,θ) 的约束方程组有解。考虑终点相同的两条有向边 $s_1\to t,s_2\to t$（存在这样的两条边，因为 G 为弱连通图），则 γ_{s_1} 与 γ_{s_2} 相差 2π 的整数倍。通过简单的归纳法可以得出，对于任意 $u_s,v_s\in S$，$f_1(u_s)=f_1(v_s)$。类似地，对于任意 $u_t,v_t\in T$，有 $f_1(u_t)=f_1(v_t)$，且 $e^{i\theta_0}f_1(u_t)=f_1(u_s)$。

因此，对于有向二分图 G，当 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$ 时，其特征向量 $\boldsymbol{f}_1$ 自然地将 S,T 嵌入了复平面中圆上的不同位置，且相差 θ_0 这样一个旋转角。

例 2　令 A 为 n 阶阿贝尔群，$\Gamma\subset A$ 为 A 的一个子集。考虑有向凯莱图 $Cay(A,\Gamma)$，其顶点为 A 中的元素，若存在 $v\in\Gamma$，使得 $xv=y$，则 $x\to y$ 为图中的一条有向边。选择合适的 $\Gamma\subset A$，使得 $Cay(A,\Gamma)$ 为弱连通图。令 ρ 为 A 的一个不可约矩阵表示，因为 A 为 n 阶阿贝尔群，则 ρ 维数为 1 且恰为 n 次单位根。令映射 θ 满足 $e^{i\theta_{x,y}}=\rho(v^{-1})$，其中 $xv=y$，则对于任意有向环路 C，若 $v_1v_2\cdots v_j$ 为 C 中的边，易知 $v_1v_2\cdots v_j=1$，则有 $\prod_{i=1}^{j}\rho(v_i^{-1})=\rho(\prod_{i=1}^{j}v_i^{-1})=1$，因此 θ_C 为 2π 的整数倍，根据定理 2，$\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$。同时观察得到对于有向边 $x\to y$，$|\rho(x)-\rho(xv)\rho(v^{-1})|=0$，则特征向量 $\boldsymbol{f}_1=\rho$。

凯莱图在理论计算机研究中应用广泛，例如环 C_n、d 维超立方体 Z_2^d 等都是阿贝尔群生成的凯莱图。对于这一类特殊的图，其有向约束与相关矩阵的联系仍有待研究。

定义 5　给定有向图 G，将 G 中各有向边改为无向边后得到的无向图称为 G 的基图（Underlying Graph），记为 $G^{(u)}$。其所对应的度数矩阵、邻接矩阵及拉普拉斯矩阵分别记为 $\boldsymbol{D}^{(u)},\boldsymbol{A}^{(u)},\boldsymbol{L}^{(u)}$。

推论 3　给定有向图 G 和映射 θ，令 $G^{(u)}$ 为 G 的基图。若 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$，则有：

$$\boldsymbol{L}^{(u)}=diag(\boldsymbol{f}_1)^*\boldsymbol{L}diag(\boldsymbol{f}_1)$$

其中，$diag(\boldsymbol{f}_1)$ 表示对角线上元素为特征向量 $\boldsymbol{f}_1$ 中对应位置分量的对角矩阵。

证明：容易看出，$\boldsymbol{D}^{(u)}=diag(\boldsymbol{f}_1)^*\boldsymbol{D}diag(\boldsymbol{f}_1)$，只需证 $\boldsymbol{A}^{(u)}=diag(\boldsymbol{f}_1)^*\boldsymbol{A}\,\mathrm{diag}(\boldsymbol{f}_1)$。对于任意 $u\neq v$，有：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_{u,v}^{(u)}&=\overline{f_1(u)}\boldsymbol{A}_{u,v}f_1(v)\\&=e^{-i\gamma_u}(w(u,v)e^{i\theta_{u,v}}+w(v,u)e^{-i\theta_{v,u}})e^{i\gamma_v}\\&=w(u,v)+w(v,u)\end{aligned}$$

则推论得证。证毕。

容易看出 $diag(\boldsymbol{f}_1)$ 为酉矩阵，则推论 3 说明了若 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$，则 $\boldsymbol{L}^{(u)}$ 与 $\boldsymbol{L}$ 相似，有相同的特征值。

作为以上推论的应用，参考文献[15]的研究，可以定义一个与本文中有向环路相关的图常数，它与最小特征值密切相关。

定义 6　给定有向图 G，若点集 $S_0,S_1,\cdots,S_{k-1}$ 满足 $\bigcup_{i=0}^{k-1}S_i=V$ 且 $S_i\cap S_j=\varnothing$，$\forall i\neq j$，则称其为 G 的一个 k 划分。令 $\theta=2\pi/k$，则可定义该划分的指示向量 $\boldsymbol{\chi}\in\mathbb{C}^n$ 满足：若顶点 $u\in S_j$，则 $\chi_u=\frac{1}{\sqrt{n}}e^{2\pi ij/k}$。

