Teoria Espectral de Grafos e Aplicações

Leonardo Lima

Departamento de Engenharia de Produção
Programa de Pós-Graduação em Tecnologia (CEFET/RJ)

Outubro 2015

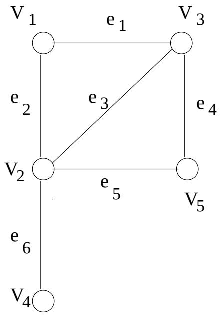
Definição 1.1

Um grafo é uma estrutura $G = G(V, E)$ *onde* $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ *é um conjunto finito e não vazio, cujos elementos são denominados vértices e* $E = \{\{v_i, v_j\}, \;\; v_i, v_j \in V\}$ *é um conjunto de subconjuntos a dois elementos de* V *denominados arestas.*

Definição 1.2

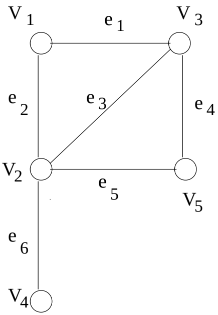
Se $e = \{u, v\} \in E$*, dizemos que a aresta* e *incide nos vértices* u *e* v*, e também que os vértices* u *e* v *são adjacentes. O grau do vértice* v*, denotado por* $d(v)$*, é número de arestas que incidem em* v*.*

Grafo G



$$
\begin{aligned}
V &= \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\},\\
E &= \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\},\\
d(v_1) &= 2, d(v_2) = 4,\\
d(v_3) &= 3, d(v_4) = 1, d(v_5) = 2
\end{aligned} \tag{1.1}
$$

Grafo G



$$\begin{aligned} V &= \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}, \\ E &= \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\}, \\ d(v_1) &= 2, d(v_2) = 4, \\ d(v_3) &= 3, d(v_4) = 1, d(v_5) = 2 \end{aligned} \tag{1.1}$$

Matriz de adjacência de um grafo

Definição 2.1

Seja $G = G(V, E)$ um grafo com n vértices. **A matriz de adjacência** *$A(G)$ de G é a matriz quadrada de ordem n cujas entradas são*

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & se\ \{v_i, v_j\} \in E \text{ para } v_i,\ v_j \in V; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

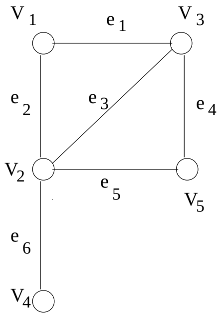
Matriz de adjacência de um grafo

Definição 2.1

Seja $G = G(V, E)$ um grafo com n vértices. A **matriz de adjacência** $A(G)$ *de G é a matriz quadrada de ordem n cujas entradas são*

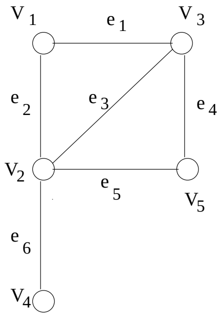
$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & se\ \{v_i, v_j\} \in E \text{ para } v_i,\ v_j \in\ V; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

Grafo G



$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Grafo G



$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- $A(G)$ é sempre uma matriz real e simétrica, formada por **1's** e **O's**. Todos os seus autovalores são reais;
- Como o traço de $A(G)$ é zero então seus autovalores somam zero;
- A soma das entradas de cada linha de $A(G)$ é igual ao grau do vértice correspondente.

Autovalor e Autovetor

Considere os seguintes elementos: $v \in R^n$ and $v \neq 0$ and $\lambda \in R$. Seja A uma matrix tal que

$$Av = \lambda v$$

.
Então, v é chamado de autovetor e λ de autovalor associado a matrix A.

