



**UNIVERSIDAD DEL PAPALOAPAN**

Campus Loma Bonita

**LICENCIATURA EN MATEMÁTICAS APLICADAS**

**Energía y energía por vértices en redes aleatorias**

**TESIS**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
**LICENCIADO EN MATEMÁTICAS APLICADAS**

**PRESENTA:**

**AARÓN JIMÉNEZ APARICIO**

**DIRECTOR DE TESIS:**

**M. C. IVÁN GUADALUPE MENDOZA ALONZO**

**CO-DIRECTOR DE TESIS:**

**DR. MARCELINO RAMÍREZ IBÁÑEZ**

LOMA BONITA, OAXACA, MÉXICO. 2019



# UNIVERSIDAD DEL PAPALOAPAN

Campus Loma Bonita

## LICENCIATURA EN MATEMÁTICAS APLICADAS

LA PRESENTE TESIS TITULADA

**"ENERGÍA Y ENERGÍA POR VÉRTICES EN REDES ALEATORIAS"**

PRESENTADA POR EL SUSTENTANTE DE LA LICENCIATURA C. AARÓN JIMÉNEZ APARICIO BAJO LA DIRECCIÓN DEL M. C. IVÁN GUADALUPE MENDOZA ALONZO Y EL DR. MARCELINO RAMÍREZ IBÁÑEZ, HA SIDO REVISADA Y ACEPTADA POR EL COMITÉ EXAMINADOR PARA SER DEFENDIDA EN EL EXAMEN PROFESIONAL Y OBTENER EL TÍTULO DE LICENCIADO EN MATEMÁTICAS APLICADAS.

M. C. IVÁN GUADALUPE MENDOZA ALONZO  
DIRECTOR

DR. MARCELINO RAMÍREZ IBÁÑEZ  
CO-DIRECTOR

DRA. LUCINA KANTÚN  
MONTIEL  
REVISORA

DRA. ERÉNDIRA MUNGUÍA  
VILLANUEVA  
REVISORA



# Universidad del Papaloapan

FECHA:	12 de Julio del 2019
ÁREA:	Vice-Rectoría Académica
OFICIO NÚMERO:	UNPA/VRA/187/2019
ASUNTO:	Autorización de Impresión de tesis.

**C. Aarón Jiménez Aparicio.**  
**PRESENTE:**

En base al artículo 120 del reglamento de alumnos, por medio de la presente se aprueba la impresión de la tesis titulada **“Energía y energía por vértices en redes aleatorias”** así como la programación del examen profesional bajo la dirección del M.C. Iván Guadalupe Mendoza Alonzo.

Sin más por el momento aprovecho la ocasión para enviarle un cordial saludo.

Atentamente.  
terra ubérrima, mens aperta  
Bou Lo-tama, chi jí jú

  
MC. HÉCTOR LÓPEZ ARJONA  
Vice-Rector Académico.



C.c.p. Dr. Víctor Manuel Méndez Salinas Jefe de Carrera de la Lic. En Matemáticas Aplicadas.  
C.c.p. L.P. Yesenia Barrientos Arenal. Jefa del Departamento de Servicios Escolares  
C.c.p. M.C. Iván Guadalupe Mendoza Alonzo. Director de Tesis.  
C.c.p. Archivo.

**OAXACA**

Campus Loma Bonita  
Av. Ferrocarril S/N, Col. Ciudad Universitaria, Loma Bonita, Oaxaca C.P. 68400  
Tel/Fax: 01 281 872 82 30

[www.unpa.edu.mx](http://www.unpa.edu.mx)

Campus Tuxtepec  
Circuito Central N° 200, Col. Parque Industrial C.P. 68301  
Tel/Fax: 01 287 875 9240



UNIVERSIDAD DEL PAPALOAPAN

Campus Loma Bonita

**Oficio No. MA049-19**

Loma Bonita Oaxaca a 5 de julio del 2019

Asunto: Asignación de sinodales de tesis

**M.E. Yesenia Barrientos Arenal**

**Jefa del departamento de servicios escolares**

**PRESENTE**

Por este medio le informo que la Vicerrectoría Académica, ha designado a los siguientes profesores como sinodales del examen profesional del alumno **Aarón Jiménez Aparicio**, quien defenderá su trabajo de tesis titulado "**Energía y energía por vértices en redes aleatorias**", para obtener el título de Licenciado en Matemáticas Aplicadas.

Titulares:

Presidente: Dra. Eréndira Munguía Villanueva

Secretario: Dra. Aura Lucina Kantún Montiel

Vocal: M.C. Iván Guadalupe Mendoza Alonzo

Suplentes:

Dr. José Nobel Méndez Alcocer

Dr. Víctor Manuel Méndez Salinas



JEFATURA DE  
CARRERA  
DE MATEMÁTICAS  
APLICADAS

Sin otro particular me despido quedando a sus ordenes para cualquier aclaración.

ATENTAMENTE

Dr. Víctor Manuel Méndez Salinas

Jefe de carrera de la Lic. en Matemáticas Aplicadas

Universidad del Papaloapan

Vo.Bo.

M.C. Hector López Arjona

Vicerrector Académico

c.c.p. M.C. Héctor López Arjona. Vicerrector académico

c.c.p. M.E. Yesenia Barrientos Arenal. Jefa de servicios escolares

c.c.p. Archivo

*Dedicado a mi familia, en especial a mi madre Irma Aparicio Romero y mi padre Arturo Jiménez Hernández, quienes me han apoyado incondicionalmente.*

# Agradecimientos

Este trabajo se lo dedico a mi familia, mi madre: Irma Aparicio Romero y padre: Arturo Jiménez Hernández, mis hermanos: Damaris, Arturo, mi pequeña hermana Aideé y mi adorado sobrino, Esaú, que son mi más grande tesoro, les debo toda mi persona y más, pues son ustedes quienes me han apoyado y guiado para ser una persona de bien.

Agradezco la tutoría de dos grandes seres humanos de quienes me llevo enseñanzas que no solo se dieron en el aula sino fuera de ella, gracias al Dr. Marcelino Ramírez Ibañez y la Dra. Beatriz Carely Luna Olivera por enseñarme a ser siempre humilde y esforzarme por compartir lo que aprenda.

Para mis profesores que me han compartido su tiempo y conocimiento: Dra. Aura Lucina Kantún Montiel, M. C. Iván Guadalupe Mendoza Alonzo, Dr. Víctor Méndez Salinas, Dra. Eréndira Munguía Villanueva, Dr. Juan Manuel Pérez, D.C.O. Héctor Hugo Sánchez Hernández, son mi ejemplo y una guía de lo que debo ser.

Con gran sinceridad deseo que los proyectos de mis compañeras y amigas, Catalina Morelos Ramos (La Qaty's), Marijose Perunici Avendaño (Maya), Karen Hernández Fentanez (Karina caricias) e Irerí Ortiz Morales, se cumplan y podamos seguir compartiendo momentos como la familia en la que nos hemos convertido.

Gracias a los que de buena y mala manera participaron en mi vida en estos cinco años, me llevo las enseñanzas que son necesarias para ser mejor persona teniendo en mente siempre buscar la superación y ser agradecido.

# Abstract

The energy of a graph representing the molecular structure of a conjugated hydrocarbon is an approximation to the solution of the Schrödinger equation. However, for a graph in general, the meaning of energy is unknown. In order to solve several questions related to the energy of a graph, the search has been made, in the literature, of properties in the structure of the graph, bounds and examples of graphs with specific energies.

With the aim of providing knowledge on the behavior of energy in graphics, in this thesis several measures are reviewed in networks for the description of the networks generated by the Watts-Strogatz model.

The energy and energy by vertexes in small world networks was widely studied when generating a set of algorithms implemented in the Python programming language, used for obtaining the necessary data to represent its energy, the distribution of its energy by vertices and its correlation with well-known measures in networks. The way to represent the data is given by: heat maps, histograms, 2 and 3 dimensional images.

Finally, the results obtained are analyzed and the application of the same methodology is considered for Albert-Barabási networks.