引理 4　给定有向图 G，令 $\theta=2\pi/k$，若 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$，则存在一个 k 划分，其指示向量恰为特征向量 $\boldsymbol{f}_1$。

证明：根据推论 1，$\boldsymbol{f}_1=\frac{1}{\sqrt{n}}(e^{i\gamma_1},e^{i\gamma_2},\cdots,e^{i\gamma_n})$。不妨设 $\gamma_1=0$，则由约束方程组及 G 为弱连通图，易知 $\gamma_u=j\theta=2\pi j/k$，令 $S_j=\{u\in V\mid e^{i\gamma_u}=e^{2\pi ij/k}\}$，则 $S_0,S_1,\cdots,S_{k-1}$ 为 G 的一个 k 划分。证毕。

引理 4 说明，若 $\theta=2\pi/k$ 且 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$，则有向图 G 可看作一个长度为 k 的有向路径或环路，对于任意有向边 $u\to v$，若 $v\in S_j$，则 $u\in S_{j+1}$（令 $S_k=S_0$），且其特征向量隐含了这一划分。这一方法还可用来检测有向图 G 与长为 k 的有向路径或环路的近似程度。

定义 7　给定有向图 G，令 $\theta=2\pi/k$，对 G 的一个 k 划分 $S_0,S_1,\cdots,S_{k-1}$，令 $w(S_j,S_{j-1})$ 表示所有起点属于 S_j，终点属于 S_{j-1} 的边权值之和。定义该划分的环路比如下：

$$\phi(S_0,S_1,\cdots,S_{k-1})=\frac{1}{vol(G)}\sum_{j=1}^{k}w(S_j,S_{j-1})$$

令 ϕ^* 表示所有可能的划分中 ϕ 的最大值，称其对应的划分为最优划分。

显然，ϕ^* 值越大，有向图 G 与长为 k 的有向路径或环路的近似程度越高。引理 5 说明了 φ^* 值的上界为 $(2-\lambda_1(\boldsymbol{N}))/4$。

引理 5　给定有向图 G，令 $\theta=2\pi/k$。则下列不等式成立：

$$\lambda_1(\boldsymbol{N})\leqslant 2-4\phi^*$$

证明：令最优划分的指示向量为 $\boldsymbol{\chi}$，则根据瑞利商定理有：

$$\lambda_1(\boldsymbol{N})\leqslant\frac{\boldsymbol{\chi}^*\boldsymbol{L}\boldsymbol{\chi}}{\boldsymbol{\chi}^*\boldsymbol{D}\boldsymbol{\chi}}$$

$$=\frac{1}{vol(G)}\sum_{u\to v}w(u,v)\,|\chi_u-\chi_v e^{2\pi i/k}|^2$$

$$\leqslant\frac{4}{vol(G)}\Big(\sum_{u\to v}w(u,v)-\sum_{j=1}^{k}w(S_j,S_{j-1})\Big)$$

$$=2-4\phi^*$$

其中，第二个不等式成立是因为对所有非环路边 $u\to v$，都有 $|\chi_u-\chi_v e^{2\pi i/k}|\leqslant 2$。证毕。

文献[15]定义了流向比(Flow Ratio)。

$$\varphi(S_0,S_1,\cdots,S_{k-1})=\sum_{j=1}^{k}\frac{w(S_j,S_{j-1})}{vol(S_j)+vol(S_{j-1})}$$

将其作为有向图谱聚类的目标函数，与本文定义的环路比并不相同。

对于结构化的数据而言，寻找其在欧几里得空间的嵌入往往是对其进行处理的关键步骤。知识图谱[18]是图结构数据的典型代表，下面以知识图谱的嵌入[19-20]为例，考虑埃尔米特拉普拉斯矩阵在该类问题上的应用。

根据文献[19]的设定，知识图谱是三元组的集合，其中每一个三元组(h,r,t)表示在头部实体 h 和尾部实体 t 间存在关系 r，这个关系是有向的，因此知识图谱可以视为一张有向图。我们希望找到实体和关系的 k 维嵌入 $\boldsymbol{h},\boldsymbol{r},\boldsymbol{t}\in\mathbb{C}^k$，使得 $|r_i|=1$，且头部实体旋转后与尾部实体尽可能接近，即 $\|\boldsymbol{h}\circ\boldsymbol{r}-\boldsymbol{t}\|_2$ 尽可能小，其中$\circ$表示 Hadamard 积(元素间的乘积)。通过观察发现，每一维的分量选取对结果的影响是独立的，因此可以仅考虑一维的情况。

