Redes Complexas - CPS765 - 2020.2

Primeira Lista de Exercícios

Pedro Maciel Xavier 116023847

9 de novembro de 2020

Questão 1.: Matriz de Adjacência

Podemos supor, neste caso, que as matrizes em questão vivem em um espaço vetorial construído sobre o semianel $(\mathcal{B},\vee,\wedge)$ em vez de $(\mathbb{R},+,\cdot)$, onde $\mathcal{B}=\{0,1\}$. Assim, as entradas das matrizes serão sempre 0 ou 1 e as operações usuais de soma e multiplicação são substituídas pela disjunção e pela conjunção lógica, respectivamente.

a) A fim de obter uma expressão para a alcançabilidade em k passos do vértice i ao j, dado pela entrada $\mathbf{B}_{i,j}^{(k)}$ vamos empregar um raciocínio indutivo. É claro que a alcançabilidade em 0 passos é dada pela matriz identidade \mathbf{I} , uma vez que só é possível chegar ao vértice em que já encontramonos. O caso para um único passo é dado pela matriz de adjacências \mathbf{A} , trivialmente. Logo, $\mathbf{B}^{(0)} = \mathbf{I} \ \mathbf{e} \ \mathbf{B}^{(1)} = \mathbf{A}$. Vamos supor, por hipótese de indução, que a matriz $\mathbf{B}^{(k)} \in \mathcal{B}^{n \times n}$ representa a alcançabilidade em exatamente k passos, isto é, se existe um caminho de comprimento k ligando o vértice i ao vértice j, então $\mathbf{B}_{i,j}^{(k)} = 1$. Caso contrário, $\mathbf{B}_{i,j}^{(k)} = 0$. Para saber se existe um caminho de tamanho k+1 entre os vértices i e j é preciso que exista um caminho de tamanho k entre i e algum vértice ξ assim como ξ deve ser incidente em j. Portanto,

$$\mathbf{B}_{i,j}^{(k+1)} = \bigvee_{\xi=1}^{n} \mathbf{B}_{i,\xi}^{(k)} \wedge \mathbf{A}_{\xi,j}$$

de onde concluimos quem, para todo $k \ge 1$, $\mathbf{B}^{(k+1)} = \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{A}$. O resultado é dado pelo produto usual de matrizes induzido pelo semianel booleano. Logo, escrevemos $\mathbf{B}^{(k)} = \mathbf{A}^k$.

b) Seguindo raciocínio semelhante, dizemos que i alcança j em k ou menos passos se $B_{i,j}^{(\xi)}=1$ para algum $0 \le \xi \le k$. Isto é,

$$\mathbf{C}_{i,j}^{(k)} = \mathbf{B}_{i,j}^{(0)} \vee \mathbf{B}_{i,j}^{(1)} \vee \mathbf{B}_{i,j}^{(2)} \cdots \vee \mathbf{B}_{i,j}^{(k)} = \bigvee_{\xi=0}^{n} \mathbf{B}_{i,j}^{(\xi)}$$

resultado que, por conta do espaço onde as matrizes se encontram, é caracterizado pela soma usual. Ou seja, $\mathbf{C}^{(k)} = \sum_{\xi=0}^k \mathbf{B}^{(\xi)}$.

- c) Análise da complexidade:
 - $\mathbf{B}^{(k)}$ A multiplicação usual de matrizes tem custo $O(n^3)$. Como temos de calcular este produto k-1 vezes, temos uma complexidade assintótica total de ordem $O(n^3k)$.
 - $\mathbf{C}^{(k)}$ A soma de matrizes possui complexidade $O(n^2)$. Contando as k-1 somas temos um total de $O(n^2k)$ para esta etapa. Se recalculamos $\mathbf{B}^{(k)}$ a cada passo, a complexidade das multiplicações segue uma progressão aritmética em k, totalizando $O(n^3k^2)$. Se aproveitamos a matriz anterior a cada soma, podemos realizar este processo em tempo $O(n^3k)$. O termo quadrático em n é de ordem inferior e pode ser omitido em ambos os casos.
- d) Seguindo o conselho de multiplicar diferentemente, apresento duas abordagens para reduzir a complexidade do cálculo de $\mathbf{B}^{(k)}$ e $\mathbf{C}^{(k)}$. A primeira, se aplica a um grafo qualquer e se baseia

