

ENERGÍA EN MODELOS PREFERENCIALES

ABSTRACT. En este escrito se presentan las observaciones empíricas que se realizaron a lo largo del verano sobre la energía de gráficas del modelo de Albert-Barabási.

1. PRELIMINARES

1.1. **Gráficas y matrices.** En este escrito trabajaremos con gráficas finitas, simples y no dirigidas. Llamaremos *gráfica* a un par $G = (V(G), E(G))$ de conjuntos que satisfacen $E(G) \subseteq [V(G)]^2$. Al conjunto $V := V(G)$ se le llama conjunto de vértices y al conjunto $E := E(G)$ conjunto de aristas. Decimos que una gráfica es simple si no tiene aristas de la forma (v, v) y que es no dirigida si $(u, v) \in E$ implica que $(v, u) \in E$.

Al número de vértices de una gráfica G se le conoce como el *orden* de G , denotado por $|G|$; al número de aristas de G se le denota por $\|G\|$ y se lo conoce como el *tamaño* de G .

Se dice que dos vértices u, v son *adyacentes*, o *vecinos*, si $(u, v) \in E$; en caso de que esto ocurra, escribimos $u \sim v$. El *grado* de un vértice v es el número de vértices adyacentes a v en V , al cual denotamos por $d(v)$. Denotamos por δ al mínimo grado en G y por Δ al máximo.

Un camino P de longitud k en G es una serie de vértices v_0, v_1, \dots, v_k tal que $v_i \sim v_{i+1}$ para toda $i \in \{0, 1, \dots, k-1\}$. Decimos en este caso que v_0 y v_k son conectados por P y les llamamos *extremos*. Diremos que un camino P es simple si todos sus vértices son diferentes. Si v_0, v_1, \dots, v_{k-1} es un camino simple, decimos que $C = v_0, v_1, \dots, v_{k-1}, v_0$ es un *ciclo*.

Una gráfica es *conexa* si cualesquiera dos vértices de ella son extremos de algún camino. Decimos que una gráfica T es un árbol si T es conexa y no contiene ciclos.

Dadas dos gráficas G y H , decimos que H es una subgráfica de G si $V(H) \subseteq V(G)$ y $E(H) \subseteq E(G)$. Decimos que una gráfica G es bipartita si existen $V_1, V_2 \subset V(G)$ no vacíos que satisfacen dos condiciones:

- (i) $V = V_1 \cup V_2$ y $V_1 \cap V_2 = \emptyset$
- (ii) Cada arista de $E(G)$ conecta a un vértice de V_1 con uno de V_2 .

Dada una gráfica G de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, definimos su matriz de adyacencia $A = A(G)$ como una matriz cuadrada de orden $n = |G|$ donde

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } v_i \sim v_j, \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Definimos los valores propios de la gráfica G como los valores propios de la matriz $A(G)$. Dado que trabajamos con gráficas no dirigidas, $A(G)$ es autoadjunta, por lo tanto si $|G| = n$, $A(G)$ es diagonalizable y tiene n valores propios reales que podemos denotar por $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Al conjunto de los valores propios de G le llamamos el *espectro* de G .

1.2. Energía de una gráfica. La *energía de una gráfica* es una invariante que se obtiene a partir de los valores propios de la matriz de adyacencia de la gráfica. La energía de una gráfica G , denotada por $\mathcal{E}(G)$, se define como la suma de los valores absolutos de sus valores propios, i.e.,

$$\mathcal{E}(G) := \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$$

donde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ son las n raíces del polinomio $\det(xI_n - A(G))$.

