

Densidad de Homomorfismos en Árboles

Lina Maria Simbaqueba Marin^{1,a}

^almsimbaquebam@unal.edu.co

Abstract

La demostración de ciertas desigualdades que involucran propiedades importantes entre grafos ha sido un tema bastante estudiado en Teoría Extremal. En este trabajo se pretende mostrar un método que utiliza herramientas de Teoría de la Información para definir un modelo de programación lineal el cual se puede interpretar para encontrar propiedades claves que permitan formalizar la demostración de dichas desigualdades.

Keywords: Teoría de grafos, densidad de homomorfismos, optimización lineal, entropía.

1. Introducción

Gran parte de la Teoría Extremal de Grafos se centra en entender cómo patrones locales afectan la estructura global de un grafo. Como explica Lovász [1] en el primer capítulo, los grafos son estructuras que permiten explicar el comportamiento de muchos fenómenos en el mundo, como las redes sociales, las redes ecológicas, etc.

En la actualidad, estos temas se relacionan con áreas de investigación bastante activas, como el estudio de *quasirandomness* desarrollado por Rödl [2] y Chung, Graham y Wilson [3] y la teoría del límite combinatorio desarrollada por Lovász [1].

En este trabajo se pretende estudiar desigualdades que involucran densidad de homomorfismos entre grafos. Un homomorfismo se puede entender intuitivamente como una forma de incrustar el grafo H en el grafo G , por esta razón, los homomorfismos son de gran utilidad para estudiar la influencia de pequeños grafos en estructuras de mayor tamaño. Más específicamente, se desea demostrar desigualdades de la forma:

$$t(F, G) \geq t(T, G)^{\frac{|E(F)|}{|E(T)|}} \quad (1)$$

En la siguiente sección se hará una revisión más rigurosa de estos conceptos pero para dar una idea de la situación, $t(H, G)$ es la probabilidad de que una función aleatoria de $V(H)$ a $V(G)$ sea un homomorfismo, es decir, da una medida del número de copias del grafo H en el grafo G .

Conceptos relacionados con densidades de homomorfismos son de gran importancia por sus implicaciones. Por ejemplo, en Teoría del límite, una secuencia G_1, G_2, \dots es convergente si y solo si $t(H, G_n)$ converge para todo grafo H . Por su parte, la teoría del límite se ha usado para obtener una caracterización combinatoria de cierto tipo de grafos que tiene profundas implicaciones en ciencias de la computación [4].

Desigualdades de este estilo han sido ampliamente estudiadas en Teoría Extremal, por ejemplo, la conjetura de Sidorenko para grafos bipartitos H : $t(H, G) \geq t(K_2, G)^{|E(H)|}$ [5], o la conjetura de Erdős y Simonovits: $t(P_{k+2}, G) \geq t(P_k, G)^{\frac{k+1}{k-1}}$ [6].

Estas desigualdades han sido estudiadas en la actualidad utilizando el método de tropicalización [7] y un método que utiliza herramientas de teoría de la información y optimización lineal, el cual utilizamos para el desarrollo de este trabajo.

^{*}Departamento de Matemáticas, Universidad Nacional de Colombia, E-mail: lmsimbaquebam@unal.edu.co. Proyecto Final. 2022-I

2. Preliminares

En esta sección se abarcan los conceptos esenciales para el desarrollo de este trabajo. Estos conceptos pertenecen a las áreas de Teoría de Grafos y Teoría de la información.

Empezamos por precisar la noción de grafo y homomorfismo entre grafos:

Definición 2.1. Un grafo G es una dupla $(V(G), E(G))$ dónde V es el conjunto de vértices o nodos y $E \subseteq \{uv = \{u, v\} : u, v \in V(G) \wedge u \neq v\}$ se conoce como el conjunto de aristas.

Definición 2.2. Un homomorfismo de un grafo H a un grafo G es una función $f : V(H) \rightarrow V(G)$ tal que $f(u)f(v) \in E(G)$ siempre que $uv \in E(H)$.

En la Figura 1 se observan dos asignaciones del grafo H al grafo G . La asignación (I) es un homomorfismo entre grafos pero la asignación (II) no lo es ya que $1, 3 \in E(H)$ y, sin embargo $1, 1 \notin E(G)$

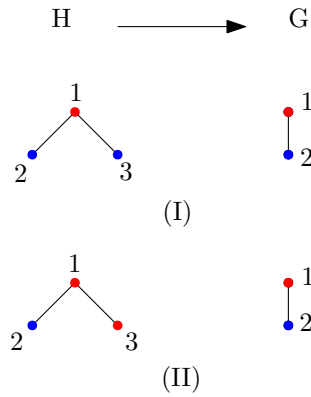


Figure 1: La asignación (I) es un homomorfismo, la asignación (II) no es un homomorfismo.

En lo que sigue del documento, se utiliza $Hom(H, G)$ para denotar el conjunto de homomorfismos de H a G y $hom(H, G) = |Hom(H, G)|$.

Definición 2.3. La densidad de homomorfismos entre H y G es la probabilidad de que una función aleatoria $f : V(H) \rightarrow V(G)$ sea un homomorfismo. Se denota por $t(H, G)$ y viene dada por la ecuación:

$$t(H, G) = \frac{hom(H, G)}{|V(G)|^{|V(H)|}}. \quad (2)$$

Finalmente, precisamos la noción de árbol y bosque respectivamente.

Definición 2.4. Un árbol es un grafo conexo acíclico y un bosque es la unión disjunta de árboles.

Se puede demostrar utilizando inducción matemática que un árbol con n vértices tiene $n - 1$ aristas.

A continuación se enuncia la definición de entropía y algunas propiedades que serán de gran utilidad. En lo que sigue, X representa a una variable aleatoria discreta y $rng(x)$ representa al conjunto $\{x : \mathbb{P}(X = x) > 0\}$.

Definición 2.5. La entropía de X viene dada por:

$$\mathbb{H}(X) := \sum_{x \in rng(X)} \mathbb{P}(X = x) \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(X = x)} \right). \quad (3)$$

La entropía se puede entender intuitivamente como una medida de la cantidad promedio de información, medida en bits, que es revelada si se conoce el resultado de la variable aleatoria X .