na seguinte relação:

$$\mathbf{A}^k = \begin{cases} \mathbf{I} & \text{para } k = 0 \\ \left(\mathbf{A}^{\frac{k}{2}}\right)^2 & \text{para } k \text{ par} \\ \left(\mathbf{A}^{\frac{k-1}{2}}\right)^2 * \mathbf{A} & \text{para } k \text{ impar} \end{cases}$$

para $k \geq 0$. Em geral, esta relação vale para qualquer operação * associativa e, portanto, utilizaremos para o cálculo das potências de matrizes. Isso nos traz complexidade $O(\log k)$ nesta tarefa. Com este aprimoramento, somos capazes de calcular $\mathbf{B}^{(k)}$ em tempo $O(n^3 \log k)$ enquanto $\mathbf{C}^{(k)}$ sai por $O(n^3 \log k!) = O(n^3 k \log k)$. Apesar do ganho no cálculo de $\mathbf{B}_{(k)}$, simplesmente aplicar este método requer calcular cada ξ -ésima potência de \mathbf{A} . É melhor, portanto, multiplicar por \mathbf{A} e somar ao resultado iterativamente, com custo $O(n^3 k + n^2 k) = O(n^3 k)$.

Ainda podemos fazer melhor em alguns casos, dadas algumas condições. Vamos retornar ao espaço euclidiano usual $\mathbb{R}^{n\times n}$, pagando um custo $O(n^2)$ ao final do cálculo para definir cada entrada de $\mathbf{B}^{(k)}$ e $\mathbf{C}^{(k)}$ como 0 ou 1 verificando se cada elemento da matriz é ou não nulo, respectivamente. Se $\det(\mathbf{I} - \mathbf{A}) = (-1)^n \det(\mathbf{A} - \mathbf{I}) \neq 0$, isto é, para cada autovalor λ de \mathbf{A} temos que $\lambda \neq 1$, podemos dizer que

$$\sum_{\xi=0}^{k} \mathbf{A}^{\xi} = (\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{k+1})$$

A inversão da matriz $\mathbf{I} - \mathbf{A}$ pode ser feita em tempo $O(n^3)$ pela eliminação de Gauss-Jordan. Isso nos permite calcular $\mathbf{C}^{(k)}$ em tempo $O(n^3) + O(n^3 \log k)$, ou seja, $O(n^3 \log k)$.

Temos ainda um caso ainda mais específico, para grafos não-direcionados. Neste caso, a estrutura confere $\mathbf{A} = \mathbf{A^T}$. O Teorema Espectral nos garante, portanto, que a matriz \mathbf{A} é diagonalizável e, além disso, a simetria permite encontrar a forma $\mathbf{A} = \mathbf{S} \mathbf{\Lambda} \mathbf{S}^{-1}$ em tempo $O(n^3)$ através da transformação de Householder seguida da aplicação do algoritmo QR. Em seguida, calculamos $\mathbf{B}^{(k)} \sim \mathbf{A}^k = \mathbf{S} \mathbf{\Lambda}^k \mathbf{S}^{-1}$ em tempo $O(n^3 + n \log k)$, uma vez que basta calcular a potência de cada uma das n entradas da diagonal principal de $\mathbf{\Lambda}$, o que possui complexidade $O(\log k)$ segundo o método visto acima. Por fim, isso também se aplica ao cálculo de $\mathbf{C}^{(k)}$, que pelo método da soma geométrica de matrizes descrito acima pode ser feito em tempo $O(n^3 + n \log k)$. Isso se verifica também por outra propriedade da forma diagonal de $\mathbf{\Lambda}$, uma vez que

