Graphen und biologische Netze
(WS 2016/17)

Inhaltsverzeichnis

1 Vorlesung 14.10.2016

1.1 Grundlagen der Graphen und biologische Netze

Graph: Knoten, Kanten (binäre Relationen)

<u>Transitivität:</u> implizite Verbindung (abhängig vom Kontext)
Labeled Graphs:

- Graph: (V, E)
- Labels: L_V (Knotenlabel), L_E (Kantenlabel)

$e \in E \Rightarrow \exists\, x, y \in V$: x und y sind die Endpunkte von e

<u>Knoten-Labelfunktion α:</u> $\alpha : V \to L_V : v \mapsto \alpha(v)$
<u>Kanten-Labelfunktion β:</u> $\beta : E \to L_E : e \mapsto \beta(e)$

ungerichtete Graphen

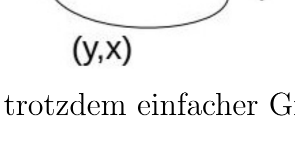
- Kante ist eine Menge von 2 (verschiedenen) Knoten
- $e = \{x, y\} = \{y, x\} \to$ Reihenfolge egal
- $E \subseteq V^{(2)} \to$ Kante ist Teilmenge von 2 Knoten

gerichtete Graphen

- Kante ist ein geordnetes Paar von 2 (verschiedenen) Knoten
- $e = (x, y)$ entspricht $x \to y$, (y, x) entspricht $y \to x$
- $E \subseteq V \times V$
- gerichtete Kante besteht aus head (in Pfeilrichtung) und tail

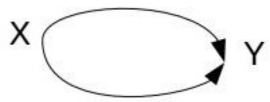
Funktionen gerichteter Graphen:
$h : E \to V : e \mapsto \mathit{head}(e)$
$t : E \to V : e \mapsto \mathit{tail}(e)$

Graphen in denen Kanten zwei verschiedenen Endpunkte haben **UND** zu jeden Paar von Kanten höchstens eine Kante gehört hießen <u>EINFACH</u> oder <u>SIMPLE</u> im gerichteten Fall:



trotzdem einfacher Graph!

<u>erst:</u>



ist Multigraph

Loops:

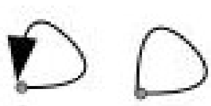


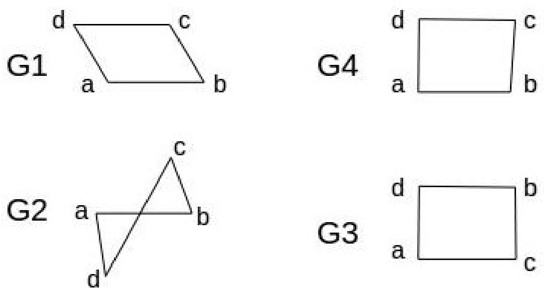
Abbildung 1: links: gerichtet; rechts: ungerichtet

$\Rightarrow$ einfacher Graph mit Loops

Durch Unterteilung der Kanten in Multigraphen kann eine Transformation in Graphen erzeugt werden:

- ungerichtet: zweifache Unterteilung mittels zweier Knoten
- gerichtet: einfache Unterteilung mittels Knoten

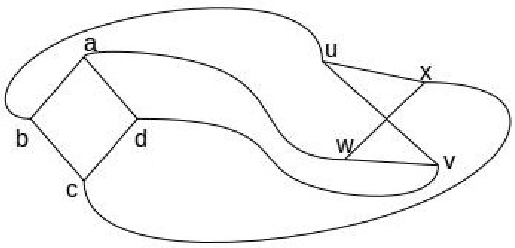
1.2 Gleichheit von Graphen



als labeled graphs: G_1=G_2=G_4 $\neq$$G_3$

$\Rightarrow$ 2 Graphen G_1=(V_1, E_1) und G_2=(V_2, E_2) sind isomorph wenn es einen bijektive Abbildung[1] $\pi : V_1 \rightarrow V_2$ gibt, sodass $\{x, y\} \in E_1 \Leftrightarrow \{\pi(x), \pi(y)\} \in E_1$

[1] https://de.wikipedia.org/wiki/Bijektive_Funktion



bijektive Abbildung: jedes Element von 1. wird zu genau einem Element von 2. zugeordnet

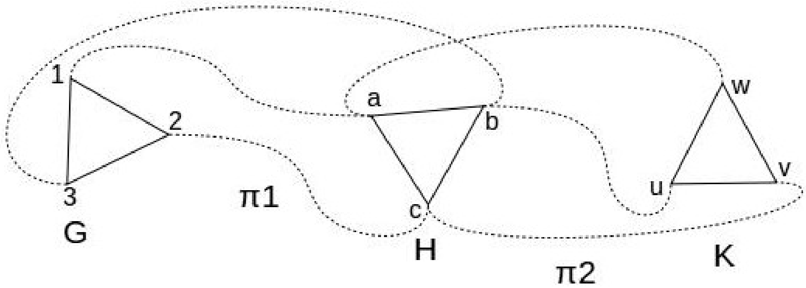
$\pi(a) = w, \pi(b) = u, \pi(c) = x, \pi(d) = v$
$\rightarrow$ hier ergibt bijektive Abbildung keinen Isomorpismus, da Bild(d) und Bild(c) Kante haben, jedoch v und x keine Kante haben

Durch folgende bijektive Abbildung wird aber Isomorphie erreicht:
$\pi(a) = w, \pi(b) = x, \pi(c) = u, \pi(d) = v$

Bezogen auf die Labels kann es mehrere mögliche Isomorphien geben.