Por ejemplo, si tomamos una secuencia binaria aleatoria (a_0, a_1, \dots) y definimos $X = \min\{i : a_i = 1\}$, si se conoce que $X = k$, se revelan k bits de información, ya que se sabe que la secuencia posee 0 en las primeras $k - 1$ posiciones y 1 en la k -ésima posición. En este caso, $\mathbb{H}(X) = k$.

Lema 2.6. Sea X una variable aleatoria discreta.

$$\mathbb{H}(X) \leq \log(|rng(X)|)$$

La igualdad se satisface si y solo si X se distribuye uniformemente sobre $rng(X)$.

Este lema es una consecuencia directa de la desigualdad de Jensen, la cual dice que si una función es cóncava entonces para $\theta_1, \dots, \theta_k \in (0, 1)$ tales que $\theta_1 + \dots + \theta_k = 1$ se cumple que $f(\theta_1 x_1 + \dots + \theta_k x_k) \geq \theta_1 f(x_1) + \dots + \theta_k f(x_k)$; tomando $f(x) = \log(x)$.

Finalmente, definimos y mostramos algunas propiedades importantes de la entropía condicional. En lo que sigue, X , Y y Z son variables aleatorias discretas.

Definición 2.7. Para $y \in rng(Y)$, el rango de X dado $Y = y$ equivale a:

$$rng(X | Y = y) := \{x : \mathbb{P}(X = x | Y = y) > 0\}.$$

Adicionalmente, la entropía de X dado $Y = y$ viene dada por la expresión:

$$\mathbb{H}(X | Y = y) := \sum_{x \in rng(X|Y=y)} \mathbb{P}(X = x | Y = y) \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(X = x | Y = y)} \right).$$

Definición 2.8. Se dice que X y Y son condicionalmente independientes dado Z si para todo $z \in rng(Z)$, $x \in rng(X | Z = z)$ y $y \in rng(Y | Z = z)$:

$$\mathbb{P}(X = x | Z = z, Y = y) = \mathbb{P}(X = x | Z = z) \quad y \quad \mathbb{P}(Y = y | Z = z, X = x) = \mathbb{P}(Y = y | Z = z)$$

Lema 2.9. Sea $m \geq 1$, $k \geq 0$ y sea X_1, \dots, X_m y Y_1, \dots, Y_k variables aleatorias discretas.

- Para cualquier permutación σ de $\{1, \dots, m\}$ y π de $\{1, \dots, k\}$:

$$\mathbb{H}(X_1, \dots, X_m | Y_1, \dots, Y_k) = \mathbb{H}(X_{\sigma(1)}, \dots, X_{\sigma(m)} | Y_{\pi(1)}, \dots, Y_{\pi(k)}) \quad (4)$$

•

$$\mathbb{H}(X_1, \dots, X_m | Y_1, \dots, Y_k) = \sum_{i=1}^m \mathbb{H}(X_i | Y_1, \dots, Y_k, X_1, \dots, X_{i-1}) \quad (5)$$

- Si $k \geq 1$, entonces:

$$\mathbb{H}(X_1, \dots, X_m | Y_1, \dots, Y_k) \leq \mathbb{H}(X_1, \dots, X_m | Y_1, \dots, Y_{k-1}) \quad (6)$$

- Si $k \geq 1$ y X_1, \dots, X_m y Y_k son condicionalmente independientes dado (Y_1, \dots, Y_{k-1}) , entonces:

$$\mathbb{H}(X_1, \dots, X_m | Y_1, \dots, Y_k) = \mathbb{H}(X_1, \dots, X_m | Y_1, \dots, Y_{k-1}) \quad (7)$$

- Si existe una función f tal que $(X_1, \dots, X_m) = f(Y_1, \dots, Y_k)$, entonces.

$$\mathbb{H}(X_1, \dots, X_m \mid Y_1, \dots, Y_k) = 0 \quad (8)$$

La demostración de este lema se puede encontrar en [8]. A continuación se da una noción intuitiva de su validez. Se entiende $\mathbb{H}(X \mid Y)$ como la cantidad promedio de información adicional que se obtiene al conocer el valor de X , dado que Y ya se conocía. Así, por ejemplo, si X y Y son variables independientes, se puede concluir que $\mathbb{H}(X \mid Y) = \mathbb{H}(X)$, lo cuál resulta ser un caso particular de la ecuación 7. Por otro lado, si X está completamente determinada por Y , se tiene que $\mathbb{H}(X \mid Y) = 0$; observe que este último caso equivale a afirmar que existe una función f tal que $X = f(Y)$, lo cuál es un caso particular de la ecuación 8. Finalmente, siguiendo la idea anterior, se puede observar que la información adicional que se obtiene al conocer el valor de X siempre es mayor o igual a la cantidad de información que se obtiene al conocer el valor de X dado que se conoce el valor de otra variable Y ; es decir, $\mathbb{H}(X) \geq \mathbb{H}(X \mid Y)$. Esta última corresponde a un caso particular de la ecuación 6.

Este trabajo se basa en un enfoque introducido por Kopparty y Rossman [9] para un contexto más general. Antes de mostrar un esquema de la estrategia usada en este trabajo, se da una definición más.

Definición 2.10. Dados dos grafos H y G , decimos que una variable aleatoria $(X_v : v \in V(H))$ es un (H, G) -homomorfismo soporte si toda función $f : V(H) \rightarrow V(G)$ tal que $f(v) : v \in V(H) \in \text{rng}(X_v : v \in V(H))$ es un homomorfismo de H a G .

3. Desigualdades que involucran densidad de homomorfismos y entropía.

Como se dijo anteriormente, el objetivo central de este trabajo es demostrar desigualdades binomiales de la forma $t(F, G) \geq t(T, G)^{\frac{|E(F)|}{|E(T)|}}$ donde F y T representan árboles y G es un grafo cualquiera. En el siguiente razonamiento se utiliza el concepto de entropía sobre una variable aleatoria X para encontrar una desigualdad equivalente a 1.