# Resumen

La energía de una gráfica que representa la estructura molecular de un hidrocarburo conjugado, es una aproximación a la solución de la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, para una gráfica en general el significado de la energía es desconocido. A modo de resolver diversas preguntas relacionadas a la energía de una gráfica, se ha hecho la búsqueda, en la literatura, de propiedades en la estructura de la gráfica, cotas y ejemplos de gráficas con energías específicas.

Con el objetivo de aportar conocimientos sobre el comportamiento de la energía en gráficas, en la presente tesis se repasan varias medidas en redes para la descripción de las redes generadas por el modelo de Watts-Strogatz.

Se estudió ampliamente la energía y energía por vértices en redes de mundo pequeño al generar un conjunto de algoritmos implementados en el lenguaje de programación Python, utilizados para la obtención de los datos necesarios para representar su energía, la distribución de su energía por vértices y su correlación con medidas bien conocidas en redes. La forma de representar los datos está dada por: mapas de calor, histogramas, imágenes en 2 y 3 dimensiones.

Finalmente se analizan los resultados obtenidos y se considera la aplicación de la misma

# Índice de figuras

2.1.	Gráfica $G$ de orden 5 y tamaño 6. . . . .	5
2.2.	Gráfica $K_n$ y $k$ -regular . . . . .	7
2.3.	$G_a$ y $G_b$ . . . . .	8
2.4.	Gráficas isomorfas. . . . .	8
2.5.	$G$ , $\mathcal{L}(G)$ y $\overline{\mathcal{L}(G)}$ . . . . .	9
2.6.	Gráfica de orden 5. . . . .	10
2.7.	Redes de Erdős-Rényi. . . . .	12
2.8.	Red de Erdős-Rényi. . . . .	13
2.9.	Redes de mundo pequeño con $n = 20$ y $k = 4$ . . . . .	15
2.10.	Función de distribución de la conectividad en una red de mundo pequeño. . . . .	17
2.11.	Coefficiente de centralidad. . . . .	17
3.1.	Ejemplos de gráficas hipoenergéticas . . . . .	21
3.2.	$\varepsilon(DG) = \varepsilon(D_2G) = 8$ . . . . .	22
3.3.	En <b>(a)</b> $\varepsilon(G_a) = 1.69442719099999150$ y en <b>(b)</b> , $\varepsilon(G_b) = 1.6944271909999916$ . . . . .	22
3.4.	Energía de redes de Erdős-Rényi . . . . .	26
5.1.	$\varepsilon(\mathcal{SW}_{(1000,k,p)})$ . . . . .	36
5.2.	Curvas de nivel de $\varepsilon(\mathcal{SW}_{(n,k,p)})$ . . . . .	36
5.3.	$\varepsilon(\mathcal{SW})$ al variar $n$ y $p$ con $k \approx n/2$ . . . . .	37
5.4.	. . . . .	37
5.5.	Comparación entre $\varepsilon(\mathcal{G}_{(1000,p)})$ y $\varepsilon(\mathcal{SW}_{(1000,k,1)})$ . . . . .	38
5.6.	Histogramas de energía por vértices. . . . .	39
5.7.	$\varepsilon(\mathcal{SW})$ al variar $n$ y $p$ con $k \approx n/2$ . . . . .	39
5.8.	Coefficiente de agrupamiento promedio de $\mathcal{SW}$ . . . . .	40
5.9.	Correlación entre coeficiente de agrupamiento y la energía por vértice. . . . .	41
5.10.	Histograma de la distribución de la energía por vértices. . . . .	41

5.11. Representación de gráficas pertenecientes a distintas zonas del mapa de calor. . . .	42
5.12. Correlación entre coeficiente de agrupamiento por cuadrados y energía por vértice. . . .	44
5.13. Correlación entre centralidad por ciclos y energía por vértices. . . . .	45
5.14. Correlación entre energía por vértices y centralidad. . . . .	45
5.15. Correlación entre excentricidad y energía por vértices. . . . .	46
5.16. Correlación entre la energía por vértices y PageRank . . . . .	46
5.17. Correlación entre la energía por vértices y la centralidad por intermediación. . . . .	47
5.18. Energía Laplaciana para $\mathcal{SW}$ de orden 200. . . . .	47
5.19. Valores de entropía $H_{M,1}$ . . . . .	48
5.20. Correlación entre energía Laplaciana y coeficiente de agrupamiento . . . . .	48
5.21. $\beta_3$ para $\mathcal{SW}_{(200,k,p)}$ . . . . .	49
5.22. Número de subgráficas en $\mathcal{SW}$ con $n = 200$ y $k = 100$ . . . . .	51

# Índice general

<b>Abstract</b>	<b>IV</b>
<b>Índice de Figuras</b>	<b>VI</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Teoría de las gráficas y redes aleatorias</b>	<b>4</b>
1. Teoría de las gráficas . . . . .	4
1.1. Nociones básicas de teoría de las gráficas . . . . .	4
1.2. Algunas medidas clásicas en gráficas . . . . .	8
2. Algunas medidas en redes . . . . .	10
3. Redes aleatorias Erdős-Rényi . . . . .	12
4. Redes aleatorias Watts-Strogatz . . . . .	14
<b>3. Energía en gráficas</b>	<b>19</b>
1. Clasificación de gráficas por su energía . . . . .	20
2. Avances en la energía de gráficas . . . . .	23
3. Avances en la energía de redes aleatorias . . . . .	25
4. Definición de energía por vértices . . . . .	26
<b>4. Software y algoritmos utilizados</b>	<b>28</b>
<b>5. Resultados</b>	<b>35</b>
1. Análisis del comportamiento de la energía en $\mathcal{P}^W$ . . . . .	35
2. Análisis del comportamiento de la energía por vértices en $\mathcal{P}^W$ . . . . .	38
3. Comparación de energías por vértice y otras medidas en redes $\mathcal{P}^W$ . . . . .	39
3.1. Correlación con el coeficiente de agrupamiento . . . . .	39
3.2. Correlación con el coeficiente por cuadrados . . . . .	44

3.3.	Correlación de la energía por vértices y otras medidas de la gráfica. . . . .	44
4.	Energía Laplaciana . . . . .	47
5.	Algunas subgráficas de interés para la aproximación de la energía en una gráfica . .	49
<b>6.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>52</b>

# Capítulo 1

## Introducción

De manera informal se entiende una gráfica  $G$  como una colección de puntos, no necesariamente finita, unidos por líneas. Una gráfica simple posee a lo más una línea para cada par de puntos distintos, su matriz de adyacencia es una matriz cuadrada que resume las conexiones existentes entre cada par de puntos, colocando un 1 cuando hay una línea que los conecta y 0 en caso contrario. El orden de  $G$  es el número de puntos en ella.

Sea  $G$  una gráfica simple y finita de orden  $n$ , con matriz de adyacencia  $A(G)$  y polinomio característico  $P_G(x) = \det(A(G) - I_n x)$ , donde  $I_n$  es la matriz identidad de orden  $n$ . Las raíces del polinomio característico tienen aplicaciones relevantes en la química, existe una correspondencia cerrada entre los valores propios de la gráfica y los valores de la energía de la órbita molecular del  $\pi$ -electrón de un hidrocarburo conjugado, la cual se calcula como la suma de los valores absolutos de los valores propios de la matriz de adyacencia de su estructura molecular. La energía de una gráfica no solo tiene una interpretación química interesante, además es un invariante relevante en la teoría de las gráficas que debe su nombre al trabajo de Ivan Gutman [15].

Por otro lado, las matemáticas actuales presentan un auge en las investigaciones relacionadas a las redes y la recolección de datos masivos de información, la interpretación de medidas de gráficas en fenómenos biológicos, sociales y computacionales. Una manera de modelar todo lo anterior es mediante redes aleatorias, su estudio comenzó con los trabajos de Paul Erdős y Alfréd Rényi [12], continuando y ganando peso gracias a las aportaciones de Duncan J. Watts y Steven Strogatz [28], László Barabási y Réka Albert [4].