Dada una matriz M , si denotamos por $Tr(M)$ a su traza y a su valor absoluto $(MM^*)^{1/2}$ por $|M|$, entonces la energía de una gráfica G está dada por

$$\mathcal{E}(G) = Tr(|A(G)|) = \sum_{i=1}^n |A(G)|_{ii}$$

1.3. Energía de un vértice. Con base en lo anterior, los autores de [4], definieron la energía de un vértice v_i con respecto a G , denotada $\mathcal{E}_G(v_i)$ como

$$\mathcal{E}_G(v_i) = |A(G)|_{ii}, \quad \text{para } i \in \{1, \dots, n\}.$$

De manera que podemos expresar la energía de una gráfica como la suma de las energías de todos sus vértices,

$$\mathcal{E}(G) = \mathcal{E}_G(v_1) + \dots + \mathcal{E}_G(v_n)$$

esto nos permite interpretar la energía de un vértice como la contribución que tiene ese vértice a la energía de la gráfica, en términos de su relación con el resto de los vértices de la gráfica.

1.4. Gráficas hiperenergéticas e hipoenergéticas. Decimos que una gráfica G de n vértices es hiperenergética si $\mathcal{E}(G) > 2n - 2$. Esto se debe a la inicial conjetura de que la gráfica completa K_n era la gráfica de n vértices con la mayor energía, cuya falsedad se comprobó rápidamente.

Por otro lado, llamaremos a gráficas G con poca energía hipoenergéticas. Diremos entonces que una gráfica G es hipoenergética si $\mathcal{E}(G) < n$.

1.5. **Algunas cotas para la energía.** En este escrito haremos uso de tres resultados que se demuestran en [3] y [1].

Teorema 1.1 Para una gráfica G con vértices v_1, \dots, v_n de grados d_1, \dots, d_n tenemos

$$\mathcal{E}(G) \leq \sum_{i=1}^n \sqrt{d_i} \leq \sqrt{2mn}$$

Teorema 1.2 Para una gráfica G y un vértice $v \in G$ de grado d

$$\mathcal{E}_G(v) \leq \sqrt{d}$$

La igualdad se da si y solo si la componente conexa que contiene a v es isomorfa a una estrella S_m para algún $m \in \mathbb{N}$ con v en su centro.

Teorema 1.3 Si G es un árbol y v_1, \dots, v_m es una cubierta de G con grados d_1, \dots, d_m , se tiene que

$$\mathcal{E}(G) \leq 2 \sum_{i=1}^m \mathcal{E}_G(v_i)$$

Corolario 1.4 Si G es un árbol y v_1, \dots, v_m es una cubierta de G con grados d_1, \dots, d_m

$$\mathcal{E}(G) \leq 2 \sum_{i=1}^m \mathcal{E}_G(v_i) \leq 2 \sum_{i=1}^m \sqrt{d_i}$$

2. ALBERT-BARABÁSI

Numerosos sistemas naturales y creados por el hombre, incluyendo el Internet, la World Wide Web y las redes de citas en documentos, entre otros, se creen aproximadamente libres de escala (su distribución de grados sigue una ley potencial $P(k) \sim k^{-\gamma}$) y contienen una pequeña cantidad de nodos con un grado mucho mayor al del resto. Debido a esto, entre los diversos modelos de redes que se tienen en la actualidad, los de conexión preferencial resultan muy importantes en la actualidad.

2.1. **El modelo de Albert-Barabási.** Existen diversas variaciones de este modelo, pero nosotros solamente trabajaremos con la siguiente.

Comenzamos con dos nodos unidos por un arista a los que llamaremos v_1 y v_2 . En cada paso, se le agrega un nuevo nodo a la red, al que llamamos v_n si anteriormente se tenían exactamente $n - 1$ nodos. Este nodo se une con exactamente uno de los nodos que tenía anteriormente la red mediante un experimento aleatorio. Si p_i denota a la probabilidad de que v_n se una al nodo v_i en este paso, se tiene que p_i está dada por

$$p_i = \frac{(d(v_i))^\alpha}{\sum_{i=1}^{n-1} d(v_i)^\alpha} \quad \text{donde } \alpha > 0.$$

Al definir una gráfica de esta manera, tenemos un modelo de conexión preferencial debido a que en cada paso, los vértices de mayor grado son los más propensos a aumentar dicho grado con el tiempo.

Nos interesa estudiar la energía de gráficas que resultan de seguir este modelo de gráficas aleatorias para diferentes valores de α , enfocándonos especialmente en distinguir en qué casos las gráficas tienden a ser hipoenergéticas, es decir que $\mathcal{E}(G) < |G|$ para valores grandes de $|G|$.