Así, supongamos que dados dos árboles T y F tal que $|V(F)| \cdot |E(T)| + l = |V(T)| \cdot |E(F)|$ para $l > 0$, la ecuación 1 se satisface para cualquier grafo G tal que $|V(G)| = n$. Por la definición de entropía 2.3 se concluye que:

$$\begin{aligned} \frac{\text{hom}(F, G)}{|V(G)|^{|V(F)|}} &\geq \left(\frac{\text{hom}(T, G)}{|V(G)|^{|V(T)|}} \right)^{\frac{|E(F)|}{|E(T)|}} \\ \frac{\text{hom}(F, G)^{|E(T)|}}{|V(G)|^{|V(F)||E(T)|}} &\geq \frac{\text{hom}(T, G)^{|E(F)|}}{|V(G)|^{|V(T)||E(F)|}} \\ \frac{n^l \text{hom}(|E(T)| \cdot F, G)}{n^{|V(F)||E(T)|}} &\geq \frac{\text{hom}(|E(F)| \cdot T, G)}{n^{|V(T)||E(F)|}} \\ \frac{\text{hom}(|E(T)| \cdot F \cup l \cdot K_1, G)}{n^{|V(T)||E(F)|}} &\geq \frac{\text{hom}(|E(F)| \cdot T, G)}{n^{|V(T)||E(F)|}} \end{aligned}$$

En el razonamiento anterior se utilizaron dos hechos respecto a los homomorfismos, los cuales se pueden mostrar mediante argumentos combinatorios:

- $\text{hom}(F, G)^l = \text{hom}(l \times F, G)$, dónde $l \times F$ representa la unión disjunta de l copias el grafo F .
- $n = \text{hom}(K_1, G)$, dónde K_1 es el grafo con un solo vértice. Esto es debido a que hay un homomorfismos por cada vértice de G y $|V(G)| = n$.
- $\text{hom}(F, G) \cdot \text{hom}(H, G) = \text{hom}(F \cup H, G)$, dónde $F \cup H$ representa la unión disjunta de los grafo F y H , observe que este es un caso más general que el primer item.

Finalmente, se concluye que la siguiente desigualdad es equivalente a 1:

$$\text{hom}(|E(T)| \cdot F \cup l \cdot K_1, G) \geq \text{hom}(|E(F)| \cdot T, G) \quad (9)$$

Por otro lado, definimos $(X_v : v \in V(T))$ un (T, G) -homomorfismo soporte con distribución uniforme a partir del cuál se desea construir una variable aleatoria $(Y_u : u \in V(F))$ que sea un (F, G) -homomorfismo soporte y que satisfaga:

$$\mathbb{H}(Y_u : u \in V(F)) \geq \frac{|E(F)|}{|E(T)|} \mathbb{H}(X_v : v \in V(T)) \quad (10)$$

Como consecuencia del lema 2.6 tenemos que:

$$\log(\text{hom}(F, G)) \geq \mathbb{H}(Y_u : u \in V(F)) \geq \frac{|E(F)|}{|E(T)|} \mathbb{H}(X_v : v \in V(T)) = \log(\text{hom}(T, G)^{\frac{|E(F)|}{|E(T)|}})$$

Y por tanto, se tiene que 10 equivale a 1:

$$t(F, G) = \frac{\text{hom}(F, G)}{|V(G)|^{|E(F)|}} \geq \frac{\text{hom}(T, G)^{\frac{|E(F)|}{|E(T)|}}}{|V(G)|^{|E(F)|}} = t(T, G)^{\frac{|E(F)|}{|E(T)|}}$$

Para entender mejor lo escrito anteriormente, veamos el siguiente ejemplo sencillo.

Definición 3.1. Un camino P_k es un grafo acíclico con k vértices tal que cada vértice tiene a lo más 2 vecinos, como se observa en la Figura 2.

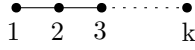


Figure 2: Camino con k vértices

Ejemplo 3.2. Demostrar que $t(P_5, G) \geq t(P_3, G)^{\frac{4}{5}}$

Proof. Sea (X_1, X_2, X_3) un homomorfismo aleatorio con distribución uniforme de P_3 a G . Definimos el homomorfismo aleatorio $(Y'_1, Y'_2, Y'_3, Y'_4, Y'_5)$ de P_5 a G como sigue:

- Y'_1 es una copia de X_1 .
- Y'_2 es una copia de X_2 dado que $X_1 = Y'_1$.
- Y'_3 es una copia de X_3 dado que $X_2 = Y'_2$.
- Y'_4 es una copia de X_2 dado que $X_3 = Y'_3$.
- Y'_5 es una copia de X_3 dado que $X_2 = Y'_4$.

Procedemos a calcular la entropía de (Y'_1, \dots, Y'_5) utilizando la propiedad citada en la ecuación 5:

$$\mathbb{H}(Y'_1, \dots, Y'_5) = \mathbb{H}(Y'_1) + \mathbb{H}(Y'_2 | Y'_1) + \mathbb{H}(Y'_3 | Y'_1, Y'_2) + \mathbb{H}(Y'_4 | Y'_1, Y'_2, Y'_3) + \mathbb{H}(Y'_5 | Y'_1, Y'_2, Y'_3, Y'_4)$$

Dada la construcción de $(Y'_i : i \in \{1, \dots, 5\})$ se observa que Y'_i es independiente de Y'_j dado Y'_{i-1} para todo $j < i - 1$. Utilizando la propiedad 7 se concluye:

$$\begin{aligned}\mathbb{H}(Y'_1, \dots, Y'_5) &= \mathbb{H}(Y'_1) + \mathbb{H}(Y'_2 | Y'_1) + \mathbb{H}(Y'_3 | Y'_2) + \mathbb{H}(Y'_4 | Y'_3) + \mathbb{H}(Y'_5 | Y'_4) \\ &= \mathbb{H}(X_1) + \mathbb{H}(X_2 | X_1) + \mathbb{H}(X_3 | X_2) + \mathbb{H}(X_2 | X_3) + \mathbb{H}(X_3 | X_2)\end{aligned}$$