Definição 2.2

O polinômio característico

$$p_G(\lambda) = \det(\lambda I - A(G))$$

de $A(G)$ *é denominado* **polinômio característico de** G *;*
λ *é dito um* **autovalor do grafo** G *quando* λ *é uma raiz de* $p_G(\lambda)$*.*
Se $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_s$ *são os autovalores distintos do grafo* G *com multiplicidades* $m(\lambda_1), m(\lambda_2), \cdots, m(\lambda_s)$ *escrevemos*

$$spect(G) = \left[\begin{array}{cccc} \lambda_1^{(m(\lambda_1))} & \lambda_2^{(m(\lambda_2))} & \ldots & \lambda_s^{(m(\lambda_s))} \end{array} \right].$$

Definição 2.2

O polinômio característico

$$p_G(\lambda) = \det(\lambda I - A(G))$$

de $A(G)$ *é denominado* **polinômio característico de** G *;*
λ *é dito um* **autovalor do grafo** G *quando* λ *é uma raiz de* $p_G(\lambda)$.
Se $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_s$ *são os autovalores distintos do grafo* G *com multiplicidades* $m(\lambda_1), m(\lambda_2), \cdots, m(\lambda_s)$ *escrevemos*

$$spect(G) = \begin{bmatrix} \lambda_1^{(m(\lambda_1))} & \lambda_2^{(m(\lambda_2))} & \dots & \lambda_s^{(m(\lambda_s))} \end{bmatrix}.$$

Definição 2.2

O polinômio característico

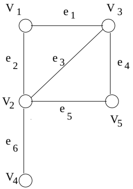
$$p_G(\lambda) = \det(\lambda I - A(G))$$

de $A(G)$ *é denominado* **polinômio característico de** G *;*
λ *é dito um* **autovalor do grafo** G *quando* λ *é uma raiz de* $p_G(\lambda)$*.*
Se $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_s$ *são os autovalores distintos do grafo* G *com multiplicidades* $m(\lambda_1), m(\lambda_2), \cdots, m(\lambda_s)$ *escrevemos*

$$spect(G) = \begin{bmatrix} \lambda_1^{(m(\lambda_1))} & \lambda_2^{(m(\lambda_2))} & \ldots & \lambda_s^{(m(\lambda_s))} \end{bmatrix}.$$

Exemplo

Grafo G



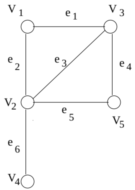
$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$p_G(\lambda) = \lambda^5 - 6\lambda^3 - 4\lambda^2 + 2\lambda$$

$$spect(G) = \left[\ 2.68554^{(1)} \quad 0.33490^{(1)} \quad 0^{(1)} \quad -1.27133^{(1)} \quad -1.74912^{(1)} \ \right]$$

Exemplo

Grafo G



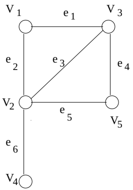
$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$p_G(\lambda) = \lambda^5 - 6\lambda^3 - 4\lambda^2 + 2\lambda$$

$$spect(G) = \left[\begin{array}{ccccc} 2.68554^{(1)} & 0.33490^{(1)} & 0^{(1)} & -1.27133^{(1)} & -1.74912^{(1)} \end{array}\right]$$

Exemplo

Grafo G



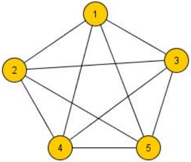
$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$p_G(\lambda) = \lambda^5 - 6\lambda^3 - 4\lambda^2 + 2\lambda$$

$$spect(G) = \begin{bmatrix} 2.68554^{(1)} & 0.33490^{(1)} & 0^{(1)} & -1.27133^{(1)} & -1.74912^{(1)} \end{bmatrix}$$

Definição 3.1

É o grafo no qual quaisquer dois vértices distintos são adjacentes. Notação: K_n *indica o grafo completo com* n *vértices.*



Exemplo 3.1

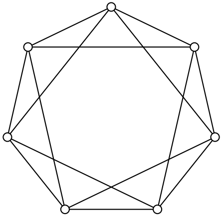
Matriz de adjacência do K_5:

$$A(K_5) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$spect(K_5) = \begin{bmatrix} 4^{(1)} & -1^{(4)} \end{bmatrix}$$

Definição 3.2

G é **grafo regular de grau** *k ou k-***regular** *quando todos os vértices de G têm o mesmo grau k.*



Um grafo 4-regular.