$$\sum_{\xi=0}^{k} \mathbf{A}^{\xi} = \mathbf{S} \begin{bmatrix} \sum_{\xi=0}^{k} \lambda_{1}^{\xi} \\ \sum_{\xi=0}^{k} \lambda_{1}^{\xi} \end{bmatrix} \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S} \begin{bmatrix} \frac{1-\lambda_{1}^{k+1}}{1-\lambda_{1}} \\ & \ddots \\ & & \sum_{\xi=0}^{k} \lambda_{n}^{\xi} \end{bmatrix} \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S} \begin{bmatrix} \frac{1-\lambda_{1}^{k+1}}{1-\lambda_{1}} \\ & & \ddots \\ & & \frac{1-\lambda_{n}^{k+1}}{1-\lambda_{n}} \end{bmatrix} \mathbf{S}^{-1}$$

onde fica clara a condição de que $\lambda \neq 1$.

Questão 2.: Grau médio e densidade

Para analisar o comportamento das duas propriedades (grau médio \overline{g} e densidade ρ) vamos escrever cada uma em função da outra. Partimos das expressões

$$\overline{g} = \frac{2m}{n} e \rho = \frac{2m}{n(n-1)}$$

de onde definimos as funções

$$\overline{g}(\rho) = \rho(n-1) \ e \ \rho(\overline{g}) = \frac{\overline{g}}{(n-1)}$$

O grau médio é, portanto, uma dilatação da densidade por um fator (n-1) para $n \in \mathbb{N}$ qualquer. Possui comportamento monotônico crescente como função de ρ . Desta forma, para um grafo

qualquer de n vértices, independentemente de sua configuração de artestas, sabemos que o grau médio e a densidade estão relacionados de maneira linear. Mais do que isso, dizemos que $\overline{g} \propto \rho$. Isso garante que altas densidades levam a um alto grau médio da rede, e vice-versa.

Questão 3.: clusterização

1 Calculando a clusterização local de cada vértice do grafo:

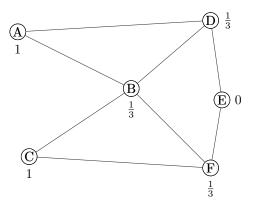


Figura 1: Clusterização local

A clusterização média será, portanto,

$$\frac{1}{6} \sum_{i=A}^{F} c_i = \frac{1}{2} = 0.5$$

2 Contando as triplas e os triângulos:

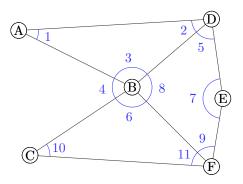


Figura 2: Triplas numeradas

Temos, então, 11 triplas e 2 triângulos ($\triangle ABD$ e $\triangle BCF$). Logo, a clusterização global é dada por

$$\frac{3\times \mathrm{n^0~de~tri\hat{a}ngulos}}{\mathrm{n^0~de~triplas}} = \frac{6}{11} = 0.\overline{54}$$

3 A densidade da rede é dada por simplesmente $\rho = \frac{2m}{n(n-1)}$, ou seja, $\rho = \frac{16}{30} = 0.5\overline{3}$. Observa-se que o valor da densidade se encontra entre o da clusterização média e o da clusterização global, estando mais próximo desta última.

Questão 4.: Closeness

Lembrando que o closeness de um vértice v é dado pela expressão

$$c_v = \frac{1}{n-1} \sum_{u \neq v \in V} d(u, v)$$

onde d(u, v) é a distância entre u e v definimos as métricas globais:

• Average Pairwise Distance (APD):

$$APD(V, E) = \frac{1}{\binom{n}{2}} \sum_{u \in V} \sum_{v > u \in V} d(u, v)$$

• Average Path Lenght (APL:)

$$APL(V, E) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} d(u, v)$$

É importante notar que a métrica APD só se aplica a grafos não-direcionados, uma vez que os pares (u, v) do somatório sempre tem v > u. Aplicar sobre grafos direcionados geraria assimetria conforme a numeração dos vértices.

