

Teoria Espectral de Grafos e Aplicações

Leonardo Lima

Departamento de Engenharia de Produção (CEFET/RJ)

IV Workshop da Escola de Informática & Computação

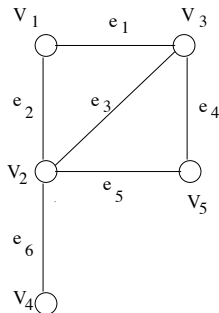
Outubro 2016

Definição 1.1

Um grafo é uma estrutura $G = G(V, E)$ onde $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 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 .

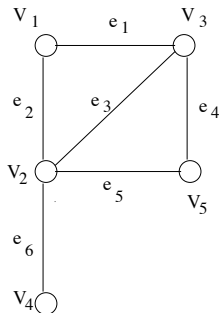
Grafo G 

$$V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\},$$

$$E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\},$$

$$d(v_1) = 2, d(v_2) = 4,$$

$$d(v_3) = 3, d(v_4) = 1, d(v_5) = 2$$

Grafo G 

$$V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\},$$

$$E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\},$$

$$d(v_1) = 2, d(v_2) = 4,$$

$$d(v_3) = 3, d(v_4) = 1, d(v_5) = 2$$

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

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

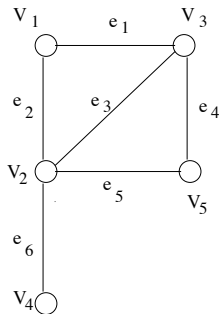
Matriz de adjacência de um grafo

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

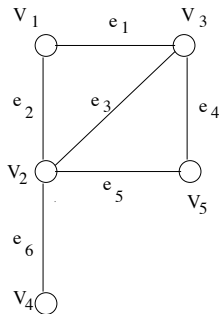
$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E \text{ para } v_i, v_j \in V; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

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 **0'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 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_s$ são os autovalores distintos do grafo G com multiplicidades $m(\lambda_1), m(\lambda_2), \dots, m(\lambda_s)$ escrevemos

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

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 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_s$ são os autovalores distintos do grafo G
com multiplicidades $m(\lambda_1), m(\lambda_2), \dots, m(\lambda_s)$ escrevemos*

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

Definição 2.2

O polinômio característico

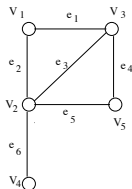
$$p_G(\lambda) = \det(\lambda I - A(G))$$

*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 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_s$ são os autovalores distintos do grafo G
com multiplicidades $m(\lambda_1), m(\lambda_2), \dots, m(\lambda_s)$ escrevemos*

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

Exemplo

Grafo G



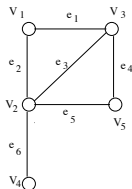
$$A(G) - \lambda I = \begin{bmatrix} -\lambda & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & -\lambda \end{bmatrix}.$$

$$p_G(\lambda) = \det(A(G) - \lambda I) = \lambda^5 - 6\lambda^3 - 4\lambda^2 + 2\lambda$$

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

Exemplo

Grafo G



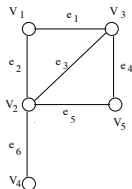
$$A(G) - \lambda I = \begin{bmatrix} -\lambda & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & -\lambda \end{bmatrix}.$$

$$p_G(\lambda) = \det(A(G) - \lambda I) = \lambda^5 - 6\lambda^3 - 4\lambda^2 + 2\lambda$$

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

Exemplo

Grafo G



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

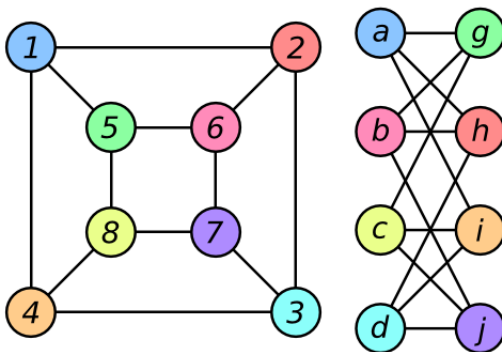
$$p_G(\lambda) = \det(A(G) - \lambda I) = \lambda^5 - 6\lambda^3 - 4\lambda^2 + 2\lambda$$

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

Definição 3.1

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.

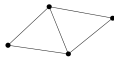
Os grafos abaixo são iguais?