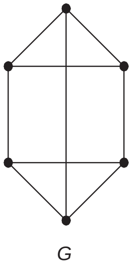
Propriedades espectrais dos grafos regulares

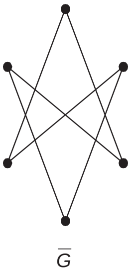
$$A(G)\mathbf{1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 4 \\ 4 \\ 4 \\ 4 \\ 4 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$= 4.\mathbf{1}$$

Definição 3.3

O **grafo complementar** *de um grafo* $G = G(V, E)$ *é o grafo* $\overline{G} = \overline{G}(\overline{V}, \overline{E})$*, onde* $\overline{V} = V$ *e* $\{v_i, v_j\} \in \overline{E}$ *quando* $\{v_i, v_j\} \notin E$*.*

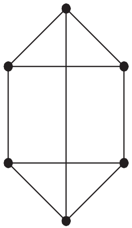




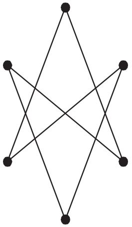
Um grafo e seu complementar.

Definição 3.3

O **grafo complementar** *de um grafo* $G = G(V, E)$ *é o grafo* $\overline{G} = \overline{G}(\overline{V}, \overline{E})$, *onde* $\overline{V} = V$ *e* $\{v_i, v_j\} \in \overline{E}$ *quando* $\{v_i, v_j\} \notin E$.



G



$\overline{G}$

Um grafo e seu complementar.

Espectro do complementar de um grafo k-regular

Proposição 3.1

Seja G um grafo k-regular com n vértices. Se

$$k,\ \lambda_2,\ \lambda_3,\ \cdots,\ \lambda_n$$

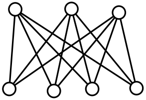
são os autovalores de G então

$$n-1-k,\ -1-\lambda_2,\ -1-\lambda_3,\ \cdots,\ -1-\lambda_n$$

são os autovalores de $\overline{G}$. Além disso, G e $\overline{G}$ possuem os mesmos autovetores.

Grafo bipartido

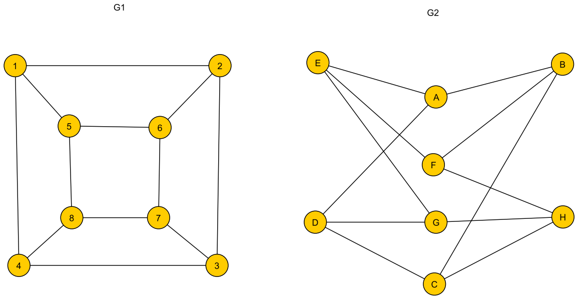
$G = G(V, E)$ é um **grafo bipartido** quando existe uma partição do seu conjunto de vértices em 2 subconjuntos não vazios e disjuntos dois a dois (isto é, $V = Y_1 \cup Y_2$, com $Y_1 \cap Y_2 = \emptyset$), de modo que as arestas de G sejam sempre da forma $\{p, q\}$, para p em Y_1 e q em Y_2. Assim, não há vértices adjacentes em um mesmo subconjunto da partição.



O grafo $K_{3,4}$.