La energía en gráficas ha sido estudiada desde el enfoque de la combinatoria, física y matrices aleatorias, para la familia de gráficas de línea, de representación molecular,  $r$ -regular, bipartitas completas y variantes de redes aleatorias, entre ellas las redes aleatorias del tipo Erdős-Rényi, sin

embargo, existen pocos o nulos estudios relacionados a la energía de otro tipo de redes aleatorias.

Las redes de mundo pequeño, considerándolas como gráficas simples y finitas, son populares en la modelación de fenómenos sociales, caracterizadas por contener un alto número de triángulos y poseer caminos (secuencias conectadas de puntos) de longitud pequeña que conectan a cualquier par de puntos en la red. El método de construcción de éstas redes dado por Duncan J. Watts y Steven Strogatz considera la variación de un grado promedio  $k$  y una probabilidad de reconexión  $p$  para generarlas.

En el presente trabajo se desarrolla el software para el cálculo de la energía en redes de mundo pequeño y otros invariantes de las redes, con el fin de identificar la relación de la energía con las propiedades existentes de cada medida considerada y representar su comportamiento variando el grado promedio de la red y su probabilidad de reconexión.

Esta tesis tiene como objetivos específicos:

- Comprender cómo se calcula la energía y energía por vértices en gráficas.
- Entender la construcción de las gráficas de mundo pequeño, las medidas que las caracterizan y las transiciones que presentan.
- Calcular las energías y energías por vértices de dichas gráficas.
- Relacionar la definición de energía y energía por vértices de una gráfica con las propiedades de las medidas consideradas.

En el Capítulo 2, trataremos nociones básicas de la teoría de las gráficas para entender el problema, después se introduce el modelo de Watt-Strogatz, que es el principal modelo del presente trabajo, finalmente se describen las medidas e invariantes que se utilizan para el análisis del comportamiento de la energía total y por vértices en redes de mundo pequeño, con la finalidad de correlacionar las medidas consideradas con la energía de la gráfica.

En el Capítulo 3, se da una pequeña reseña histórica de la energía en gráficas, su definición formal y clasificación en hiperenergéticas, equienergéticas, hipoenergéticas y cuasienergéticas. Para complementar el Capítulo se añade la definición de energía por vértices y la cota propuesta por E. Estrada [13].

Abordando la parte de la programación, en el Capítulo 4 se describen y especifican los algoritmos desarrollados e implementados para el cálculo de las medidas consideradas en el Capítulo 2. Los programas desarrollados tiene una precisión de  $1 \times 10^{-14}$  y  $1 \times 10^{-16}$  lo cual da mayor sustento a nuestros resultados en comparación con aquellos donde la precisión es inferior a  $1 \times 10^{-10}$ .

En el Capítulo 5 se presentan los resultados del trabajo de investigación sobre el comportamiento de la energía en redes de mundo pequeño, con los datos obtenidos del software y el rango de los parámetros necesarios en el modelo de Watts-Strogatz que se proponen en el Capítulo 4.

Finalmente se concluye con una recapitulación de los resultados y los objetivos alcanzados.

# Capítulo 2

## Teoría de las gráficas y redes aleatorias

### 1. Teoría de las gráficas

#### 1.1. Nociones básicas de teoría de las gráficas

Desde el nacimiento de la teoría de las gráficas en el siglo XVII, se encontró en ella la multidisciplinariedad que hoy en día es necesaria para resolver diversos problemas. Incluso en la primera prueba formal del problema de los puentes de Königsberg por Leonhard Euler (1707-1783), considerado como el padre de la teoría de las gráficas y uno de los matemáticos más prolíferos de la historia, se notó la relación con la geometría, este mismo trabajo es considerado como uno de los primeros en Topología (1736).

Tras su nacimiento la teoría de las gráficas ha albergado diversos problemas de interés como el problema de los cuatro colores que fue planteado por primera vez por el matemático Francis Guthrie (1831 - 1899), el problema original consiste en colorear un mapa de tal manera que ningún país vecino tenga el mismo color.

Si bien es cierto que la teoría de las gráficas soluciona diversos problemas matemáticos, computacionales y de otras áreas como: ciencias sociales, biología, física y química, dentro de ella existen problemas clasificados como **NP** y **NP-completo** (con solución no polinomial), tal es el caso de la búsqueda de ciclos hamiltonianos que consiste en viajar a todos los sitios marcados en un mapa sin repetir los caminos que llevan de un lugar a otro con la restricción de que al final del viaje se retorne al punto de partida. Tal problema fue planteado por el matemático William Rowan Hamilton (1805-1865), a quien debe su nombre. Con el paso de los años se han formalizado las definiciones que dan forma a la teoría de las gráficas gracias a las aportaciones de grandes matemáticos en la

historia.

A continuación mencionamos las nociones básicas, necesarias para la comprensión del problema tratado en esta tesis [10].

Una **gráfica** es un par  $G = (V, E)$  de conjuntos tales que  $E \subseteq [V]^2$ ; esto es que los elementos de  $E$  son 2-elementos de  $V$ . Los elementos de  $V(G)$  son los vértices (o nodos, o puntos) de la gráfica y los elementos de  $E(G)$  son las aristas (o líneas).

Si  $e_{i,j} \in E(G)$ , entonces para  $v_i$  y  $v_j \in V(G)$ ,  $v_i$  se relaciona con  $v_j$ . Dos vértices  $v_i$  y  $v_j$  son **vecinos** si existe  $e_{i,j} \in E(G)$ . En la Figura 2.1, el vértice 1 tiene como vecinos a los vértices en el conjunto  $\{2, 3, 4\}$ .

El número de vértices de  $G$  es su **orden**, denotado por  $|V(G)|$  y el **tamaño** de  $G$  es la cardinalidad del conjunto de aristas,  $|E(G)|$ .

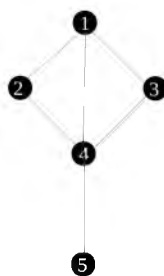


Figura 2.1: Gráfica  $G$  de orden 5 y tamaño 6.

En este trabajo se consideran solo gráficas de orden finito y **simples**, es decir, sin **aristas paralelas** (dos o más aristas con el mismo vértice inicio y vértice final) y sin **bucles** ( $e_{i,i}$ , arista con el mismo vértice inicial y final), además  $e_{i,j} = e_{j,i}$ , para toda  $e_{i,j} \in E(G)$ .

Las conexiones entre vértices, es decir, las adyacencias entre vértices, se representan matricialmente mediante su **matriz de adyacencia**,  $A(G)$ , en la que  $A(G) = \delta_{i,j}$ , para  $1 \leq i, j \leq n$ , con

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } e_{i,j} \in E(G) \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (1)$$

Por simplicidad tomaremos  $A = A(G)$ .

La **matriz Laplaciana** de  $G$  se define como  $L = D - A$ , donde  $D$  es la matriz cuadrada con entradas  $D_{i,i} = d(v_i)$  y  $D_{i,j} = 0$ , para  $i \neq j$  y  $A$  la matriz de adyacencia de  $G$ .

Se denota como  $P_G(x) = \det(A - Ix) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + a_{n-3} x^{n-3} + \dots + a_0$  al **polinomio característico** de la matriz de adyacencia asociada a  $G$ , donde  $I$  es la matriz identidad,  $x$  es una variable y  $n$  corresponde al orden de la gráfica. A las raíces del polinomio característico se les conoce como **valores propios** de la matriz de adyacencia de la gráfica.

A continuación se presentan:  $A$  la matriz de adyacencia de la gráfica de la Figura 2.1 y  $L$  su matriz Laplaciana,,

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$A(G)$   $L(G)$

sus polinomios característicos correspondientes son:

- $P_G(x) = x^5 - 6x^3 - 4x^2 + 2x$
- $P_{L(G)}(x) = x^5 - 12x^4 + 49x^3 - 78x^2 + 40x$

con valores propios:

- $\lambda_{L(G)} = \{-0.25619, 0.81006, 2.00000, 2.35650, 4.08963\}$
- $\lambda_G = \{-2.13578, -0.66215, 0.00000, 0.66215, 2.13578\}$

Si todos los vértices de una gráfica  $G$  son adyacentes, entonces se dice que  $G$  es **completa** y se denota como  $K_n$ .