Utilizando nuevamente la propiedad 5 se obtiene:

$$\begin{aligned}\mathbb{H}(Y'_1, \dots, Y'_5) &= \mathbb{H}(X_1) + \mathbb{H}(X_1, X_2) - \mathbb{H}(X_1) + \mathbb{H}(X_3, X_2) - \mathbb{H}(X_2) + \mathbb{H}(X_3, X_2) - \mathbb{H}(X_3) + \mathbb{H}(X_2, X_3) - \mathbb{H}(X_2) \\ &= \mathbb{H}(X_1, X_2) + 3\mathbb{H}(X_2, X_3) - 2\mathbb{H}(X_2) - \mathbb{H}(X_3)\end{aligned}\tag{11}$$

Definimos ahora el homomorfismo aleatorio $(Y''_1, Y''_2, Y''_3, Y''_4, Y''_5)$ como sigue:

- Y''_1 es una copia de X_1 .
- Y''_2 es una copia de X_2 dado que $X_1 = Y''_1$.
- Y''_3 es una copia de X_1 dado que $X_2 = Y''_2$.
- Y''_4 es una copia de X_2 dado que $X_1 = Y''_3$.
- Y''_5 es una copia de X_3 dado que $X_2 = Y''_4$.

Un razonamiento análogo al anterior muestra que:

$$\mathbb{H}(Y''_1, \dots, Y''_5) = 3\mathbb{H}(X_1, X_2) + \mathbb{H}(X_2, X_3) - 2\mathbb{H}(X_2) - \mathbb{H}(X_1)\tag{12}$$

Sea $(Y_1, \dots, Y_{12}) = (Y'_1, \dots, Y'_5, Y''_1, \dots, Y''_5, X_1, X_3)$ un homomorfismo aleatorio del grafo $L = 2 \cdot P_5 \cup 2 \cdot K_1$ al grafo G . Utilizando las ecuaciones 11 y 12, la propiedad 7 y el hecho de que X_3 es independiente de X_1 dado X_2 , se concluye que:

$$\begin{aligned}\mathbb{H}(Y_1, \dots, Y_{12}) &= \mathbb{H}(Y'_1, \dots, Y'_5) + \mathbb{H}(Y''_1, \dots, Y''_5) + \mathbb{H}(X_1) + \mathbb{H}(X_3) \\ &= 4(\mathbb{H}(X_1, X_2) + \mathbb{H}(X_2, X_3) - \mathbb{H}(X_2)) \\ &= 4(\mathbb{H}(X_1, X_2) + \mathbb{H}(X_3 | X_2, X_1)) \\ &= 4(\mathbb{H}(X_1, X_2, X_3))\end{aligned}$$

Con esta última igualdad y utilizando la definición 2.5 se concluye lo siguiente:

$$\log(\text{hom}(L, g)) \geq \mathbb{H}(Y_1, \dots, Y_{12}) = 4\mathbb{H}(X_1, X_2, X_3) = 4\log(\text{hom}(P_3, G)) = \log(\text{hom}(4 \cdot P_3, G))\tag{13}$$

Observe que la expresión 13 es de la forma 9 y, por tanto, queda demostrado que $t(P_5, G) \geq t(P_3, G)^{\frac{4}{2}}$. \square

4. Construcción del modelo general.

El objetivo de esta sección es generalizar la estrategia planteada en la sección anterior, específicamente en el ejemplo 3.2, para definir un modelo que permitirá evaluar computacionalmente desigualdades de la forma 1 y facilitar su demostración teórica.

Sean F y T bosques no vacíos tal que $\frac{|V(F)|}{|E(F)|} = \frac{|V(T)|}{|E(T)|}$. Sea $(X_v : v \in V(T))$ un (T, G) -homomorfismo soporte de máxima entropía el cuál alcanza la igualdad en 2.6. En lo que sigue utilizaremos las propiedades del lema 2.9 que permita encontrar una ecuación para $\mathbb{H}(X_u : u \in V(T))$.

Procedamos numerando los v rtices de T por v_1, v_2, \dots, v_t de tal manera que para todo $i \geq 2$, v_i tenga un  nico vecino en el conjunto $\{v_1, \dots, v_{i-1}\}$ denotado por $v_{p(i)}$; esto es posible debido a que los  rboles no tienen ciclos. Por la ecuaci n 5 concluimos que:

$$\begin{aligned}\mathbb{H}(X_v : v \in V(T)) &= \mathbb{H}(X_1) + \sum_{i=2}^t \mathbb{H}(X_i | X_1, \dots, x_{i-1}) \\ &= \mathbb{H}(X_1) + \sum_{i=2}^t \mathbb{H}(X_i | X_{p(i)}) \\ &= \mathbb{H}(X_1) + \sum_{i=2}^t (\mathbb{H}(X_i, X_{p(i)}) - \mathbb{H}(X_{p(i)}))\end{aligned}$$

Denotamos por $\delta_T(v)$ el grado del v rtice $v \in V(T)$, es decir, $\delta_T(v) = |\{u \in V(T) : uv \in E(T)\}|$. de la expresi n anterior se puede observar que si $u_i v_j \in E(T)$, entonces, sin p rdida de generalidad $u = v_{p(j)}$ y, por tanto, cada arista de T aparece en el primer t rmino de la sumatoria exactamente una vez. Adicionalmente, $\mathbb{H}(X_{u_i})$ para cualquier v rtice $u_i \in V(T)$ aparecer  exactamente una vez por cada vecino u_j de v_i siempre que $j > i$, es decir, $\mathbb{H}(X_v)$ aparece exactamente $\delta_T(u_i) - 1$ veces. As , la expresi n anterior equivale a:

$$\mathbb{H}(X_v : v \in V(T)) = \sum_{uv \in E(T)} \mathbb{H}(X_u, X_v) - \sum_{v \in V(T)} (\delta_T(v) - 1) \mathbb{H}(X_v) = \log(\text{hom}(T, G)) \quad (14)$$

Se desea construir un (F, G) -homomorfismo soporte $(Y_v : v \in V(F))$ tal que se satisface 10.