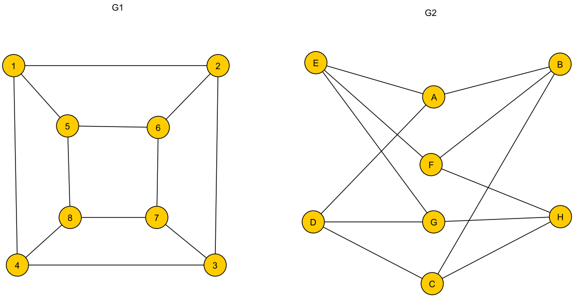
Definição 4.1

G_1 *e* G_2 *são ditos* **grafos isomorfos** *quando existe uma correspondência biunívoca entre seus conjuntos de vértices de modo que as relações de adjacência sejam preservadas.*



A correspondência biunívoca é:

$$f(1) = a,\ f(2) = b,\ f(3) = c,\ f(4) = d,\ f(5) = e,\ f(6) = f, f(7) = g, f(8) = h$$



Polinômio característico: $p_{G_1}(\lambda) = x^8 - 12x^6 + 30x^4 - 28x^2 + 9$
Espectro: $[-3, -1^{(3)}, 1^{(3)}, 3]$

Veja que dois grafos isomorfos têm:

- mesmo número de vértices e arestas;
- mesma sequência de graus;
- mesmo número de ciclos de um dado tamanho;
- mesmo número cromático;
- mesmo tamanho de clique maximal;
- mesmo conjunto independente;
- mesmo espectro;
- outros.

Definição 4.2

G_1 e G_2 são ditos **grafos co-espectrais** *quando têm os mesmos autovalores com as mesmas multiplicidades, isto é, quando* $spect(G_1) = spect(G_2)$ *.*

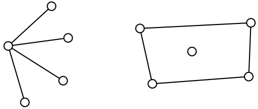
Se dois grafos são isomorfos eles têm o mesmo espectro. A recíproca dessa afirmação **não** é verdadeira em geral, como ilustram os exemplos a seguir:

Definição 4.2

G_1 e G_2 são ditos **grafos co-espectrais** *quando têm os mesmos autovalores com as mesmas multiplicidades, isto é, quando $spect(G_1) = spect(G_2)$.*

Se dois grafos são isomorfos eles têm o mesmo espectro. A recíproca dessa afirmação **não** é verdadeira em geral, como ilustram os exemplos a seguir:

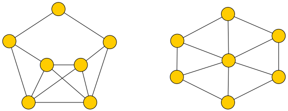
Os dois grafos abaixo têm o mesmo polinômio característico, a saber, $p_G(\lambda) = \lambda^5 - 4\lambda^3$, mas o grafo da direita tem um ciclo de comprimento 4 e o outro não tem ciclos.



Grafos co-espectrais com diferentes números de ciclos.

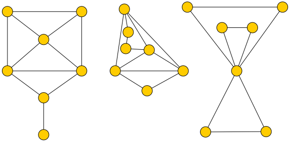
Os dois grafos abaixo têm o mesmo polinômio característico:

$$p_G(\lambda) = (\lambda + 2)(\lambda + 1)^2(\lambda - 1)^2(\lambda^2 - 2\lambda - 6)$$

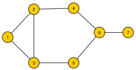


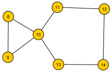
Grafos co-espectrais não isomorfos.

Espectro:$[-2, -1^{(2)}, 1^{(2)}, 1 \pm \sqrt{7}]$
OBS: Não existem grafos conexos co-espectrais com 5 *vértices ou menos.*



Menor tripla de grafos coespectrais não isomorfos.





Menor dupla de grafos coespectrais com grafos complementares coespectrais.

Importância

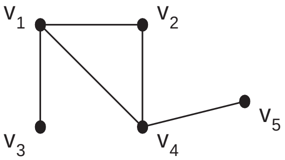
A matriz laplaciana de um grafo e, em especial, o maior e o segundo menor autovalores dela, desempenham papel relevante em diversas aplicações.