2.2. Simulaciones. Conforme el valor del parámetro α cambia, la influencia que tiene el grado de un vértice en la probabilidad de que el grado del mismo aumente cambia, teniendo este mayor influencia al aumentar α y menor al disminuir. Asimismo, mayores valores de α hacen que la distinción de los vértices de grados mucho mayores al resto resulte acentuada.

Debido a que entre los árboles de tamaño constante, la estrella es la que tiene la menor energía, conforme crece el valor de α , esperamos que para algún α suficientemente grande, las gráficas creadas con este modelo tiendan a ser hipoenergéticas. Motivados por esto, buscamos conocer a partir de qué valor de α esto comienza a ocurrir.

A continuación, se muestran las razones entre la energía y el número de vértices de gráficas de este modelo, obtenidas al realizar simulaciones para distintos valores de α . Aquí, que este cociente sea menor a 1 nos indica que la gráfica obtenida es hipoenergética.

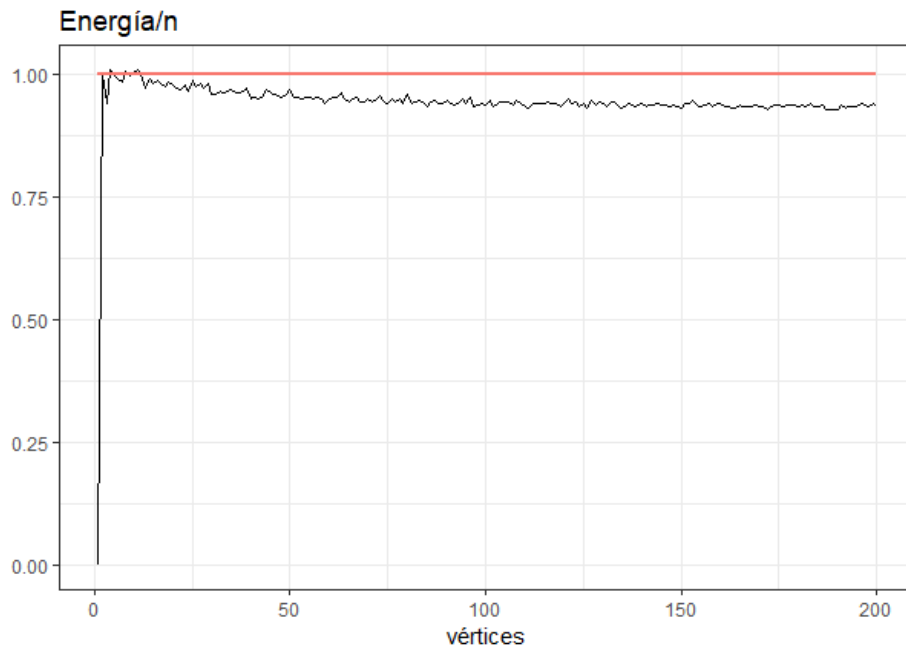
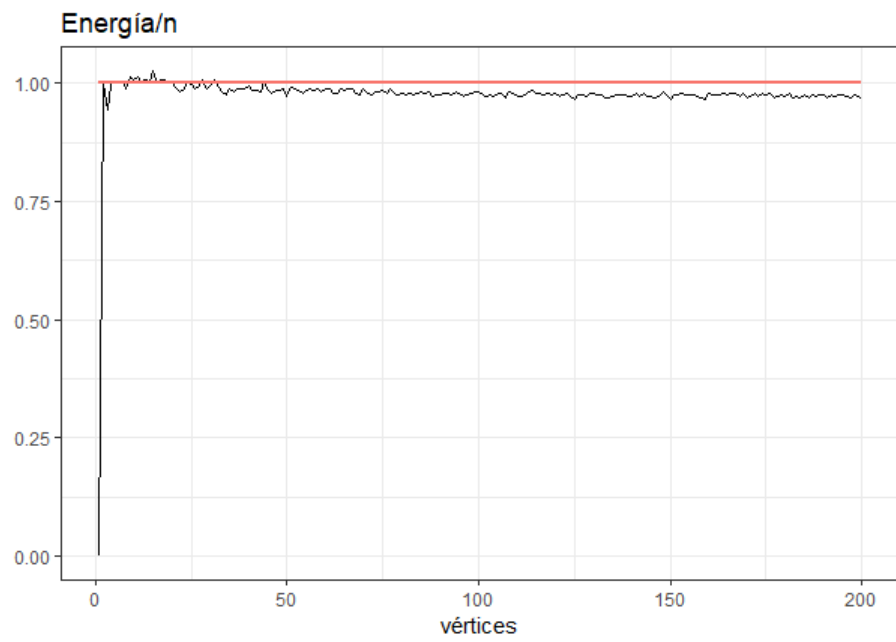
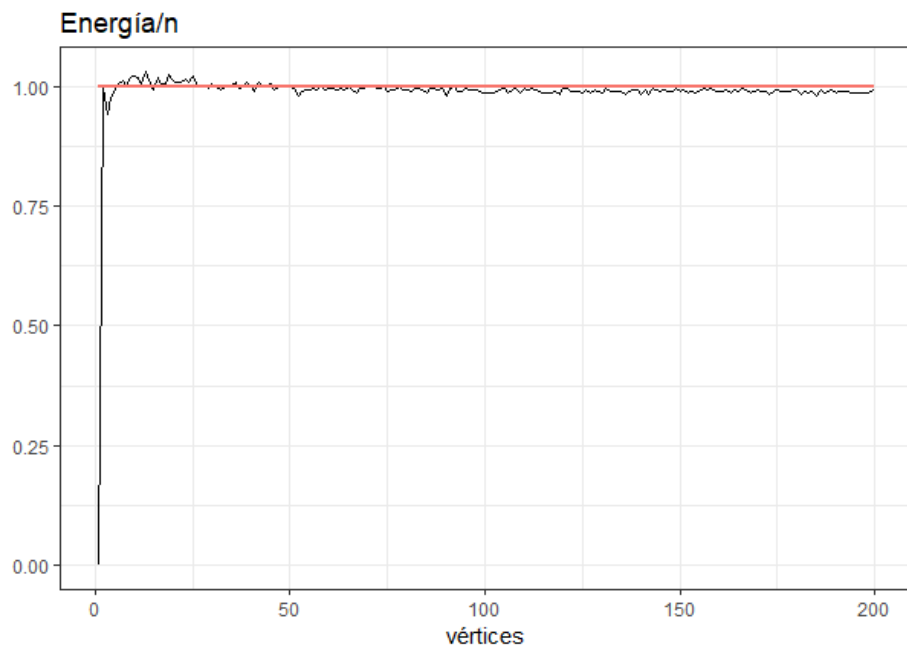
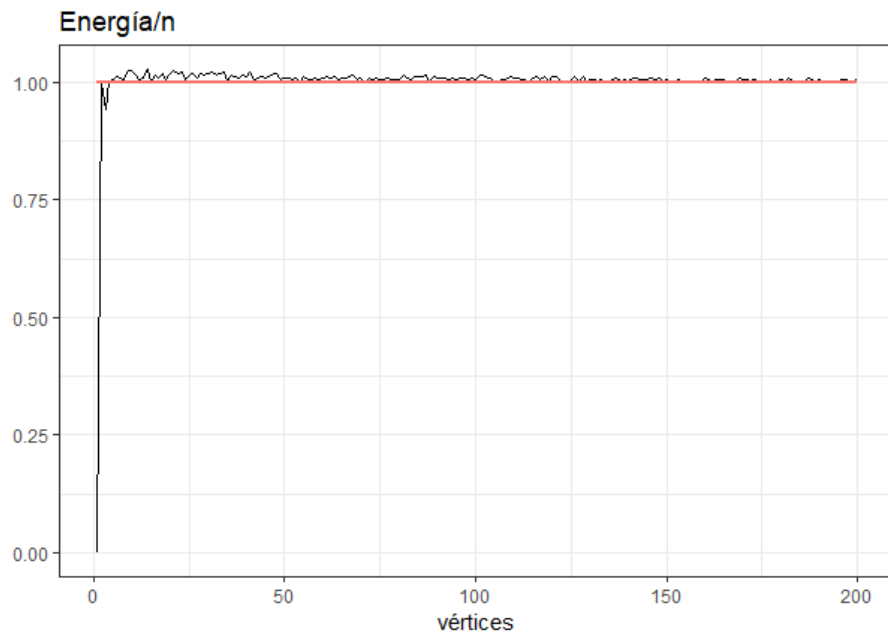
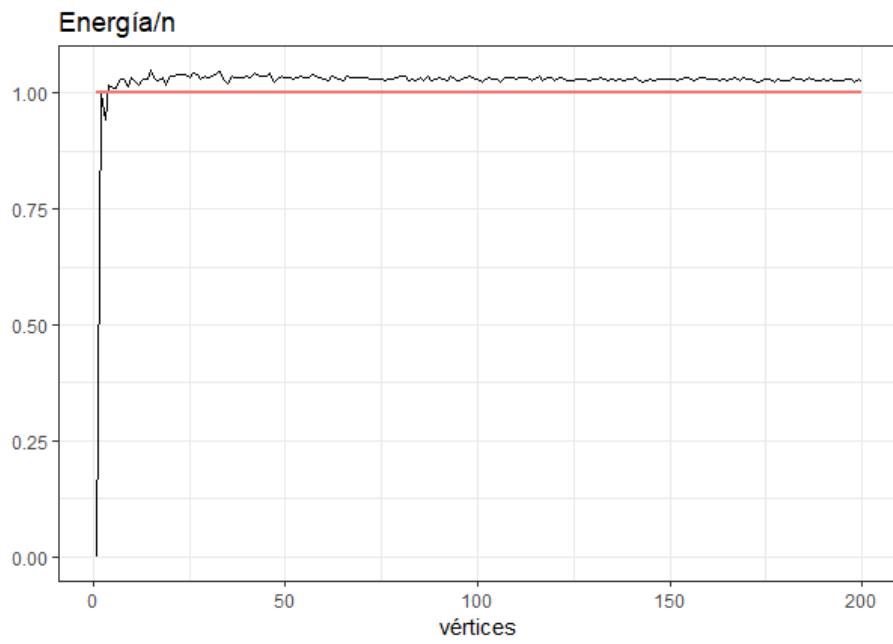