若知识图谱中含有 n 个实体，则需要找到嵌入向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，其中 x_i 表示实体 i 的一维嵌入，使得损失函数 $loss=\sum_r|x_h\cdot e^{i\theta_r}-x_t|^2$ 最小。不失一般性地，可以假设 $\|\boldsymbol{x}\|_2=1$(放缩不影响旋转)，则根据定理 1，损失函数的最小值恰为拉普拉斯矩阵的最小特征值 $\lambda_1(\boldsymbol{L})$，且达到该值的恰为其对应的特征向量 $\boldsymbol{f}_1$。因此，知识图谱的嵌入可以分为两步，一是寻找关系的嵌入使得 $\lambda_1(\boldsymbol{L})$ 尽可能小，二是求出对应的特征向量作为实体的嵌入。

首先考虑特殊情形，即每个关系在知识图谱中仅出现一次，这说明每条边的旋转角可以自由取值，则根据推论 1，总可以找到非平凡的旋转角使得对 G 中任意有向环路 C，有 $\theta_C=2\pi l,l\in\mathbb{Z}$，进而有 $\lambda_1(\boldsymbol{L})=0$。

对于一般情况，同一个关系可能对应图中的多条边，这种情况下不一定每个约束都能被满足，但是我们希望微小的差异不会造成严重的影响。

引理 6 给定有向图 G，$\lambda_1(\boldsymbol{L})$是关于 θ 的连续函数。

证明：考虑 $\boldsymbol{L}$ 的特征多项式，

$$p(x)=det(x\boldsymbol{I}-\boldsymbol{L})=x^n+c_1x^{n-1}+\cdots+c_n$$

因为 $\lambda_1(\boldsymbol{L})$是 $p(x)$的一个根，则 $\lambda_1(\boldsymbol{L})$是关于多项式系数 c_1，$c_2,\cdots,c_n$ 的连续函数。因此，只需证明任意系数 c_k 都是关于 θ 的连续函数。

根据行列式的展开有：

$$p(x)=det(x\boldsymbol{I}-\boldsymbol{L})=\sum_{\pi}sgn(\pi)a_{1,\pi_1}a_{2,\pi_2}\cdots a_{n,\pi_n}$$

其中，a_{i,π_i}是矩阵 $x\boldsymbol{I}-\boldsymbol{L}$ 的对应项。考虑其中的一项 $sgn(\pi)a_{1,\pi_1}a_{2,\pi_2}\cdots a_{n,\pi_n}$，这一项等于 0，当且仅当存在 $a_{i,\pi_i}=0$，即图中不存在连接节点 i,π_i 的边。又因为 π 是一个置换，其能分解为不相交的轮换的积，若该项非 0，则 a_{i,π_i} 对应的边在图中构成不相交的环，因此这一项可以表示为：

$$sgn(\pi)a_{1,\pi_1}a_{2,\pi_2}\cdots a_{u_n,\pi_n}$$

$$=sgn(\pi)w_{C_1}e^{i\theta_{C_1}}\cdots w_{C_k}e^{i\theta_{C_k}}(x-d_{u_1})\cdots(x-d_{u_l})$$

因为特征多项式是对所有上述形式的多项式求和，容易看出每一项都关于 θ 连续，因此命题得证。证毕。

引理 6 虽然不能保证近似的效果，但是对算法设计仍有一定启发，如果能通过优化的方法使得每个有向环路的旋转角足够接近 $2\pi l(l\in\mathbb{Z})$，则相应的 $\lambda_1(\boldsymbol{L})$应该足够小，这样得出的特征向量 $\boldsymbol{f}_1$ 仍然是一个好的嵌入。关于如何快速地计算特征向量 $\boldsymbol{f}_1$，可以参考文献[21-23]。

结束语 本文给出了一般的埃尔米特拉普拉斯矩阵定义及其基本性质，证明了拉普拉斯矩阵最小特征值为 0，约束方程组有解和任意有向环路的旋转角均为 2π 整数倍间的等价性，给出了使得拉普拉斯矩阵最小特征值为 0 的构造方法。当 $\lambda_1=0$ 时，其特征向量 $\boldsymbol{f}_1$ 将图中节点嵌入复平面中以零点为中心的圆上，且保持节点间的有向约束。后续的工作主要研究对于一般有向图 G，能否给出一个图中有向环路相关的常数，将其作为其最小特征值的下界，以及尝试将旋转操作推广至高维空间，研究更一般的拉普拉斯矩阵。

参 考 文 献

[1] CHUNG F R, GRAHAM F C. Spectral graph theory[M]. American Mathematical Soc., 1997.