Definição 5.1

Seja D *a* **matriz diagonal dos graus** *dos vértices de um grafo* G *(ou seja, a matriz* D *tal que* $D_{ii} = d(v_i)$*) e seja* A *a matriz de adjacência de* G*. A matriz*

$$L = D - A$$

é chamada **matriz laplaciana** *ou* **laplaciano** *do grafo* G*.*


v1
v2
v3
v4
v5

$$D = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Logo,

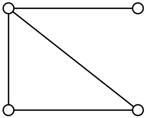
$$L = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

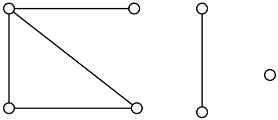
Definição 5.2

O **espectro do laplaciano** *de G, denotado por $\zeta(G)$, é a matriz-linha cujos elementos são todos os autovalores de L ordenados em ordem não-crescente.*
Assim, se $\mu_1 \geq \ldots \geq \mu_n$ são os autovalores de L então

$$\zeta(G) = (\mu_1 \ , \ \ldots, \mu_n).$$

Exemplo





Então temos $\zeta(G_1) = (4, 3, 1, 0) \quad$ e $\quad \zeta(G_2) = (4, 3, 2, 1, 0, 0, 0)$.

Definição 5.3

O penúltimo autovalor do laplaciano de G, μ_{n-1}, é chamado **conectividade algébrica** *do grafo G e será denotado de agora em diante por $a(G)$.*

O maior autovalor do laplaciano de G, μ_1, é chamado **índice do laplaciano** *do grafo G.*

Definição 5.3

O penúltimo autovalor do laplaciano de G, μ_{n-1}, *é chamado* **conectividade algébrica** *do grafo* G *e será denotado de agora em diante por* $a(G)$.
O maior autovalor do laplaciano de G, μ_1, *é chamado* **índice do laplaciano** *do grafo* G.

A conectividade algébrica desempenha um papel fundamental no estudo de vulnerabilidade de redes. Fiedler (1973) mostrou que $a(G) = 0$ se e somente se G é desconexo.
Além disso, o autovetor associado a $a(G)$ é conhecido como autovetor de Fiedler e está associado a problemas práticos como o de clusterização em grafos.

Definição 5.4

A **conectividade de vértices** *de um grafo, denotada por $k(G)$, é o menor número de vértices que, ao serem retirados, tornam o grafo desconexo ou o grafo trivial.*

Definição 5.5

A **conectividade de arestas**, *denotada por $k'(G)$, é o menor número de arestas que, ao serem retiradas, tornam o grafo desconexo .*

Definição 5.4

A **conectividade de vértices** *de um grafo, denotada por $k(G)$, é o menor número de vértices que, ao serem retirados, tornam o grafo desconexo ou o grafo trivial.*

Definição 5.5

A **conectividade de arestas**, *denotada por $k'(G)$, é o menor número de arestas que, ao serem retiradas, tornam o grafo desconexo .*

A conectividade algébrica e as conectividades de vértices e de arestas estão relacionadas de acordo com o resultado abaixo, provado por Fiedler:

Proposição 5.1

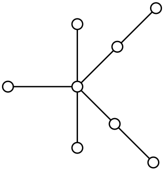
Se G não é um grafo completo então $a(G) \leq k(G) \leq k'(G)$.

Como a conectividade de arestas é menor ou igual ao grau mínimo de um grafo, podemos reescrever a proposição anterior acrescentando uma desigualdade

$$a(G) \leq k(G) \leq k'(G) \leq \delta(G).$$

Como a conectividade de arestas é menor ou igual ao grau mínimo de um grafo, podemos reescrever a proposição anterior acrescentando uma desigualdade

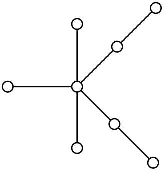
$$a(G) \leq k(G) \leq k'(G) \leq \delta(G).$$



Exemplo 5.1

Este grafo tem conectividade algébrica $a = 0,3820$ *e* $k = k' = \delta = 1$.

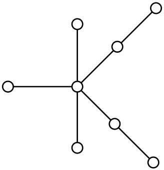
Kirkland *et al.* caracterizaram grafos G para os quais $a(G) = k(G)$.