FIGURE 1. $\alpha = 1$

FIGURE 2. $\alpha = 0.9$ FIGURE 3. $\alpha = 0.85$

FIGURE 4. $\alpha = 0.8$ FIGURE 5. $\alpha = 0.7$

Esto parece indicar que para un α cercano a 0.8 las gráficas comienzan a ser hipoenergéticas.

2.3. Una cota en el límite. Como se probó en [2], si llamamos $N(d)$ a la cantidad de vértices de grado d en una gráfica G de n vértices que sigue el modelo de Albert-Barabasi con parámetro $\alpha = 1$. Sea

$$\alpha_d = \frac{4}{(d)(d+1)(d+2)}$$

para $\epsilon > 0$. Con probabilidad tendiendo a 1 cuando $n \rightarrow \infty$ tenemos

$$(1 - \epsilon)\alpha_d \leq \frac{N(d)}{n} \leq (1 + \epsilon)\alpha_d$$

para cada d en el rango $0 \leq d \leq n^{1/15}$.

Sabiendo esto y usando que para $m \in \mathbb{N}$

$$\sum_{d=1}^m \frac{4}{(d)(d+1)(d+2)} = 2 \sum_{d=1}^m \left(\frac{1}{d} + \frac{1}{d+2} - \frac{2}{d+1} \right) = 1 - \frac{2}{(m+2)}$$

Si llamamos S a la suma de las raíces de los grados y usando la proposición anterior

$$\begin{aligned} \frac{S}{n} &= \sum_{d=1}^n \frac{N(d)}{n} * \sqrt{d} = \sum_{d=1}^{n^{1/15}} \frac{4\sqrt{d}}{(d)(d+1)(d+2)} + \sum_{d=n^{1/15}+1}^n \frac{N(d)}{n} * \sqrt{d} \\ &\leq \sum_{d=1}^{n^{1/15}} \frac{4}{(\sqrt{d})(d+1)(d+2)} + \frac{2\sqrt{n}}{n(n^{1/15}+2)} \\ &= \sum_{d=1}^{n^{1/15}} \frac{4}{(\sqrt{d})(d+1)(d+2)} + o\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \end{aligned}$$

que cuando $n \rightarrow \infty$ se aproxima con probabilidad 1 a

$$\sum_{d=1}^{\infty} \frac{4}{(\sqrt{d})(d+1)(d+2)} \approx 1.28138$$

Al tomar la cubierta de la gráfica G que consta de todos los vértices de grado al menos 2, tenemos que la suma de las raíces de sus grados S' se aproxima a

$$\sum_{d=2}^{\infty} \frac{4n}{(\sqrt{d})(d+1)(d+2)} \approx 0.61471n$$

Debido a esto y al hecho de que la energía de una cubierta es al menos la mitad de la energía total de la gráfica, podemos concluir que cuando $n \rightarrow \infty$

$$E(G) \leq 2S' \approx 1.22942n$$

Para reducir la cota que nos da la cubierta, nos fijaremos en los caminos maximales $\{x_0, x_1, \dots, x_{n+1}\}$ tales que $\deg(x_i) = 2$ para cada $1 \leq i \leq n$ y $\deg(x_0) \leq \deg(x_{n+1})$. Para cada uno de estos caminos pasa una de tres cosas:

Caso 1: $\deg(x_0) = 1, n = 1$

Podemos agregar x_1 a la cubierta y quitar x_2 . Al hacerlo, la suma de las

raíces de los grados disminuye en $(\sqrt{2} - 1)$

Caso 2: $\deg(x_0) > 1, n = 1$

Podemos quitar x_2 de la cubierta. Al hacerlo, la suma de las raíces de los grados de los vértices se reduce en $\sqrt{2}$

Caso 3: $n > 1$

Podemos quitar los vértices x_{2k+1} para $1 < 2k + 1 < n$ de la cubierta, removiendo así $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ de los vértices y reduciendo así la suma de las raíces de los grados en $\sqrt{2} \lfloor \frac{n}{2} \rfloor \geq n(\sqrt{2} - 1)$ para $n > 1$.

En cada uno de estos casos, la suma de las raíces de los grados en la cubierta disminuye en al menos $\sqrt{2} - 1$ por cada uno de los vértices de grado 2 que hay en el camino. Debido a esto, al realizar estos cambios para cada uno de los caminos en la cubierta anterior reducimos la suma de las raíces de los grados de la cubierta en al menos $\sqrt{2} - 1$ por cada vértice de grado 2. Dado que la proporción de estos tiende a $\frac{4}{(2)(3)(4)} = \frac{1}{6}$, si denotamos por S'' a la suma de las raíces de los vértices de la nueva cubierta, obtenemos la cota

$$E(G) \leq 2S'' \leq 2S' - \frac{(\sqrt{2} - 1)n}{6} \approx 2 \left((0.61471n) - \frac{(\sqrt{2} - 1)n}{6} \right) \approx 1.09135n$$

REFERENCES

- [1] O. Arizmendi B., Luna and Ramírez M. Coulson integral formula for the vertex energy of a graph. 2018.
- [2] Bela Bollobas, Oliver Riordan, Joel Spencer, and Gabor Tusnady. The degree sequence of a scale-free random graph process. 18:279–280., 2001.
- [3] O. Arizmendi J., Fernandez and Juarez Romero O. Energy of a vertex . linear algebra and its applications volume 557, 15 november 2018, pages 464-495.
- [4] Arizmendi O. and Juarez Romero O. On bounds for the energy of graphs and digraphs. contributions of mexican mathematicians abroad in pure and applied mathematics, contemp. math. to appear.