1 Reescrevendo APD:

$$\begin{split} \text{APD}(V,E) &= \frac{1}{\binom{n}{2}} \sum_{u \in V} \sum_{v > u \in V} d(u,v) \\ &= \frac{2}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \sum_{v > u \in V} d(u,v) \\ &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \left[\sum_{v > u \in V} d(u,v) + \sum_{v > u \in V} d(u,v) \right] \\ &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \left[\sum_{v > u \in V} d(u,v) + \sum_{v < u \in V} d(u,v) + \sum_{v = u \in V} d(u,v) \right] \\ &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} d(u,v) \\ &= \text{APL}(V,E) \end{split}$$

Aqui assumimos que $d(u,v) = d(v,u) \ \forall u,v \in V$ e $d(u,u) = 0 \ \forall u \in V$. Esta última suposição apenas explicita que loops não são levados em consideração, deixando assim a definição compatível com o termo n(n-1) que divide o total.

Vamo agora reescrever a métrica APD em função do closeness dos vértices:

$$APD(V, E) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \left[\sum_{v>u \in V} d(u, v) + \sum_{v < u \in V} d(u, v) \right]$$
$$= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \sum_{v \neq u \in V} d(u, v)$$
$$= \frac{1}{n} \sum_{u \in V} c_u$$

onde c_u é o closeness do vértice u. Vale notar que isso diz que APD e APL podem ser entendidos como o closeness médio.

2 Se o APL e o diâmetro de uma rede são iguais, então

$$APL(V, E) = D(V, E)$$

$$\begin{split} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} d(u,v) &= \max_{u,v \in V} d(u,v) \\ \frac{1}{n(n-1)} \sum_{u,v \in V} |d(u,v)| &= \lim_{p \to \infty} \left[\sum_{u,v \in V} |d(u,v)|^p \right]^{\frac{1}{p}} \\ & \therefore \frac{1}{n(n-1)} = \end{split}$$

3

4 Seja $L_{h,k}$ um grafo pirulito fruto da junção da clique \mathcal{K}_h com um caminho simples \mathcal{C}_k onde n = k + h é o total de vértices.

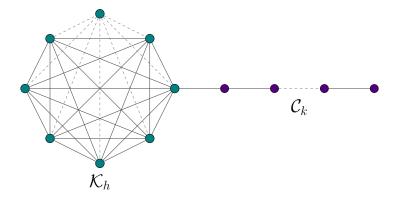


Figura 3: Um Grafo Pirulito

Para calcular o valor da métrica APD para este grafo vamos utilizar a expressão que o relaciona com o *closeness* de cada vértice.

Questão 5.: Betweeness

Seja $b_v(i,j)$ a contribuição do par (i,j) para o betweeness do vértice v. Temos as seguintes definições:

1.
$$\hat{b}_v(i,j) = \mathbb{I} \{ \sigma_v(i,j) > 0 \}$$

2.
$$b_v(i,j) = \frac{\sigma_v(i,j)}{\sigma(i,j)}$$

3.
$$\check{b}_v(i,j) = [\{ \sigma_v(i,j) = \sigma(i,j) \}]$$

Podemos pensar as definições 1 e 3 como sendo as versões otimista e pessimista da definição 2, respectivamente.

- ${f 1}$ Em um grafo completo com |V|=n vértices, sempre existe uma aresta entre um par (i,j). Portanto, todo caminho mínimo entre i e j é único e possui comprimento 1. Desta forma, $b_v(i,j)=0$ independentemente da métrica utilizada. O betweeness de cada vértice é, portanto, igual a zero.
- **2** Em um grafo bipartido completo, com conjuntos disjuntos de vértices V_1 e V_2 , onde $V = V_1 \cup V_2$, temos dois casos a serem analisados separadamente. Para um dado par de vértices (i,j) temos que, se $v \in V_{\xi}, \xi = 1, 2$:

$$b_v(i,j) = \begin{cases} 0 & \text{se } i \in V_1 \text{ e } j \in V_2 \\ & \text{se } i, j \in V_1 \\ b_v(j,i) & \text{caso contrário} \end{cases}$$