Aplicação: Reconhecimento de Padrões.



O subgrafo abaixo está presente na estrutura da face acima?



Importância

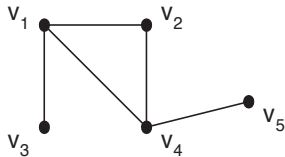
A matriz laplaciana de um grafo e, em especial, o maior e o segundo menor autovalores dela, desempenham papel relevante em diversas aplicações.

Definição 4.1

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 .

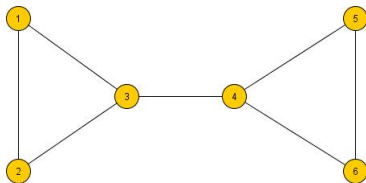


$$D = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

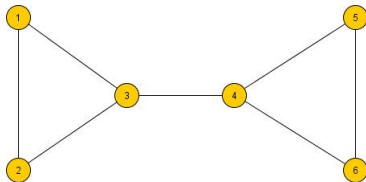
Logo,

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

Relembre da relação: $L(G)\mathbf{x} = a(G)\mathbf{x}$.

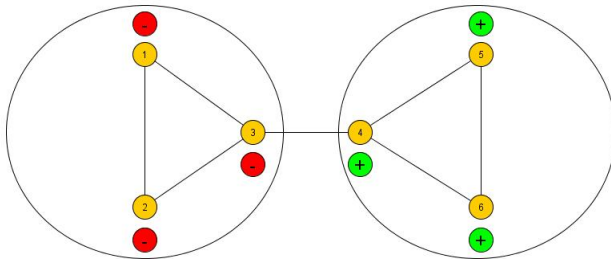


A conectividade algébrica é dada por: $a(G) = 0.44$.



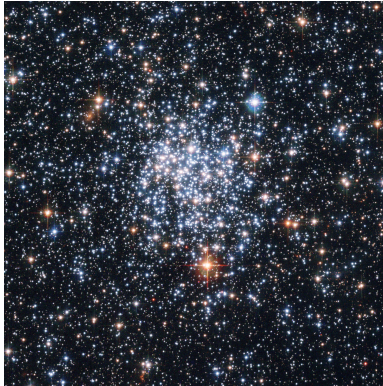
O autovetor associado a $a(G)$ é dado por

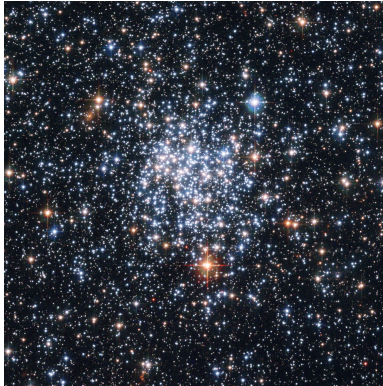
$$\mathbf{x} = (-0.4647; -0.4647; -0.2610; 0.2610; 0.4647; 0.4647)^T.$$



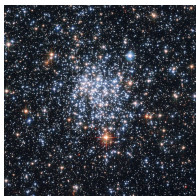
Aplicações: Marketing.

- 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.





- Cada estrela da foto corresponde a um vértice no grafo;
- Duas estrelas u_1 e u_2 são conectadas por uma aresta caso a distância entre elas seja menor que um certo Δ ;
- Constrói-se as matrizes A e L do grafo de estrelas;
- Calculam-se os autovalores e autovetores de L ;
- Agrupamos as estrelas.



O algoritmo é baseado nos seguintes passos:

- (i) build the weighted adjacency matrix of the graph: two vertices u and v are connected by an edge if u is among the n nearest neighbors of v or v is among n nearest neighbors of u . Then, the weight of the edge $\{u, v\}$, i.e., A_{uv} , is determined by the Heat kernel function as $A_{uv} = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{P}^u - \mathbf{P}^v\|^2}{t}\right)$ for some t conveniently chosen;
- (ii) compute the eigenvalues and eigenvectors to the generalized eigenvalue problem $L\mathbf{y} = \lambda D\mathbf{y}$, where λ and $\mathbf{y}$ are the eigenvalue and the eigenvector of L , respectively.
- (iii) choose some entries of the eigenvectors $\mathbf{y}_i$, for $i = 1, \dots, m$ to obtain the dimensionality reduction.

OBRIGADO!!!

