Informe Final: Teoría de Grafos y Teoría Espectral de Grafos

Santiago Uribe Pastás
Pontificia Universidad Javeriana Cali
Cali, Colombia
suribe06@javerianacali.edu.co

Noviembre 2020

1. Descripción del tema

En esta sección se detallará en que consiste la teoría de grafos, y la teoría espectral de grafos y se darán algunas definiciones que son importantes para el manejo de estos temas.

1.1. Teoría de Grafos

La teoría de grafos es un área de las matemáticas que se encarga del estudio de ciertas propiedades de estructuras llamadas grafos. Estas estructuras se utilizan para modelar diversos problemas en áreas como Ingeniería, Física y por supuesto Ciencias de la Computación. Un grafo G muestra la interconexión y/o relaciones entre un conjunto de entidades. Cada entidad es representada como un vértice o nodo y la relación entre estas entidades como aristas o arcos.

Definición 1.1.1

Un grafo es un par ordenado $G = (V, E)$ donde V es un conjunto no vacío de vértices, y E es el conjunto de aristas. Cabe resaltar que existen grafos dirigidos y no dirigidos. La diferencia entre estos es que en un grafo dirigido cada arista $e \in E$ asocia dos vértices $u, v \in V$ de forma unidireccional, es decir, es un par ordenado; mientras que en el grafo no dirigido dos vértices $u, v \in V$ están conectados por una arista $e \in E$ de forma no direccional, es decir, un par no ordenado. En el resto del informe se hará referencia a grafos no dirigidos.

Definición 1.1.2

El grado de un vértice $u \in V$ es el número de aristas incidentes al vértice. Se define como $deg(u) = |\{v \in V | \{u, v\} \in E\}|$

1.2. Teoría Espectral de Grafos

la teoría espectral de grafos es el estudio de las propiedades de un grafo en relación con el polinomio característico , los valores propios y los vectores propios de las matrices asociadas con el grafo, como su matriz de adyacencia o la matriz laplaciana [1].

Definición 1.2.1

La matriz de adyacencia A es una matriz cuadrada que se utiliza para representar un grafo finito G. Los elementos de la matriz indican si los pares de vértices son adyacentes o no en G. Las entradas de una matriz de adyacencia $a_{i,j}$, son definidas de la siguiente forma:

$$a_{i.j} = \begin{cases} 1 & si \quad \{i,j\} \in E \\ \\ 0 & si \quad \{i,j\} \notin E \end{cases}$$

Definición 1.2.2

La matriz de grados D es una matriz diagonal cuadrada que contiene información sobre el grado de cada vértice, es decir, el número de aristas adjuntas a cada vértice. Las entradas de una matriz de grados $d_{i,j}$, son definidas de la siguiente forma:

$$d_{i.j} = \begin{cases} deg(i) & si \quad i = j \\ \\ 0 & si \quad i \neq j \end{cases}$$

Definición 1.2.3

La matriz laplaciana es otra representación matricial de un grafo G la cual se define como:

$$L = D - A$$

donde D es la matriz de grados y A es la matriz de adyacencia del grafo G.

En la figura 1 se pueden apreciar las diferentes matrices asociadas a un grafo G que fueron mencionadas anteriormente.

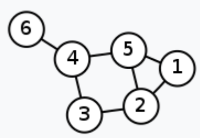
Gráfico etiquetado	Matriz de grados	Matriz de adyacencia	Matriz laplaciana
	$\begin{pmatrix} 2&0&0&0&0&0\\ 0&3&0&0&0&0\\ 0&0&2&0&0&0\\ 0&0&0&3&0&0\\ 0&0&0&0&3&0\\ 0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0&1&0&0&1&0\\ 1&0&1&0&1&0\\ 0&1&0&1&0&0\\ 0&0&1&0&1&1\\ 1&1&0&1&0&0\\ 0&0&0&1&0&0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2&-1&0&0&-1&0\\ -1&3&-1&0&-1&0\\ 0&-1&2&-1&0&0\\ 0&0&-1&3&-1&-1\\ -1&-1&0&-1&3&0\\ 0&0&0&-1&0&1 \end{pmatrix}$

Figura 1: Matrices asociadas a un grafo

Definición 1.2.4

Un escalar λ es un valor propio de una matriz cuadrada A si y solo si hay un vector v distinto de cero, llamado autovector o vector propio , tal que $Av = \lambda v$ o equivalente $(\lambda I_n - A)v = 0$ donde I_n es la matriz identidad de tamaño n.

Definición 1.2.5

El polinomio característico de una matriz A cuadrada nxn es un polinomio de grado n el cual esta dado por la siguiente formula:

$$p_A(\lambda) = det(A - \lambda I_n)$$

Definición 1.2.6

El espectro de una matriz es el multi-conjunto de sus valores propios λ_1, λ_2, ..., λ_n. En grafos estos valores propios son las raíces del polinomio característico de la matriz de adyacencia A y se denominan el espectro del grafo G. El espectro en la teoría espectral de grafos es lo que se conoce como una propiedad de grafo o invariante de grafo.