3

Questão 6.: PageRank

1 A centralidade de PageRank é a solução para o sistema de equações abaixo:

$$\mathbf{x}_i = \alpha \sum_{j=1}^n \mathbf{A}_{j,i} \frac{\mathbf{x}_j}{\mathbf{d}_j^s} + \frac{1 - \alpha}{n}$$

onde \mathbf{d}_j^s é o grau de saída do vértice j. Este termo pode ser absorvido pela matriz de adjacências, dividindo cada j-ésima linha da matriz por \mathbf{d}_j^s , obtendo assim a matriz \mathbf{D} . Além disso, o somatório está representando um produto interno, entre a i-ésima linha de \mathbf{D}^{T} e o vetor \mathbf{x} , que mede a centralidade de cada vértice. Tomando $\beta = \frac{1-\alpha}{n}$, podemos reescrever a equação como:

$$\mathbf{x} = \left[\alpha \mathbf{D}^{\mathsf{T}} + \beta \mathbb{1}\right] \mathbf{x}$$

onde $\mathbb{1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tem entradas $\mathbb{1}_{i,j} = 1$. Esta equação vale quando levamos em consideração que $\|\mathbf{x}\|_1 = 1$ e que $0 \le \mathbf{x}_i \le 1$. Seja $\mathbf{M} = \alpha \mathbf{D^T} + \beta \mathbb{1}$, temos que a solução do sistema \mathbf{x} é o autovetor principal de \mathbf{M} com autovalor correspondente $\lambda = 1$. Como a primeira equação é equivalente a esta última, e cada iteração do método da potência é dada por $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{M}\mathbf{x}^{(k)}$ a menos de uma normalização, podemos calcular o PaqeRank iterativamente, pela relação

$$\mathbf{x}_{i}^{(k+1)} = \alpha \sum_{j=1}^{n} \mathbf{A}_{j,i} \frac{\mathbf{x}_{j}^{(k)}}{\mathbf{d}_{j}^{s}} + \frac{1-\alpha}{n}$$

Para tratar todos os nós com igual importância inicial, atribui-se $\mathbf{x}_i^{(0)} = \frac{1}{n}$.

2 Vamos agora calcular o PageRank da rede abaixo:

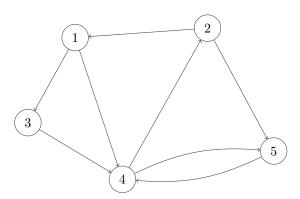


Figura 4: Rede abaixo

Nas tabelas a seguir, temos o valor da centralidade de cada vértice após 5, 10, e 30 iterações, para os valores de α 0.1 e 0.9, respectivamente.

v	5	10	30
1	.189	.189	.189
2	.191	.191	.191
3	.189	.189	.189
4	.228	.228	.228
5	.200	.200	.200

Figura 5: $\alpha = 0.1$

v	5	10	30
1	.103	.104	.104
2	.188	.186	.186
3	.064	.066	.066
4	.371	.371	.370
5	.271	.271	.271

Figura 6: $\alpha = 0.9$

Esta análise permite ver que o algoritmo converge muito rapidamente. Este fato se mostra ainda mais contundente quando se observa que o mais relevante para o resultado é a ordenação hierárquica e não os valores propriamente ditos.

Mesmo assim, acredito que para entender melhor o comportamento do algoritmo ao longo do processo é interessante apresentar os gráficos com a evolução temporal para cada valor de α , na figura a seguir.