El conjunto de vecinos de un vértice  $v \in G$  se denota  $N_G(v) = \{u \in V(G) \mid u \text{ es adyacente a } v\}$ . El **grado** (o valencia)  $d(v)$  de un vértice  $v$  es el número de vecinos de  $v$ , es decir  $|N_G(v)|$ . Si todos los vértices de  $G$  tienen grado  $r$ , entonces  $G$  es  **$r$ -regular**.

Las gráficas completas son  $n - 1$ -regular con  $\frac{n(n-1)}{2}$  aristas. A modo de ejemplo las gráficas de la Figura 2.2 corresponden a una gráfica completa de orden 5 y una gráfica 4-regular de orden 10.

El **grado promedio** de  $G$ , se define como  $\bar{d}(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d(v_i)$ , donde  $n$  es el orden de  $G$ . Claramente, el grado promedio de una gráfica  $r$ -regular es  $r$ .

Una gráfica es **bipartita** si  $V(G)$  tiene una partición en dos conjuntos  $X$  y  $Y$  tal que cada arista  $e_{i,j} \in E(G)$  conecta un vértice de  $X$  y uno de  $Y$ . En este caso  $(X, Y)$  es una bipartición de  $G$ , y  $G$  es

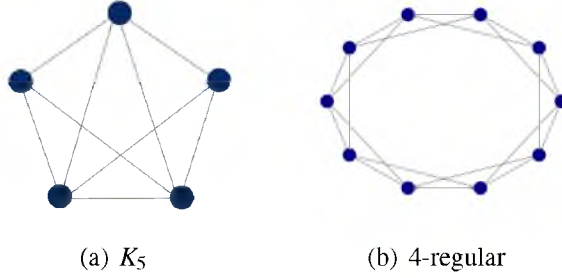


Figura 2.2: Gráfica  $K_n$  y  $k$ -regular

$(X, Y)$ -bipartita.

Sea  $G$  gráfica simple con  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ ,  $G^*$  es la **gráfica bipartita** de  $G$  con bipartición  $(X, Y)$ , donde  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ ,  $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ , en la cual  $x_i$  e  $y_i$  son adyacentes si  $i = j$  o  $e_{i,j} \in E(G)$ , para  $1 \leq i, j \leq n$ .

Se define la **gráfica complemento** de  $G$ , la cual se escribe como  $\overline{G}$ , con respecto a la gráfica completa  $K_n$ , como aquella tal que  $V(\overline{G}) = V(G)$  y  $E(\overline{G}) = E(K_n) - E(G)$ .

La **gráfica de líneas** de  $G$ , denotada como  $\mathcal{L}(G)$ , asigna un vértice  $v_k$  a cada arista  $e_{i,j} \in E(G)$ , para  $1 \leq k \leq m$  y  $1 \leq i, j \leq n$ ,  $v_r$  y  $v_s \in V(\mathcal{L}(G))$  son adyacentes en  $\mathcal{L}$  si solo si las aristas a las que representan inciden en un vértice en  $G$ .  $\mathcal{L}^k(G)$ , es la  $k$ -ésima iteración de la gráfica de líneas de  $G$ .

Para  $e_{j_i, j_{i+1}} \in E(G)$ , con  $1 \leq i \leq p$ , la secuencia  $W_{j_1, j_p} = e_{j_1, j_2}, e_{j_2, j_3}, \dots, e_{j_{p-1}, j_p}$  es una **trayectoria** de  $v_{j_1}$  a  $v_{j_p}$ . Si  $v_{j_s} \neq v_{j_r}$ , para  $1 \leq r, s \leq p$ ,  $W_{j_1, j_p}$  es un **camino**. La **distancia entre dos vértices**  $v_i$  y  $v_j$ , denotada por  $d(i, j)$ , es el mínimo número de aristas necesarios para conectar  $v_i$  a  $v_j$  por el camino  $W_{i,j}$ .

Si  $W_{j_1, j_p} = e_{j_1, j_2}, \dots, e_{j_{p-1}, j_p}$ , entonces  $C = W_{j_1, j_p} + e_{j_p, j_1}$  es un ciclo, su longitud es su número de aristas. A la longitud del ciclo más corto que contiene a los vértices  $v_i$  y  $v_j$  se le denota como  $l(i, j)$ .

Si podemos construir un camino para cualquier par de vértices distintos de la gráfica  $G$ , se dice que  $G$  es **conexa**. Un **árbol** es una gráfica simple, conexa y sin ciclos.

La gráfica  $G_a$  de la Figura 2.3, al borrar la arista  $e_{1,2}$ , se vuelve un árbol mientras, que  $G_b$  es bipartita.

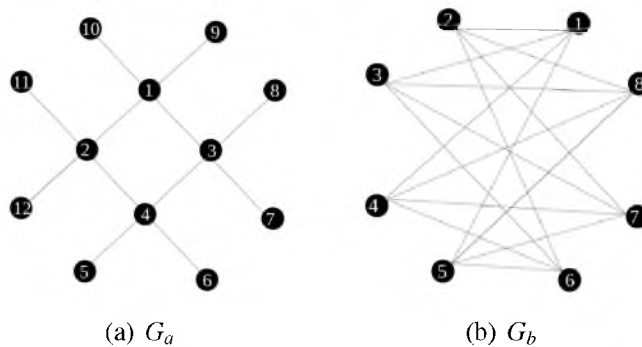


Figura 2.3:  $G_a$  y  $G_b$

Sea  $G = (V, E)$  y  $G' = (V', E')$  dos gráficas. Decimos que  $G$  es isomorfa a  $G'$ ,  $G \simeq G'$ , si existe una biyección  $\rho : V \rightarrow V'$  con  $e_{i,j} \in E \leftrightarrow \rho(v_i)\rho(v_j) \in E'$  para cada  $v_i$  y  $v_j \in V(G)$ .

Una función que toma como argumentos a gráficas es llamada una invariante si asigna el mismo valor para gráficas isomorfas. En la Figura 2.4 se tienen dos gráficas isomorfas cuya biyección es:  $\rho(1) = c$ ,  $\rho(2) = d$ ,  $\rho(3) = b$ ,  $\rho(4) = e$  y  $\rho(5) = a$ .

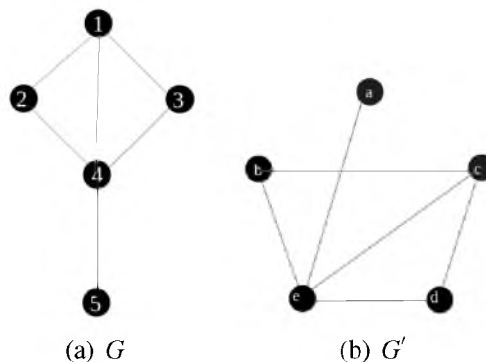


Figura 2.4: Gráficas isomorfas.

## 1.2. Algunas medidas clásicas en gráficas

A los vértices de una gráfica conexa se le asocian medidas propias como la **excentricidad**,  $exc(v_i) := \max\{d(i, j) | v_j \in G\}$ , la cual indica que tan alejado está un vértice con respecto al resto dentro de la red.

El **diámetro** de una gráfica se define como  $Diam(G) := \max\{exc(v_i) | v_i \in G\}$ , mientras más pequeño sea el diámetro más conectada está la gráfica.

Similar a  $Diam(G)$ , el **radio** de  $G$ ,  $rad(G) := \min\{exc(v_i) \mid v_i \in G\}$ .

En la figura 2.5 se muestra una gráfica  $G$ , su gráfica de líneas  $\mathcal{L}(G)$  y  $\overline{\mathcal{L}(G)}$ . Para  $\overline{\mathcal{L}(G)}$  las medidas de diámetro, radio y excentricidad son tomadas de la parte conexas de la gráfica. De la lista de excentricidades del cuadro 2.1 se pueden obtener el diámetro y el radio de cada gráfica.