Sea $f : V(F) \rightarrow V(T)$ un homomorfismo. Para construir $(Y_u : v \in v(F))$, numeramos los vertices de F y hacemos $Y_{u_i} = X_{f(u_i)}$ independiente de las elecciones de Y_{u_j} para todo $j < i - 1$. Como consecuencia de la ecuaci n 14, nuestro objetivo es mostrar que f satisface:

$$\begin{aligned}\mathbb{H}(Y_u : u \in V(F)) &= \sum_{uv \in E(F)} \mathbb{H}(X_{f(u)}, X_{f(v)}) - \sum_{v \in V(F)} (\delta_F(v) - 1) \mathbb{H}(X_{f(v)}) \\ &= \frac{|E(F)|}{|E(T)|} \left(\sum_{uv \in E(T)} \mathbb{H}(X_u, X_v) - \sum_{v \in V(T)} (\delta_T(v) - 1) \mathbb{H}(X_v) \right) \\ &= \frac{|E(F)|}{|E(T)|} (\mathbb{H}(X_v : v \in V(T)))\end{aligned} \quad (15)$$

De esta manera, se garantiza que se satisface la ecuaci n 10 y, por tanto, la desigualdad 1.

En conclusi n, para demostrar 1, la estrategia es encontrar un homomorfismo $f : V(F) \rightarrow V(T)$ que satisfaga 15. Sin embargo, en casos como el ejemplo 3.2, no es posible encontrar un  nico homomorfismo que satisfaga esta ecuaci n y se vuelve necesario utilizar combinaci n de homomorfismos. As , para generalizar la estrategia anterior, por cada $f \in \text{Hom}(F, T)$ se toma un n mero real no negativo z_f tal que $\sum_f z_f = 1$. La desigualdad 1 se satisface si se cumple:

$$\begin{aligned}\sum_{f \in \text{Hom}(F, T)} z_f \left(\sum_{uv \in E(F)} \mathbb{H}(X_{f(u)}, X_{f(v)}) - \sum_{u \in V(F)} (\delta_F(u) - 1) \mathbb{H}(X_{f(u)}) \right) \\ = \frac{|E(F)|}{|E(T)|} \left(\sum_{uv \in E(T)} \mathbb{H}(X_u, X_v) - \sum_{v \in V(T)} (\delta_T(v) - 1) \mathbb{H}(X_v) \right)\end{aligned} \quad (16)$$

Finalmente, se observa que para encontrar las variables z_f se puede definir un problema de optimización lineal introduciendo una nueva variable t como sigue:

$$\begin{aligned}
& \min t \\
& \text{s.t.} \\
& z_f \geq 0 \text{ para } f \in \text{Hom}(F, T) \\
& \sum_f z_f = 1 \\
& \sum_f \left(\sum_{u \in f^{-1}(v)} z_f (\delta_F(u) - 1) \right) \geq \frac{|E(F)|}{|E(T)|} (\delta_T(v) - 1) \text{ para todo } v \in V(T) \\
& t \geq \sum_f \left(\sum_{\substack{xy \in E(F) \\ f(x)=u, f(y)=v}} z_f \right) \text{ para todo } uv \in E(T)
\end{aligned} \tag{17}$$

Observe que si el modelo es factible, el mínimo valor que debería tomar la variable t es $\frac{|E(F)|}{|E(T)|}$.

En la sección 7 se habla de la implementación computacional de este modelo y en la sección 5 y 6 se muestran algunos resultados teóricos propios que surgen al implementarlo en casos particulares.

5. Construcción de contraejemplos.

El objetivo de esta sección es mostrar la utilidad del modelo 17 para la construcción de contraejemplos.

Con la teoría desarrollada hasta el momento, no es posible afirmar que, dados F y T , la desigualdad 1 no se satisface si el modelo 17 no es factible.

Vamos a estudiar la veracidad de la desigualdad $t(P_4, G) \geq t(P_3, G)^{3/2}$ para todo grafo G . Después de implementar el modelo lineal computacionalmente, se observa que el sistema es infactible. Así, para la demostración rigurosa de que la desigualdad no se satisface, debemos construir un grafo G tal que $t(P_4, G) < t(P_3, G)^{3/2}$. Por lo cual se estudia a qué se debe la infactibilidad del modelo. A continuación se listan todos los posibles homomorfismos $f : V(P_4) \rightarrow V(P_3)$; cada homomorfismo se nota por una lista (u_1, u_2, u_3, u_4) , donde $u_i = f(i) \in \{1, 2, 3\}$.

1. (1, 2, 1, 2) 4. (2, 1, 2, 3) 7. (3, 2, 1, 2)
2. (1, 2, 3, 2) 5. (2, 3, 2, 1) 8. (3, 2, 3, 2)
3. (2, 1, 2, 1) 6. (2, 3, 2, 3)

Se procede a crear la matriz relacionada con el modelo 17. Se tiene en total $|V(P_3)| + |E(P_3)| + 1 = 3 + 2 + 1 = 6$ restricciones y 9 variables, una por cada homomorfismo y la variable adicional t . Por esta razón, la matriz que deseamos construir es una matriz de dimensión 6×9 , como se muestra a continuación.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\mathbb{H}(X_1, X_2)$	3	1	3	2	1	0	2	0	-1
$\mathbb{H}(X_2, X_3)$	0	2	0	1	2	3	1	3	-1
$\mathbb{H}(X_1)$	-1	0	-1	-1	0	0	-1	0	0
$\mathbb{H}(X_2)$	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
$\mathbb{H}(X_3)$	0	-1	0	0	-1	-1	0	-1	0

Table 1: Matriz correspondiente a las restricciones del problema de optimización lineal 17

La matriz anterior se construyó utilizando la ecuación 15 sobre cada homomorfismo para encontrar los coeficientes respectivos. Mostremos el calculo para el homomorfismo 2. (1, 2, 3, 2)

$$\begin{aligned}
\mathbb{H}(Y_1, \dots, Y_4) &= \mathbb{H}(X_{f(1)}, X_{f(2)}) + \mathbb{H}(X_{f(2)}, X_{f(3)}) + \mathbb{H}(X_{f(3)}, X_{f(4)}) - \mathbb{H}(X_{f(2)}) - \mathbb{H}(X_{f(3)}) \\
&= \mathbb{H}(X_1, X_2) + \mathbb{H}(X_2, X_3) + \mathbb{H}(X_3, X_2) - \mathbb{H}(X_2) - \mathbb{H}(X_3) \\
&= \mathbb{H}(X_1, X_2) + 2\mathbb{H}(X_2, X_3) - \mathbb{H}(X_2) - \mathbb{H}(X_3)
\end{aligned}$$

Así, la segunda columna de la matriz viene dada por $(1, 2, 0, -1, -1)^T$.