Exemplo 5.1

Este grafo tem conectividade algébrica $a = 0,3820$ *e* $k = k' = \delta = 1$ *.*

Kirkland *et al.* caracterizaram grafos G para os quais $a(G) = k(G)$.

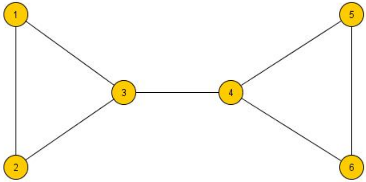


Exemplo 5.1

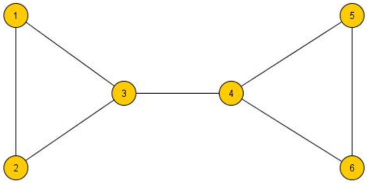
Este grafo tem conectividade algébrica $a = 0,3820$ *e* $k = k' = \delta = 1$.

Kirkland *et al.* caracterizaram grafos G para os quais $a(G) = k(G)$.

Considere o grafo abaixo.

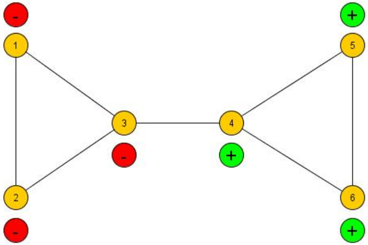


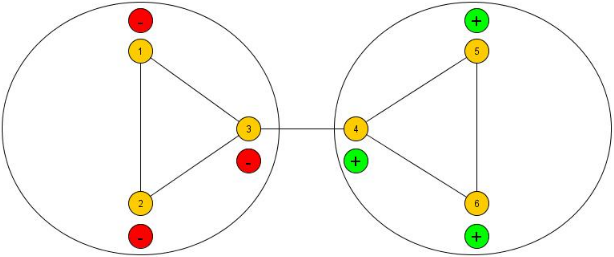
A conectividade algébrica é dada por: $a(G) = 0.44$. O autovetor associado a $a(G)$ é dado por
$\mathbf{x} = (-0.4647; -0.4647; -0.2610; 0.2610; 0.4647; 0.4647)^T$.

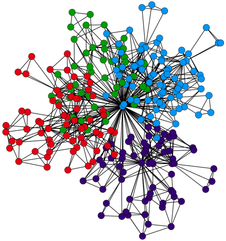


O autovetor associado a $a(G)$ é dado por
$\mathbf{x} = (-0.4647; -0.4647; -0.2610; 0.2610; 0.4647; 0.4647)^T$.

As entradas positivas do vetor $\mathbf{x}$ formam o Grupo 1; as entradas negativas do vetor $\mathbf{x}$ formam o Grupo 2.

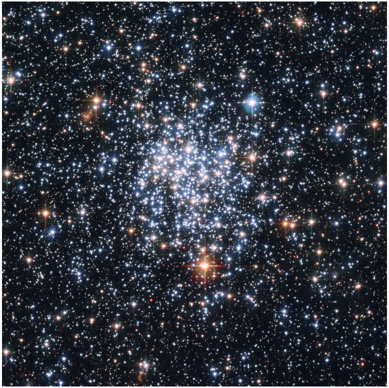



-
1
3
-
2
-
+
5
4
+
6
+



- Identificar similaridades entre clientes num banco de dados (por exemplo da Credicard);
- Avaliação de vulnerabilidade de redes;
- Redes de co-autoria;
- Agrupamento de Estrelas em Astronomia.

- Um dos desafios da Astronomia é, a partir de uma imagem de uma região do céu com diversas estrelas, segregar aquelas pertencentes ao *Open Cluster*. Este problema é conhecido como *Stellar Cluster Membership Problem* $(SCMP)$.
- Os dados disponíveis são as posições x-y das estrelas no plano, advindas de imagens fornecidas por telescópios, assim como os parâmetros fotométricos das mesmas. Estes parâmetros fotométricos estão relacionados com as medidas de magnitude de cada estrela em cada comprimento de onda da banda passante.



OBRIGADO!!!