Cuadro 2.1:				
Gráfica	Diámetro	Radio	Excentricidades $\{v_i : exc(v_i)\}$	Grados $\{v_i : d(v_i)\}$
$G$	2	1	$\{1:2, 2:2, 3:2, 4:1, 5:2\}$	$\{1:3, 2:2, 3:2, 4:4, 5:1\}$
$\mathcal{L}(G)$	2	2	$\{1:2, 2:2, 3:2, 4:2, 5:1, 6:2\}$	$\{1:3, 2:4, 3:3, 4:4, 5:5, 6:3\}$
$\overline{\mathcal{L}(G)}$	4	2	$\{1:3, 2:4, 3:2, 4:4, 6:3\}$	$\{1:2, 2:1, 3:2, 4:1, 5:0, 6:2\}$

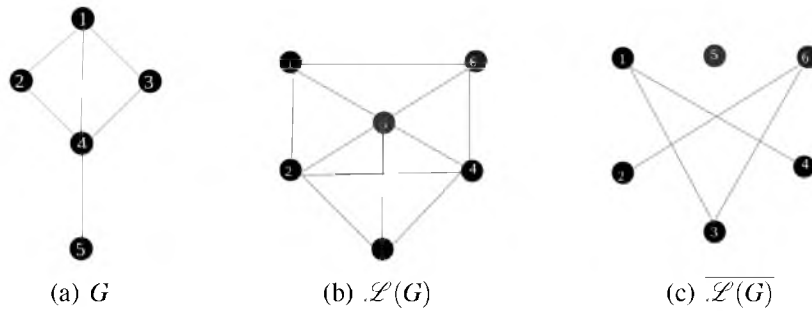


Figura 2.5:  $G$ ,  $\mathcal{L}(G)$  y  $\overline{\mathcal{L}(G)}$

## 2. Algunas medidas en redes

De la estructura de una red se puede obtener información de su comportamiento bajo el análisis de medidas basadas en la distancia, ciclos, número de subgráficas especiales, recubrimiento de la red, entre otras. Las medidas utilizadas para el análisis de las redes de mundo pequeño al variar el grado promedio y probabilidad de reconexión, se explican a continuación.

Si se divide el número total de triángulos que contiene una gráfica sobre el número de caminos de longitud, el cociente resultante nos da una idea de qué tan triangulada y conectada está la gráfica, a ello se le llama **coeficiente de clusteración o agrupamiento (C)**. Se define el **coeficiente de agrupamiento por vértice** como el número existente de aristas entre sus vecinos sobre todas las posibles aristas  $\binom{k_i(k_i+1)}{2}$ , así para cada  $v_i \in V(G)$  con grado  $k_i$

$$C_i = \frac{2T_i}{k_i(k_i+1)},$$

donde  $v_s, v_j \in N_G(v_i), e_{s,j} \in E(G)$  y  $T_i = |\{e_{s,j} | e_{i,s}, e_{i,j} \in E(G)\}|$  es el número de aristas entre vecinos de  $v_i$ . Así  $\bar{C}(G)$  es el coeficiente de agrupamiento promedio de  $G$ .

En la Figura 2.6 se muestra una gráfica donde el vértice 1 tiene vecindad  $N_G(1) = \{2, 3, 4, 5\}$ , las aristas existentes entre ellos son  $e_{2,5}, e_{4,5}$  y  $e_{3,4}$  y  $C_1 = \frac{2(3)}{5(4)} = \frac{3}{10}$ .

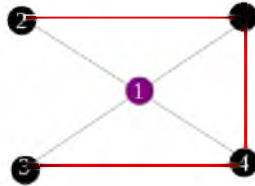


Figura 2.6: Gráfica de orden 5.

La **centralidad por cercanía** es una medida con la que podemos comparar que tan cerca se encuentra un vértice del centro de la red y se define como:

$$CC(v_i) = \frac{1}{\sum_{j=1}^n d(i, j)} \quad (1)$$

donde  $d(i, j)$  es la distancia del vértice  $v_i$  al vértice  $v_j$ .

La **centralidad por intermediación** se define como:

$$CB(v_i) = \sum_{j,k} \frac{b(j, i, k)}{b(j, k)} \quad (2)$$

donde  $b(j, k)$  es el número de caminos de menor longitud del nodo  $v_j$  al  $v_k$  y  $b(j, i, k)$  el número de caminos más cortos desde  $v_j$  hasta  $v_k$  que pasan por el vértice  $v_i$ .

La **centralidad por ciclos** [33] se define como:

$$SCC(v_i) = \frac{1}{\sum_{j=1, j \neq i}^n l(i, j)}, \quad (3)$$

para  $l(i, j)$  es la longitud del menor ciclo que pasa por los vértices  $v_i$  y  $v_j$ , con  $SCC(v_i) = 0$  cuando no existen ciclos que pasen por  $v_i$ .

Como medida basada en valores propios  $\lambda_i \neq 0$ , para  $1 \leq i \leq n$ , M. Dehmer en [9] define la **entropía de valores propios** de la matriz de adyacencia asociada a una gráfica  $G$  como:

$$H(G) = \sum_{i=1}^n \frac{|\lambda_i|^{1/s}}{\sum_{j=1}^n |\lambda_j|^{1/s}} \log \frac{|\lambda_i|^{1/s}}{\sum_{j=1}^n |\lambda_j|^{1/s}}, \quad (4)$$

haciendo  $s = 1$ ,

$$H(G) = \sum_{i=1}^n \frac{|\lambda_i|}{\epsilon} \log \frac{|\lambda_i|}{\epsilon}. \quad (5)$$

El **coeficiente de agrupamiento por cuadrados** calcula la fracción de cuadrados posibles por cada nodo, denotándose por  $C_4$ , y es igual a la probabilidad de que los vértices  $v$  y  $w$  posean dos vecinos diferentes [24].

$$C_4(v) = \frac{\sum_{u, w \in N_G(v)} q_v(u, w)}{\sum_{u, w \in N_G(v)} [a_v(u, w) + q_v(u, w)]}, \quad (6)$$

donde  $q_v(u, w)$  la cantidad de vecinos comunes de  $u$  y  $w$ ,  $N_G(v)$  la vecindad de  $v$ ,  $d(v)$  el grado de  $v$ ,

$$a_v(u, w) = (d(u) - (1 + q_v(u, w)) + \theta_{u,v})(d(w) - (1 + q_v(u, w)) + \theta_{u,w}),$$

donde  $\theta_{u,w} = 1$  cuando  $e_{u,w} \in E(G)$  y 0 en caso contrario.

A modo de ejemplo para la gráfica de la Figura 2.1 tomando el vértice  $v_4$ ,

$$C_4(v_4) = \frac{q_{v_4}(2, 3)}{a_{v_4}(2, 3) + q_{v_4}(2, 3)} = \frac{1}{[2 - (1 + 1 + 0)][2 - (1 + 1 + 0)] + 1} = 1,$$

y para el resto de los vértices de  $G$ ,  $C_4(G) = \{1 : 1, 2 : 1, 3 : 1, 4 : 1, 5 : 0\}$ .

Una gráfica dirigida es tal que para dos vértices  $v_i$  y  $v_j$ ,  $e_{i,j}$  posee dirección o sentido, en este caso el arista  $\vec{e}_{i,j}$  sale de  $v_i$  y apunta a  $v_j$ .

Sea  $F_u$  el conjunto de vértices que apuntan a  $u$ ,  $B_u$  el conjunto de vértices a donde apunta  $u$ ,  $N_u = |F_u|$  y  $\alpha$  una constante de normalización tal que  $\alpha \in [0, 1]$ , se define el **PageRank** de la manera más sencilla como:

$$R(u) = \alpha \sum_{v \in B_u} \frac{R(v)}{N_u} \quad (7)$$

Observe que se trata de un proceso recursivo, en que se toma como valor inicial de  $R(v)$  como la cardinalidad de los enlaces de entrada del vértice  $v$ . El PageRank de una gráfica dirigida, clasifica por importancia los vértices de una gráfica  $G$ . Si  $G$  es no dirigida se convierte en una gráfica con dos bordes dirigidos para cada borde no dirigido [25].