Observamos que las entradas de la fila 4 de la matriz son todas -1 , a excepción de la última entrada. Esto quiere decir, que la restricción asociada al vértice 2 es la siguiente:

$$-\sum_f z_f \leq -\frac{3}{2}$$

Sin embargo, la primera restricción del sistema es $\sum_f z_f = 1$, lo cuál implica una contradicción y es la razón de por qué el modelo es infeasible.

En términos de grafos, el hecho de que todas las entradas de la fila 4 de la matriz sean -1 , implica que para todo homomorfismo $f : V(P_4) \rightarrow V(P_3)$ existe al menos un vértice $v \in V(P_4)$ tal que $f(v) = 2$. Esta observación motiva la construcción del grafo G para el cuál $t(P_4, G) < t(P_3, G)^{3/2}$.

Teorema 5.1. *Existe un grafo G tal que $t(P_4, G) < t(P_3, G)^{3/2}$*

Proof. Recordemos que un grafo tripartito es aquel dónde el conjunto de vértices se puede expresar como la unión disjunta de tres conjuntos tales que no existen aristas entre dos vértices del mismo conjunto; más formalmente, un grafo tripartito es aquel que $V(G) = A \cup B \cup C$ con A, B, C disjuntos dos a dos, tal que si $u, v \in A$ resp. B, C entonces $uv \notin E(G)$.

Sea G un grafo tripartito tal que $|A| = |C| = \frac{1}{2}(1 - \epsilon)n$ y $|B| = \epsilon n$ con $\epsilon \in \mathbb{R}^+$ suficientemente pequeño y tal que si $uv \in E(G)$, entonces $u \in A$ y $v \in B$ o $u \in C$ y $v \in B$. En la Figura 3 se observa un esquema de este grafo.

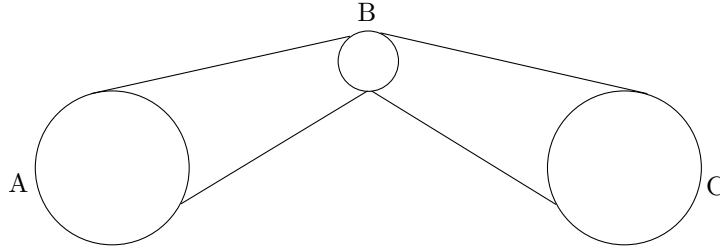


Figure 3: Esquema del grafo G

Utilizando la definición 2.3 y tomando ventaja del hecho de que el grafo G es una copia topológica de P_3 , se calcula los valores para $t(P_4, G)$ y $t(P_3, G)$.

Para calcular $t(P_4, G)$ se tiene en cuenta que hay 8 homomorfismos de P_4 a P_3 y en todos ellos se utilizan exactamente dos veces cualquiera de los vértices de grado 1 y exactamente dos veces el vértice de grado 2.

Para calcular $t(P_3, G)$ se tiene en cuenta que hay 6 homomorfismos de P_3 en sí mismo; en cuatro de ellos se utiliza dos veces alguno de los vértices de grado 1 y una vez el vértice de grado 2 y, en los dos homomorfismos restantes se utiliza dos veces el vértice de grado 2 y una vez alguno de los vértices de grado 1.

$$\begin{aligned}
t(P_4, G) &= \frac{8(n\epsilon)^2(\frac{1}{2}(1 - \epsilon)n)^2}{n^4} = 8\epsilon^2 \left(\frac{1}{2}(1 - \epsilon)\right)^2 = 4\epsilon^2(1 - \epsilon)^2 \\
t(P_3, G) &= \frac{4(\frac{1}{2}(1 - \epsilon)n)^2(n\epsilon) + 2(n\epsilon)^2(\frac{1}{2}(1 - \epsilon)n)}{n^3} = (1 - \epsilon)^2 \epsilon + \epsilon^2(1 - \epsilon)
\end{aligned}$$

Se toma $\epsilon < \frac{1}{2}$. De este modo, la siguiente desigualdad es verdad:

$$4\epsilon(1 - \epsilon) < 1$$

Se tendrá la siguiente cadena de desigualdades:

$$\begin{aligned} t(P_4, G)^2 &= (2\epsilon^2(1 - \epsilon)^2)^2 = 4\epsilon^4(1 - \epsilon)^4 < (1 - \epsilon)^3\epsilon^3 \\ &= ((1 - \epsilon)\epsilon)^3 \\ &= ((1 - \epsilon)(\epsilon - \epsilon^2 + \epsilon^2))^3 \\ &= ((1 - \epsilon)^2\epsilon + \epsilon^2(1 - \epsilon))^3 = t(P_3, G)^3 \end{aligned}$$

Finalmente, se concluye que $t(P_4, G) < t(P_3, G)^{\frac{3}{2}}$. □

6. Caracterización de árboles con menor densidad de homomorfismos que el camino de tres vértices.

En esta sección se pretende encontrar una caracterización para los árboles T que satisfacen $t(T, G) \geq t(P_3, G)^{\frac{|E(T)|}{2}}$.

La implementación computacional relacionada con esta sección se puede encontrar en el notebook 2 anexo al documento. De la base de datos [10] se obtuvo una lista de todos los posibles árboles hasta 10 vértices y se aplicó el modelo de optimización lineal 17 para entender en qué casos se obtiene un modelo feasible y poder realizar una demostración formal.

A continuación se enuncia el teorema de caracterización de árboles y su demostración teórica. Para esta parte se utiliza el hecho de que el número cromático de cualquier árbol es 2, esto significa que es posible realizar una bipartición del conjunto de vértices, $V(T) = A \cup B$ de manera que no existen aristas entre cualesquiera dos vértices que pertenecen al mismo conjunto.