[2] HOORY S, LINIAL N, WIGDERSON A. Expander graphs and their applications[J]. Bulletin of the American Mathematical Society, 2006, 43(4): 439-561.

[3] LOVÁSZ L, KANNAN R. Faster mixing via average conductance [C]// Proceedings of the Thirty-first annual ACM Symposium on Theory of Computing. 1999: 282-287.

[4] SPIELMAN D A, TENG S H. Nearly-linear time algorithms for graph partitioning, graph sparsification, and solving linear systems[C]// Proceedings of the Thirty-sixth Annual ACM Symposium on Theory of Computing. 2004: 81-90.

[5] KWOK T C, LAU L C, LEE Y T, et al. Improved Cheeger's inequality: Analysis of spectral partitioning algorithms through higher order spectral gap[C]// Proceedings of the forty-fifth Annual ACM Symposium on Theory of Computing. 2013: 11-20.

[6] MIZUTANI T. Convex programming based spectral clustering [J]. Machine Learning, 2021, 110(5): 933-964.

[7] SHI J, MALIK J. Normalized cuts and image segmentation[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2000, 22(8): 888-905.

[8] HAOCHEN J Z, WEI C, GAIDON A, et al. Provable guarantees for self-supervised deep learning with spectral contrastive loss [C]// Advances in Neural Information Processing Systems. 2021.

[9] CHUNG F. Laplacians and the Cheeger inequality for directed graphs[J]. Annals of Combinatorics, 2005, 9(1): 1-19.

[10] LI Y,ZHANG Z L. Digraph laplacian and the degree of asymmetry[J]. Internet Mathematics,2012,8(4):381-401.

[11] SINGH R,CHAKRABORTY A,MANOJ B. Graph Fourier trans-form based on directed Laplacian[C]// International Conference on Signal Processing and Communications (SPCOM). 2016:1-5.

[12] SEIFERT B,PÜSCHEL M. Digraph signal processing with generalized boundary conditions[J]. IEEE Transactions on Signal Processing,2021,69:1422-1437.

[13] LI H,SUN H,ZANETTI L. Hermitian Laplacians and a Cheeger inequality for the Max-2-Lin problem[C]// Proceedings of the Twenty-seventh Annual European Symposium on Algorithms. 2019:1-14.

[14] CUCURINGU M,LI H,SUN H,et al. Hermitian matrices for clustering directed graphs:insights and applications[C]// International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. 2020:983-992.

[15] LAENEN S,SUN H. Higher-Order Spectral Clustering of Directed Graphs[C]// Advances in Neural Information Processing Systems. 2020:941-951.

[16] TONG Z,LIANG Y,DING H,et al. Directed Graph Contrastive Learning[C]// Advances in Neural Information Processing Systems. 2021.

[17] BOLLOBÁS B. Modern graph theory[M]. Springer Science & Business Media,2013.

[18] JI S,PAN S,CAMBRIA E,et al. A survey on knowledge graphs:Representation, acquisition, and applications[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems,2021,33(2):494-514.

[19] SUN Z,DENG Z H,NIE J Y,et al. Rotate:Knowledge graph embedding by relational rotation in complex space[C]// International Conference on Learning Representations. 2019.

[20] LI Z,LIU H,ZHANG Z,et al. Learning knowledge graph embedding with heterogeneous relation attention networks[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems,2022,33(8):3961-3973.

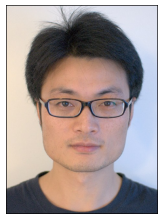
[21] VISHNOI N K. Laplacian solvers and their algorithmic applications[J]. Theoretical Computer Science,2012,8(1/2):1-141.

[22] KYNG R,LEE Y T,PENG R,et al. Sparsified cholesky and multigrid solvers for connection laplacians[C]// Proceedings of the forty-eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing. 2016:842-850.

[23] KYNG R,SACHDEVA S. Approximate gaussian elimination for laplacians-fast,sparse,and simple[C]// IEEE fifty-seventh Annual Symposium on Foundations of Computer Science. 2016:573-582.



LIU Kaiwen, born in 1997, postgraduate. His main research interests include spectral graph theory and so on.



HUANG Zengfeng, born in 1986, Ph.D, researcher, doctoral advisor. His main research interests include machine learning algorithms and theory, big data computation, theoretical computer science and network analysis.

(责任编辑:喻藜)