Schreibweise: $G \simeq H$ (G ist isomorph zu H) mit $G \rightarrow^{\pi} H, G \leftarrow^{-\pi} H$ sodass π isomorph ist

<u>Reflexivität:</u> Ein Graph ist zu sich selbst immer isomorph: $G \simeq G$
<u>Symmetrie:</u> $G \simeq H \Leftrightarrow H \simeq G$ <u>Transitivität:</u> $G \simeq H, H \simeq K \Rightarrow G \simeq K$



$\simeq$ ist eine Äquivalenzrelation $\rightarrow$ Isomorphie teilt Graphen in Klassen ein (Isomorphieklassen)

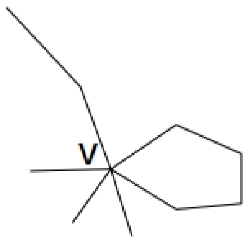
Nebenbemerkung: Labeled Graphen?
Zusätliche Bedingung benötigt: $\lambda(\pi(x)) = \lambda(x) \rightarrow$ Labels müssen erhalten bleiben!

Testen auf Gleichheit
Gegeben: G_1=(V_1, E_1), G_2=(V_2, E_2)
Frage: Sind die Graphen isomorph?

Grundbedingungen:

1. $|V_1| = |V_2| \rightarrow$ gleiche Anzahl von Knoten
2. $|E_1| = |E_2| \rightarrow$ gleiche Anzahl von Kanten

1.3 Eigenschaften von Graphen



Nachbarknoten von v: $N(v) := \{y \in V | \{v, y\} \in E\}$
$deg(v) := |N(v)|$
$\delta(G) := \min\limits_{v \in V} deg(v)$
$\Delta(G) := \max\limits_{v \in V} deg(v)$

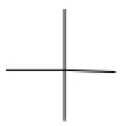
Def: Ein Graph heißt **REGULÄR** wenn $\Delta(G) = \delta(G)$
(wenn alle Knoten gleichen Grad haben)

Gradfolge von G:

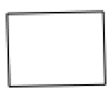
$\mathcal{F} = (n_0, n_1, n_2, \ldots, n_{|V|-1})$ mit $n_k := |\{x \in V | deg(x) = k\}|$

$\delta(G) \geq 0$
$\Delta(G) \leq |V| - 1$

Beispiel:



$$\begin{array}{ccccc} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{array}$$
$$F = (0 \quad 4 \quad 0 \quad 0 \quad 1)$$



$$\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 2 & 3 \end{array}$$
$$F = (0 \quad 4 \quad 0 \quad 0)$$

bei Isomorphie: $\mathcal{F}_1 = \mathcal{F}_2 \rightarrow$ Isomorphismus π erhält Grad der Knoten!

1.4 Graph-Invarianten

Eigenschaften, die unter Isomorphie erhalten bleiben
$\mathcal{G}\ldots$ Menge aller Graphen
F... ist ein Graph invariant wenn

$$F : \mathcal{G} \to X \tag{1}$$

die Eigenschaft hat, dass

$$G \simeq H \Rightarrow F(G) = F(H) \tag{2}$$

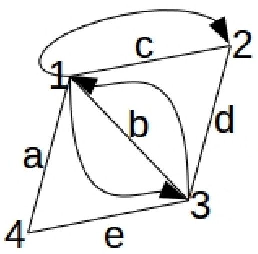
Invarianten bis jetzt: $|V|, |E|$, Gradfolge $\mathcal{F}$

Wenn F(G) $\neq$ F(H) für irgendeine Grapheninvariante $\Rightarrow$ G $\neg\simeq$ H

1.5 Pfade und Zusammenhänge

Kantenzug: Folge von Kanten in G"
$x_o, e_1, x_1, e_2, x_2, \ldots, e_l, x_l$ sodass $e_i := \{x_{i-1}, x_i\}$

Beispiel:



Weg: Kantenzug sodass $e_i \neq e_j$ für $i \neq j$ (keine Kante doppelt verwenden)

Pfad: Kantenzug sodass $x_i \neq x_j$ für $(i, j) \neq (0, l)$ mit 0=Startknoten und l=Endknoten des Pfades (keinen Knoten mehrfach bis auf x_0, x_l)

- offen: $x_o \neq x_e$ 

- geschlossen: $x_0 = x_e$ (nur hier 1 Knoten doppelt benutzt!) 

Definition: G ist zusammenhängend wenn es zwischen je zwei Knoten x,y $\in$ V einen Kantenzug gibt

Frage:

1. Ist Zusammenhang eine Grapheninvariante?
2. Kann man in der Definition Kantenzug durch Weg, Pfad oder Kreis ersetzt?