En este sentido, si T es un árbol de n vértices, definimos (A, B) la bipartición de T y definimos D_A y D_B como sigue:

$$D_A = \sum_{v \in A} (\delta_T(v) - 1) \quad D_B = \sum_{v \in B} (\delta_T(v) - 1) \quad (18)$$

Observando además que la condición $\max\{D_A, D_B\} \geq \frac{n-1}{2}$ es equivalente a la condición $|A| \neq |B|$. Esta condición puede pensarse como una medida de asimetría en el árbol, esta idea se plasma en la Figura 4.

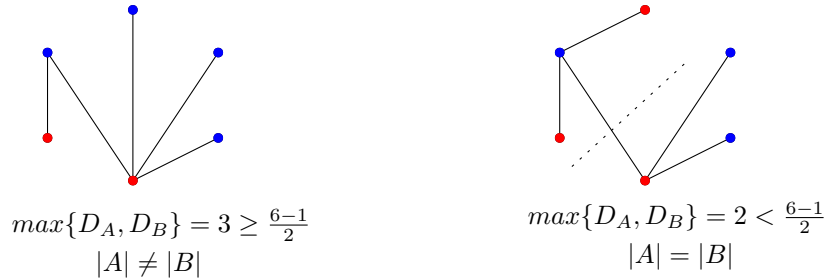


Figure 4: El árbol de la izquierda no posee simetría mientras que el de la derecha si.

Teorema 6.1. *Sea T un árbol con n vértices y G un grafo cualquiera. Las siguientes tres proposiciones son equivalentes:*

1. $\max\{D_A, D_B\} \geq \frac{n-1}{2}$.
2. El modelo lineal 17 es feasible.
3. $t(T, G) \geq t(P_4, G)^{\frac{n-1}{2}}$.

Proof. Teniendo en cuenta la teoría desarrollada hasta el momento, se puede concluir que (2.) implica (3.). Iniciemos demostrando que (2.) implica (1.).

Procedamos por contradicción: supongamos que $\max\{D_A, D_B\} \leq \frac{n-2}{2}$. Sea $H_A = \{f \in \text{Hom}(T, P_3) : f(A) = \{2\}\}$ y $H_B = \{f \in \text{Hom}(T, P_3) : f(B) = \{2\}\}$.

Recordemos que la restricción 1 del modelo 17 indica que $\sum_{f \in \text{Hom}(T, P_3)} z_f = 1$ y la restricción relacionada al vértice 2 viene dada por:

$$\begin{aligned}
\sum_f \left(\sum_{u \in f^{-1}(2)} z_f (\delta_T(u) - 1) \right) &= \sum_{f \in H_A} \left(\sum_{u \in f^{-1}(2)} z_f (\delta_T(u) - 1) \right) + \sum_{f \in H_B} \left(\sum_{u \in f^{-1}(2)} z_f (\delta_T(u) - 1) \right) \\
&= \sum_{f \in H_A} z_f D_A + \sum_{f \in H_B} z_f D_B \\
&\leq \sum_{f \in H_A} z_f \frac{n-2}{2} + \sum_{f \in H_B} z_f \frac{n-2}{2} \\
&= \frac{n-2}{2} \sum_f z_f = \frac{n-2}{2}
\end{aligned}$$

Sin embargo, según el modelo 17, es necesario que $\sum_f \left(\sum_{u \in f^{-1}(2)} z_f (\delta_T(u) - 1) \right) \geq \frac{n-1}{2}$. Esto implica que el modelo no es feasible, por tanto, queda demostrado que la proposición (2.) implica (1.).

Demostremos ahora que (3.) implica (1.), procediendo nuevamente por contradicción.

Supongamos que $\max\{D_A, D_B\} \leq \frac{n-2}{2}$ y tomemos H_A y H_B como antes. Sea G un grafo tripartito tal que $|A| = |C| = M$ y $|B| = m$ con $M \gg m$ y tal que si $uv \in E(T)$, entonces $u \in A$ y $v \in B$ o $u \in C$ y $v \in B$. Tenemos que:

$$\begin{aligned}
\text{hom}(T, G) &= \sum_{f \in H_A} m^{|A|} M^{|B|} + \sum_{f \in H_B} m^{|B|} M^{|A|} \\
&= 2^{|B|} m^{|A|} M^{|B|} + 2^{|A|} m^{|B|} M^{|A|}
\end{aligned}$$

Recordemos que $\max\{D_A, D_B\} \leq \frac{n-2}{2}$ implica $|A| = |B| = \frac{n}{2}$. Así: $\text{hom}(T, G) = 2(2mM)^{\frac{n}{2}}$. Se concluye:

$$t(T, G) = \frac{2(2mM)^{\frac{n}{2}}}{(n+2N)^n} \quad t(P_3, G) = \frac{4mM^2 + 2Mm^2}{(m+2M)^3}$$

Tomando $m = o(M)$ se verifica que:

$$t(T, G) < t(P_3, G)^{\frac{n-1}{2}}$$

Así, se concluye que (3.) implica (1.).

Finalmente, veamos que (1.) implica (2.). Supongamos que $D_A = \max\{D_A, D_B\} \geq \frac{n-1}{2}$. Sean $f_1, \dots, f_4 \in \text{Hom}(T, P_3)$ tales que: $f_1(A) = \{1\}$, $f_1(B) = \{2\}$, $f_2(A) = \{2\}$, $f_2(B) = \{1\}$, $f_3(A) = \{3\}$, $f_3(B) = \{2\}$,

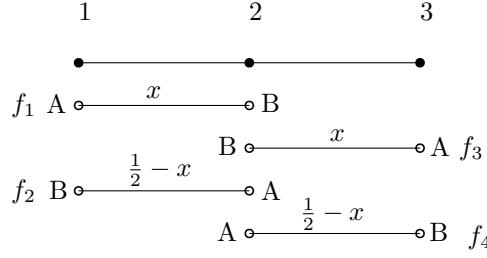


Figure 5: Esquema de los homomorfismos f_1, \dots, f_4 y sus respectivos pesos.

$f_4(A) = \{2\}$, $f_4(B) = \{3\}$, como se muestra en la Figura 5. Definimos $x = \frac{2D_A - n + 1}{4(D_A - D_B)}$ y tomamos $z_{f_1} = z_{f_3} = x$, $z_{f_2} = z_{f_4} = \frac{1}{2} - x$ y $z_f = 0$ para todo $f \in \text{Hom}(T, P_3) - \{f_1, \dots, f_4\}$.