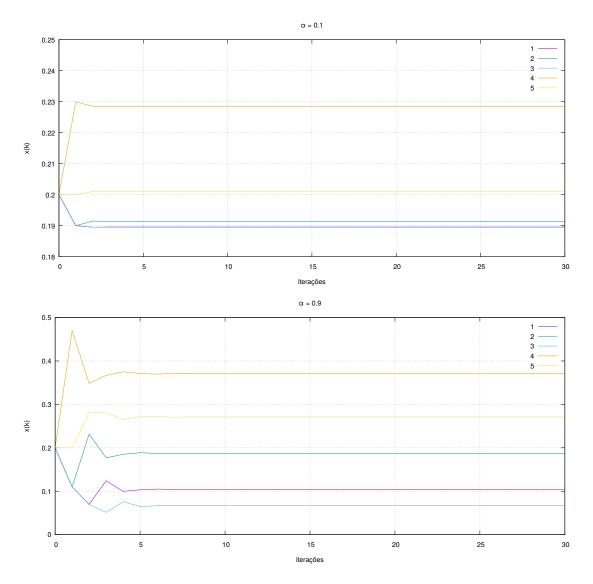


Figura 7: Evolução do PageRank

Questão 7.: Similaridade entre vértices

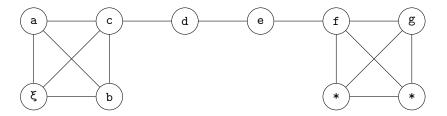


Figura 8: Grafo de Barbell $\mathcal{B}_{4,2}$

1 Recapitulando as definições da similaridade de *Jaccard* $\mathcal{J}(i,j)$ e da similaridade do Cosseno $\mathcal{C}(i,j)$ dizemos que

$$\mathcal{J}(i,j) = \frac{|\operatorname{viz} i \cap \operatorname{viz} j|}{|\operatorname{viz} i \cup \operatorname{viz} j|} \ \ \text{e} \ \ \mathcal{C}(i,j) = \frac{\langle \mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j \rangle}{\|\mathbf{A}_i\| \cdot \|\mathbf{A}_j\|} = \frac{|\operatorname{viz} i \cap \operatorname{viz} j|}{\sqrt{|\operatorname{viz} i| \cdot |\operatorname{viz} j|}}$$

onde viz ξ denota o conjunto dos vértices na vizinhança de ξ e \mathbf{A}_{ξ} é a linha correspondente na matriz de adjacências.

Organizando os resultados em uma tabela:

i, j	$\operatorname{viz} i$	viz j	$\operatorname{viz} i \cap \operatorname{viz} j$	$\operatorname{viz} i \cup \operatorname{viz} j$	$\mathcal{J}(i,j)$	C(i,j)
a, b	$\{b,c,\xi\}$	$\{a,c,\xi\}$	$\{c,\xi\}$	$\{a,b,c,\xi\}$.50	.66
b, c	$\{a,c,\xi\}$	$\{a,b,d,\xi\}$	$\{a,\xi\}$	$\{a,b,c,d,\xi\}$.40	.58
c, d	$\{a,b,d,\xi\}$	$\{c,e\}$	Ø	$\{a,b,c,d,e,\xi\}$	0	0
d, e	$\{c,e\}$	$\{d,f\}$	Ø	$\{c,d,e,f\}$	0	0

- ${f 2}$ Não, muito pelo contrário. Como ambas possuem a interseção das vizinhanças no numerador, vértices cujas conexões são idênticas a menos de isomorfismo não serão contemplados por estas duas métricas. Do ponto de vista da $identidade\ estrutural$, poderíamos afirmar que os vértices d e e são estruturalmente idênticos. Se alguém removesse as etiquetas da Figura 8 e chacoalhasse o grafo um pouco, já seria impossível afirmar com certeza quais vértices estavam marcados por d e e. No entanto, em ambas as métricas este par de vértices foi tratato como plenamente dissemelhante.
- **3** O grafo de *Barbell* foi colorido na figura abaixo de modo que dois vértices possam ter suas identidades trocadas e ainda pertencer a um automorfismo σ caso tenham sido coloridos com a mesma cor.

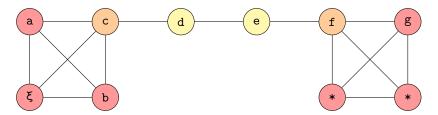


Figura 9: Um mapa para o Automorfismo