### 3. Redes aleatorias Erdős-Rényi

Las investigaciones sobre gráficas aleatorias comenzaron con las aportaciones de Paul Erdős y Alfred Rényi en la década de los 50's [12], al definir dos modelos similares de redes aleatorias, trazando los inicios de la investigación en esta área. Resumiendo de lo que tratan ambos:

- Modelo 1: Se escoge una gráfica de entre todas las posibles con  $n$  nodos y  $m$  aristas.
- Modelo 2: De la gráfica  $G$  sin aristas,  $e_{i,j}$  se genera con probabilidad independiente  $p$ , conocida como probabilidad de conexión, para  $i \neq j$ .

Se denotará como  $\mathcal{G}_{(n,p)}$  a la familia de gráficas aleatorias de orden  $n$  y probabilidad de conexión  $p$ . Para la familia de gráficas generadas por el modelo de Erdős-Rényi  $\mathcal{G}_{(n,p)}$ ,  $\mathcal{G}$  es algún elemento de este conjunto.

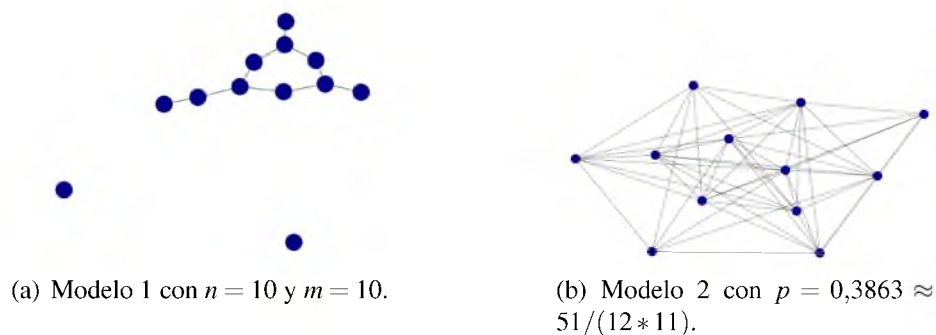


Figura 2.7: Redes de Erdős-Rényi.

El segundo modelo describe al primero cuando  $p = \frac{2m}{n(n-1)}$  y su distribución de grado tiene cualidades de una distribución de Poisson.

Algunas propiedades del modelo 2 son [12]:

1. Si  $p = \frac{\lambda}{n}$ , con  $\lambda < 1$ , la componente conexa más grande tiene  $O(\log n)$  vértices.
2. Para  $\lambda > 1$ , el tamaño de la componente gigante es  $\Theta(\lambda)n$  y  $O(\log n)$  para la segunda más grande.
3. Cuando  $p = \frac{1}{n}$ , el orden de la componente gigante es  $O(n^{2/3})$ .
4. Su coeficiente de agrupamiento promedio es  $\bar{C}(G) = p$ .
5. El grado promedio,  $E(\bar{d}) = np = \alpha$ .
6. La probabilidad de que el vértice  $v_i$ , tenga grado  $d_i = k$ , es decir  $P(d_i = k) = P(k) = \frac{\alpha e^{-\alpha}}{k!}$ .

Pocas redes del mundo real se comportan de esta manera, en su mayoría presentan una distribución exponencial libre de escala en la que la probabilidad de conexión no está determinada por el número de vértices.

En la figura 2.8 se muestra una red de Erdős-Rényi con  $n = 600$ ,  $m = 1100$  y  $p = \frac{2m}{n(n-1)} = 0.00612$  en el que su coeficiente de agrupamiento promedio es 0.003297619047619048, grado promedio igual a 3.6666666666666665, y con 18 componentes conexas de tamaño  $\{583, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1\}$ .

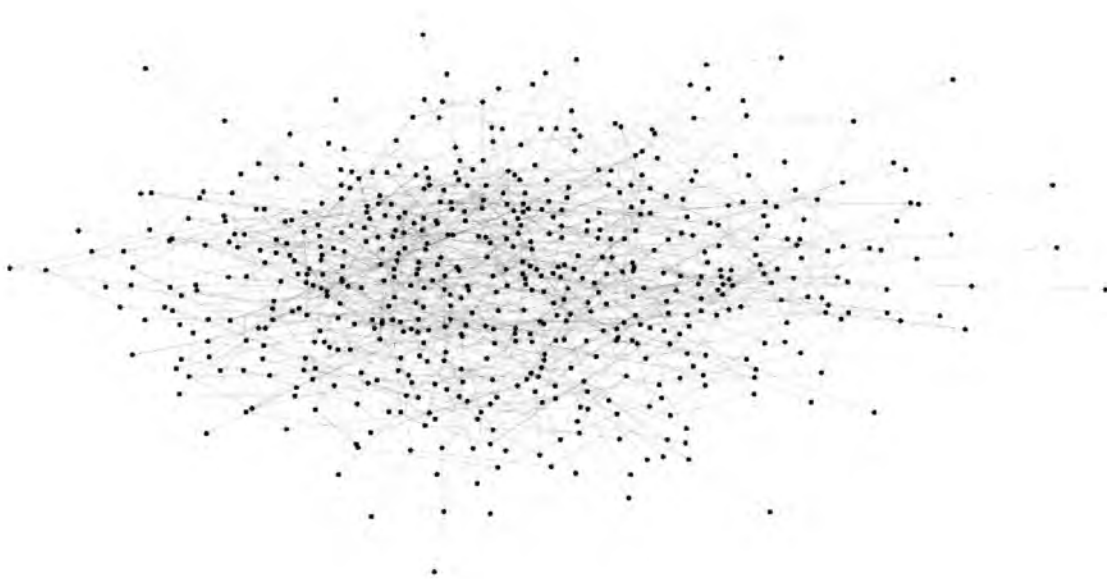


Figura 2.8: Red de Erdős-Rényi.

## 4. Redes aleatorias Watts-Strogatz

La definición de red de mundo pequeño es el resultado de la hipótesis de los seis grados de separación, que resulta teóricamente cierta si consideramos que el número de personas en el planeta fuera de 6 billones y cada uno tuviera en promedio 42.62 amigos. El nacimiento de esta idea popular no es clara pero se le atribuye a sucesos famosos, algunos de ellos son:

- El estudio de *Stanley Milgram The Small World Problem*.
- *Ousa*, la obra teatral de John Guare.
- La obra teatral de Frigyes Karinthy, *Cadenas*.
- El desafío del diario alemán *Die Zie*, consistente en conectar a la tienda Turkish kebab-shop con el actor Marlon Brando.

Para  $n$  el número de vértices,  $k$  grado promedio (número par),  $p$  probabilidad de reconexión mayor a cero, con  $n \gg k \gg \log n \gg 1$  (el símbolo  $\gg$  significa suficientemente mayor). Duncan J. Watts y Steven Strogatz [28] propusieron en 1998 una manera de construir una gráfica conexa aleatoria, pasando por los siguiente puntos:

1. Indexar cada vértice tal que  $V(G) = \{v_i \mid 1 \leq i \leq n\}$  y  $E(G) = \{e_{i,j} \mid i \neq j, |i - j| \bmod(n) \leq k/2\}$ . En este paso se ordenan  $n$  vértices de manera circular y se construye una gráfica  $k$ -regular conectando el vértice  $v_i$ ,  $0 \leq i \leq n$ , a los  $k/2$  que se encuentran en sentido de las manecillas del reloj. Por simplicidad para un vértice  $v_i$  a los vértices  $v_{i+1}, v_{i+2}, \dots, v_{i+j}, \dots, v_{i+s}$ , se les mencionará como vértices a la izquierda de  $v_i$  y de manera análoga para los  $v_{i-1}, v_{i-2}, \dots, v_{i-j}, \dots, v_{i-s}$  se les mencionará como vértices a la derecha de  $v_i$ . Para los casos donde  $(i - j) < 0$  y  $(i + j) > n$ , notemos que se toma el módulo con respecto a  $n$  de la adición como nuevo subíndice.
2. Para cada  $v_i$ , sean  $j > i$  y  $|i - j| \bmod(n) \leq k/2$ , sustituir  $e_{i,j}$  con probabilidad  $p$  por  $e_{i,k}$ , donde  $k \in \{V(G) - v_i - N_G(v_i)\}$ . El proceso de reconexión consiste en dado un  $p_0$ , si  $p_0 \leq p$ , la arista  $e_{i,j}$  se remplaza por alguna otra de entre todas los  $\frac{n(n-1)}{2}$  posibles.