Esta disciplina utiliza valores propios y vectores propios de matrices asociadas a grafos (como las anteriormente definidas) para revelar propiedades combinatorias de estos grafos. Por ejemplo, el algoritmo *PageRank* de Google hace uso de estas propiedades de los vectores y valores propios para clasificar las paginas web [2].

2. Interés en el tema

Como estudiante de ingeniería de sistemas y ciencias de la computación he logrado darme cuenta que los grafos son una estructura matemática la cual es muy útil para modelar muchos tipos de problemáticas y sistemas, por ende, hacer análisis sobre sus componentes y propiedades puede ser muy provechoso en determinadas situaciones. De igual forma siento gran atracción hacia este tema debido al curso de Arboles y Grafos el cual vi con el profesor Camilo Rocha y por mi opción complementaria con la carrera de matemáticas aplicadas.

3. Problemas asociados al tema

El análisis de sistemas que pueden ser representados con grafos se ha vuelto de gran interés en los últimos años, esto debido a la complejidad que ganan a medida que crecen en tamaño, tanto de nodos como de arcos.

3.1. Modelo de evolución espectral

Este tiene como objetivo caracterizar el crecimiento de grafos (es decir, cómo evolucionan a medida que se establecen nuevos arcos) en términos de la descomposición del valor propio de las matrices de adyacencia. Asume que, mientras los vectores propios permanecen constantes, los valores propios evolucionan de manera predecible a lo largo del tiempo. [3]

Cualquier matriz real cuadrada A puede caracterizarse por su descomposición espectral, es decir, un conjunto de pares de valores propios y vectores propios $(X, \Lambda) = \{(x_1, \lambda_1), ..., (x_n, \lambda_n)\}$ tal que, la ecuación $Ax_i = \lambda_i x_i$ se cumple para cada $i \in [1, n]$ [4]. Cabe resaltar que esta *descomposición espectral* cumple que $A = X\Lambda X^{-1}$ donde X es una matriz cuadrada n×n cuya i-esima columna es el vector propio x_i de A y Λ es la matriz diagonal cuyos elementos diagonales son los valores propios correspondientes $\Lambda_{i,i} = \lambda_i$ (Teorema de la descomposición propia) [5].

Por lo anterior, la evolución de un grafo G con $|V| = n$ puede ser representada por una secuencia $A_1, ..., A_t$ de matrices simétricas n×n o por una secuencia de sus descomposiciones espectrales $(X_1, \Lambda_1), ..., (X_n, \Lambda_n)$ [6].

4. ¿Quienes se beneficiarían de la solución a dichos problemas?

Como se mencionó en la sección 1.1 los grafos representan la interconexión y/o relaciones entre un conjunto de entidades, por esto, cualquier sistema que pueda modelarse con esta estructura matemática sera beneficiario del respectivo análisis del modelo de evolución espectral. Por ejemplo, se pueden hacer análisis sobre redes sociales para determinar polarización, análisis sobre redes biológicas (como es el caso de OMICAS), etc.

5. Director de tesis

A la fecha aun no tengo un director de tesis escogido, sin embargo, mi director posible podría ser Camilo Rocha, Jorge Finke o Luis Eduardo Tobón que son los profesores que manejan los temas presentados en este informe.

Referencias

[1] "Spectral graph theory", es.qaz.wiki. [Online]. Available: https://es.qaz.wiki/wiki/Spectral_graph_theory.

[2] R. Tanase and R. Radu, "PageRank Algorithm - The Mathematics of Google Search", Pi.math.cornell.edu. [Online]. Available: http://pi.math.cornell.edu/~mec/Winter2009/RalucaRemus/Lecture3/lecture3.html.

[3] Kunegis, Jérôme and Fay, Damien and Bauckhage, Christian. (2013). Spectral evolution in dynamic networks. Knowledge and Information Systems. 37. 1-36.

[4] M. Romero, J. Finke, C. Rocha, and L. Tobón, "Spectral evolution with approximated eigenvalue trajectories for link prediction," Social Network Analysis and Mining, vol. 10, iss. 60, p. 1–10, 2020.

[5] Weisstein, Eric W. "Eigen Decomposition Theorem.", mathworld.wolfram.com. [Online]. Available: https://mathworld.wolfram.com/EigenDecompositionTheorem.html

[6] M. Romero, J. Finke, C. Rocha, and L. Tobón, "Spectral evolution with approximated eigenvalue trajectories for link prediction," Social Network Analysis and Mining, vol. 10, iss. 60, p. 1–10, 2020.