Lo primero es notar que $0 \leq x \leq \frac{1}{2}$ ya que si $D_A \geq \frac{n-1}{2}$, $D_B \leq \frac{n-3}{2}$. Verifiquemos ahora que las restricciones para las aristas y los v rtices de P_3 se satisfacen, seg n el modelo 17, tomando $t = \frac{n-1}{2}$:

- Restricci n para la arista 12:

$$x(n-1) + (\frac{1}{2} - x)(n-1) = \frac{n-1}{2}$$

- La restricci n para arista 23 es un caso equivalente al anterior debido a la simetr a de los homomorfismos.
- Restricci n para el v rtice 1:

$$\begin{aligned} xD_A + (\frac{1}{2} - x)D_B &= D_A \frac{2D_A - n + 1}{4(D_A - D_B)} + D_B \frac{n - 1 - 2D_B}{4(D_A - D_B)} \\ &= \frac{1}{4(D_A - D_B)} (2D_A^2 - D_B^2 + (n-1)(D_B - D_A)) \\ &= \frac{1}{4} (2(D_A + D_B) - n + 1) \\ &= \frac{1}{4} (2n - 4 - n + 1) = \frac{n-3}{4} \geq 0 \end{aligned}$$

- El caso de la restricci n relacionada con el v rtice 3 es an logo anterior debido a la simetr a de los homomorfismos.
- Para la restricci n relacionada con v rtice 2:

$$\begin{aligned} 2xD_B + 2(\frac{1}{2} - x)D_A &= \frac{2D_A - n + 1}{2(D_A - D_B)} D_B + \frac{n - 1 - 2D_B}{2(D_A - D_B)} D_A \\ &= \frac{1}{2(D_A - D_B)} ((n-1)(D_A - D_B)) = \frac{n-1}{2} \end{aligned}$$

Lo anterior muestra que el modelo lineal es factible, y tiene soluci n para $t = \frac{|E(T)|}{|E(P_3)|}$. As , se concluye que (1.) implica (2.).

□

7. Algoritmo computacional.

El modelo 17 se implementó en *Python* utilizando el optimizador *Gurobi*, el cuál permite solucionar problemas de optimización matemática rápidamente. Se adjunta un *jupyter notebook* donde se puede observar el algoritmo utilizado en la sección 5 y 6 con su respectiva descripción.

El algoritmo consiste en tres partes:

1. Creación de la matriz que contiene la información de las restricciones del modelo 17. Esta parte incluye un algoritmo que determina, dados dos árboles, todos los posibles homomorfismos entre ellos.
2. Lectura y organización apropiada de los datos obtenidos de la base [10]. Como se puede apreciar en la sección 4, un hecho esencial en la teoría desarrollada es la propiedad que tienen los árboles de poder numerar los vértices $\{v_1, \dots, v_n\}$ de manera que para todo i , existe un único vecino de v_i en el conjunto $\{v_1, \dots, v_{i-1}\}$; esto es una consecuencia de que un árbol es un grafo sin ciclos. Lamentablemente, los árboles encontrados en la base de datos no están numerados teniendo en cuenta esta propiedad y por tanto, fue necesario realizar un algoritmo que tome una numeración cualquiera de los vértices de un árbol y regrese la numeración apropiada para este trabajo.
3. Uso del software *Gurobi* para solucionar el problema de optimización lineal sobre todos los posibles árboles hasta 10 vértices.

El algoritmo resultó ser exitoso, aunque podría mejorarse teniendo en cuenta que muchos homomorfismos son simétricos y, por tanto, no es necesario calcular los coeficientes relacionados con las restricciones para cada uno de ellos. Por otro lado, *Gurobi* permite obtener información muy completa: si el modelo es infeasible el algoritmo muestra la matriz relacionada a los coeficientes del problema para poder estudiar a qué se debe la infeasibilidad; por otro lado, si el modelo es feasible, el algoritmo muestra los homomorfismos que utilizó para minimizar el valor de t , junto con los pesos asignados a cada uno.

8. Conclusiones.

El uso de programación lineal en teoría de grafos es una herramienta de gran utilidad ya que permite desarrollar intuición y construir argumentos para desarrollar pruebas formales de desigualdades de la forma 1.

El algoritmo desarrollado fue capaz de concluir la feasibility de modelos relacionados con árboles de hasta 16 vértices alcanzando un límite de memoria.

Se observó que en algunos casos es posible realizar observaciones bastante útiles que permiten desarrollar una demostración formal teniendo en cuenta los resultados obtenidos para árboles con menos de 10 vértices.

Se espera poder continuar este trabajo para realizar una caracterización similar a la desarrollada en la sección 6 con respecto a caminos de cuatro vértices y, tal vez, generalizar estas caracterizaciones con respecto a caminos con un número par e impar de vértices.

References

- [1] L. Lovász, Large networks and graph limits, American Mathematical Society Colloquium Publications 60.
- [2] V. Rödl, On universality of graphs with uniformly distributed edges, Discrete Math 59 (12) (1986) 125,134.
- [3] R. L. G. F. R. Chung, R. M. Wilson., Quasi-random graphs., Combinatorica 4 (9) (1989) 345–362.
- [4] L. Lovász, B. Szegedy, Testing properties of graphs and functions., Israel J. Math 178 (2010) 113–156.
- [5] A. Sidorenko, A correlation inequality for bipartite graphs., Graphs Combin. 9 (1993) 201–204.
- [6] P. Erdős, M. Simonovits, Compactness results in extremal graph theory., Combinatorica 2 (1982) 275,288.
- [7] G. Blekherman, A. Raymond, A path forward: Tropicalization in extremal combinatorics, E-print arXiv.doi:arXiv:2004.05207v2.
- [8] T. M. Cover, J. A. Thomas, Elements of Information Theory, Wiley Interscience, New Jersey, 2006.
- [9] S. Kopparty, B. Rossman, The homomorphism domination exponent., European J. Combin., 32 (7) (2011) 1097,1114.
- [10] B. McKay, Trees sorted by diameter.
URL <https://users.cecs.anu.edu.au/~bdm/data/trees.html>