El modelo de Watts-Strogatz, genera gráficas que pueden ser redes de mundo pequeño, consideremos el subconjunto de estas tales que cumplen con ser conexas, a ellas se les denotará como  $\mathcal{S}\mathcal{W}_{(n,k,p)}$  de orden  $n$ , grado promedio  $k$  y probabilidad de reconexión  $p$ . Se define a  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  como algún elemento de la familia de redes de mundo pequeño  $\mathcal{S}\mathcal{W}_{(n,k,p)}$ .

En la Figura 2.9 se observa el proceso de aleatorización de una gráfica completamente ordenada a una gráfica totalmente aleatoria, a partir del incremento en la probabilidad de reconexión  $p$ .

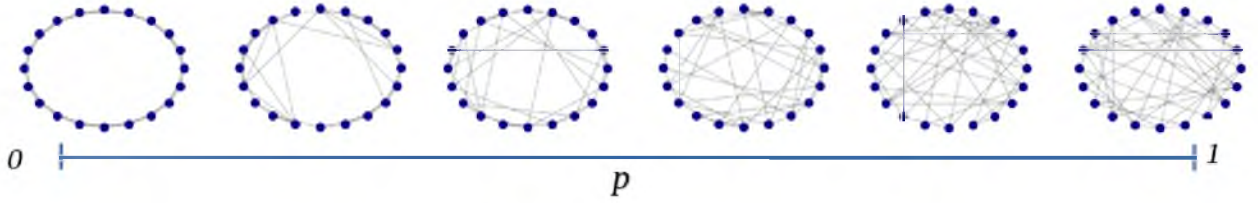


Figura 2.9: Redes de mundo pequeño con  $n = 20$  y  $k = 4$ .

Inicialmente se posee un retículo o gráfica regular de orden  $n$ , para  $p = 0$ , con diámetro  $Diam(n, 0) \sim \frac{n}{2k}$ . Para cuando la red es totalmente aleatoria su diámetro está determinado por el diámetro de la componente conexa más grande de una gráfica tipo Erdős-Rényi,

$$Diam(n, 1) = \frac{\log n}{\log k}.$$

Las gráficas aleatorias tienen la peculiaridad de poseer un diámetro menor al de las gráficas regulares.

Dos propiedades importantes en una red de mundo pequeño son: alto coeficiente de agrupamiento y un diámetro reducido. Aunque es intuitivo pensar que el comportamiento de una red de mundo pequeño es una transición de fase que depende de  $p$ , esto no es correcto, sino que es un fenómeno de corte que depende de  $n$ ,  $k$  y  $p$ , lo anterior quiere decir que las dos propiedades anteriores en una red generada por el modelo de Watts- Strogatz aparecen después de un punto específico  $n'$ ,  $p'$  o  $k'$ , cada uno definido al mantener fijo los dos restantes (para obtener  $n'$  se mantienen fijos  $p$  y  $k$ , de forma similar para  $p'$  y  $k'$ ).

$$Diam(n, p) \sim n' \mathcal{F}_k\left(\frac{n}{n'}\right), \quad (1)$$

para  $p$  fija,  $n'$  es un punto de corte del número de vértices con  $\mathcal{F}_k'$  es tal que  $\mathcal{F}_k(u \gg 1) \sim u$ ,  $\mathcal{F}_k(u \ll 1) \sim \log n$ ,  $n \sim p^{-\tau}$  y  $\tau$  una constante tal que  $\tau \leq 1$ . Un resultado para  $\tau \approx 2/3$ , fue estudiado por M. Barthélémy, su comportamiento es tal que por encima de él la red se comporta como una de mundo pequeño [5].

**Lema 2.1** [11] *Sea  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  una red generada por el modelo de Watts-Strogatz de orden  $n$  y grado promedio  $k$ , para  $p$  probabilidad de conexión fija, entonces*

$$Diam(n \gg n') \sim n' \log n.$$

Inicialmente dentro del modelo, todo vértice tiene grado denotado por  $k$ , en el paso de reconexión de aristas se consideran solo los vecinos de la derecha por lo que haciendo  $s = k/2$ , la conectividad del vértice  $v_i$  se puede expresar como  $c_i = s + r$ , para  $r$  el número de aristas reconectados del vértice  $v_i$ .

Cuando  $p = 0$ , la conectividad de la red de mundo pequeño es constante,  $k$  vecino por vértice. Para  $p > 0$ , al ocurrir el paso de reconexión las  $s$  aristas en sentido contrario a las manecillas del reloj no son afectadas mientras que algunos de las  $s$  aristas en sentido del reloj se conservan con probabilidad  $(1 - p)$  y otras se agregan de algún vértice  $v_j \neq v_i$ . De lo anterior, la conectividad es una función de distribución dada por:

$$F_p(c) = \left( \sum_{n=0}^{\min\{c-s,s\}} \binom{s}{r} (1-p)^n p^{s-r} \right) \left( \frac{(sp)^{c-s-r}}{(c-s-r)!} \exp(-ps) \right),$$

Para  $r = r_1 + r_2$ ,

$\binom{s}{r_1} (1-p)^n p^{s-r_1}$ , describe la probabilidad de preservar  $r_1$  aristas originales de la red y  $\frac{(sp)^{c-s-r_2}}{(c-s-r_2)!} \exp(-ps)$  la probabilidad de obtener  $r_2$  nuevas conexiones [6].

La Figura 2.9 muestra el comportamiento de la función de distribución de la conectividad en una red de mundo pequeño de orden 100 y grado promedio 20. Inicialmente la probabilidad de que un vértice tenga grado promedio  $k = 20$  es 1 y conforme  $p$  crece, la probabilidad de que  $k = 20$  disminuye, ocurre lo contrario para  $k = 21, 22, 24, 30$ .

El modelo de Watts-Strogatz genera una gráfica  $k$ -regular en el paso 1, si nos restringimos a  $v_i$  y a su vecindad, todas las posibles aristas entre los vecinos de la izquierda de  $v_i$  son  $\frac{s(s-1)}{2}$  y de la misma manera entre los vecinos a la derecha de  $v_i$ . La adyacencias existentes entre los vértices de la derecha e izquierda de  $v_i$  se restringen a ser  $\cup_{s,r} e_{s,r}$ , donde  $i-k+1 \leq s \leq i-1$  e  $i+1 \leq r \leq s+k$ , de lo anterior se obtienen que el número total de aristas entre el conjunto de vértices a la derecha y a la izquierda de  $v_i$  es  $\frac{s(s-1)}{2}$ , por lo que el número total de aristas posibles entre  $v_i$  y sus vecinos son

$$\frac{3s(s-1)}{2},$$

de los  $\frac{k(k-1)}{2} = s(2s-1)$  posibles, entonces el coeficiente de conectividad de un vértice para una red regular es

$$c(0) = \frac{3(s-1)}{2(2s-1)} \quad (2)$$

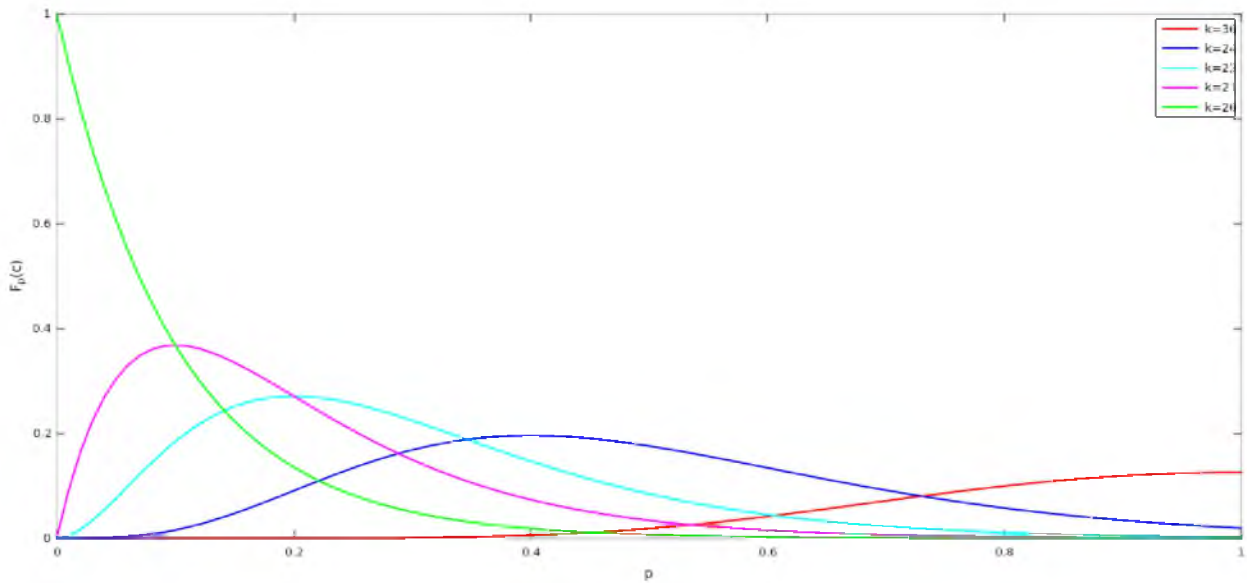


Figura 2.10: Función de distribución de la conectividad en una red de mundo pequeño.

La Figura 2.11 muestra la subgráfica obtenida de una gráfica 8-regular generada en el paso 1 del modelo de Watts-Strogatz, tomando un vértice  $v_i$  y considerando solo las adyacencias entre la vecindad cerrada de  $v_i$ . En rojo se muestran las adyacencias entre  $v_i$  y sus vecinos a la derecha, con verde las adyacencias con sus vecinos a la izquierda y en negro las adyacencias entre los vecinos de la izquierda y la derecha de  $v_i$

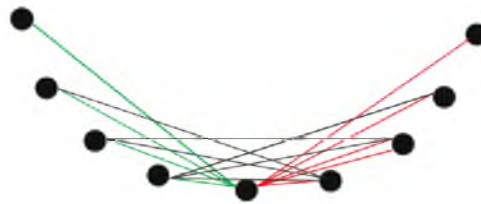


Figura 2.11: Coeficiente de centralidad.

Existe una probabilidad  $(1-p)^3$  de que cada uno de los  $\frac{3s(s-1)}{2}$  enlaces iniciales entre los vecinos de  $v_i$  permanezcan, esto sumando un factor  $O(1/n)$  [6].

$$c(p) \approx c(0)(1-p)^3.$$

donde la dependencia sobre  $n$  tiende a cero cuando  $n \rightarrow \infty$ .

Otro modelo de red aleatoria es el de apego preferencial, aun cuando no lo emplearemos en esta tesis es útil conocerlo por la importancia que posee en la representación de fenómenos reales.

Un modelo para la construcción de una red de apego preferencial, es el de Barabási y Albert (1999) [4]. El modelo parte de una gráfica inicial  $G_0$  y un número  $m$  de nuevas conexiones, un nuevo vértice se conectará a  $m$  vértices en  $G_0$  a partir de la probabilidad de conexión de cada vértice, definida para  $v_i$  como:

$$p_i = \frac{d(v_i)}{\sum_k d(v_k)},$$

Las redes generadas por este modelo poseen distribución de grado que siguen leyes exponenciales del tipo  $p_k \sim \beta k^{-\gamma}$ , con  $\gamma > 0$  y  $\beta$  constante.

El comportamiento de la anterior red es común en redes artificiales tales como: World Wide Web (WWW), redes de comercio, redes sexuales, entre otras.

A pesar de que el modelo de Albert-Barabási es más común en la actualidad y que las aplicaciones del modelo de Erdős-Rényi son muy limitadas debido a que pocas redes reales se comportan de tal manera, es conveniente conocer el comportamiento de las redes de Erdős-Rényi pues describen a las de mundo pequeño cuando  $p \rightarrow 1$ .

En [11], R. Durrett describe diversas propiedades de los modelos de gráficas aleatorias: Erdős-Rényi, Watts-Strogatz y Albert-Barabási desde el punto de vista estocástico y epidemiológico.

# Capítulo 3

## Energía en gráficas

En la década de los 40's, gracias a los estudios realizados por Erich Hückel sobre la órbita de electrones en moléculas de hidrocarburos, nació lo que hoy conocemos como *energía en gráficas*,  $\varepsilon(G)$ . El modelo orbital de Hückel permite conocer el comportamiento de los electrones en la molécula y establecer sus energías mediante la expresión:

$$\mathbb{H}\psi = \varepsilon\psi, \quad (1)$$

donde  $\mathbb{H}$  es la matriz hamiltoneana y  $\psi$  la combinación lineal de un número finito de funciones base elegidas de manera apropiada (llamada la ecuación de onda del sistema). Es fácil deducir que bajo esta representación, el problema se puede resolver con ayuda de herramientas de teoría espectral.

Para 1940, en [7], Charles Coulson formula la integral que lleva su nombre:

$$\varepsilon(G) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [n - x \frac{d}{dx} \ln \phi(G, ix)] dx, \quad (2)$$

con  $\phi(G, ix)$  el polinomio característico de la gráfica  $G$  evaluado en  $ix$ , tal que  $G$  representa la estructura de la molécula. La integral de Coulson establece la relación explícita entre la energía y el polinomio característico de la gráfica. El teorema de H. Sachs muestra la relación de los coeficientes del polinomio característico con su estructura.

**Teorema 3.1 (Teorema de Sachs [8])** *Sea  $G$  una gráfica con polinomio característico  $\phi(G) = \sum_{k=0}^n a_{n-k} x^{(n-k)}$ , para  $k \geq 1$*

$$a_k = \sum_{S \in L_k} (-1)^{\omega(S)} 2^{c(S)},$$

donde  $L_k$  es el conjunto de subgráficas de Sachs en  $G$  con  $k$  vértices, cuyas componentes son aristas o ciclos,  $\omega(S)$  es el número de componentes conexas de  $S$  y  $c(S)$  el número de ciclos de  $S$ . Para  $k = 0$ ,  $a_n = 1$ .

Del teorema de Sachs,  $a_{n-1} = 0$  pues el número de gráficas de Sachs de 1 vértices es cero,  $a_{n-2} = -m$  donde  $m$  es el tamaño de  $G$  y  $a_{n-3}$  es el número de triángulos de la gráfica.

Fue Ivan Gutman [15] en 1978 quien formalizó el término *energía de una gráfica* tal como se conoce hoy en día,

$$\varepsilon(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|, \quad (3)$$

con  $\lambda_i, i = 1, \dots, n$ , los valores propios de la matriz de adyacencia de  $G$ .

Se han desarrollado modelos de construcción de gráficas con energía mínima y máxima, en ello recae el enfoque hacia las gráficas conjugadas, uniciclos, biciclos, bipartitas y árboles (ver [21, §7] y [21, Lema 7.1]).

## 1. Clasificación de gráficas por su energía

A continuación se menciona la clasificación de cada gráfica por su energía y se enuncian algunos resultados reportados para cada clase considerada.

Consideramos  $H$  y  $G$  dos gráficas de orden  $n$ , se dice que  $G$  es:

- **Hiperenergética** si  $\varepsilon(G) \geq \varepsilon(K_n) = 2(n-1)$ .

Las redes de mundo pequeño son hiperenergéticas cuando  $k \gg \log n$ .

Son pocos los resultados que se tienen para la construcción o clasificación de gráficas hiperenergéticas, actualmente muchos de ellos se basan en el resultado de H.B. Walikar que se expone en el siguiente teorema.

**Teorema 3.2** [16] *La gráfica de línea de  $K_n$ ,  $\mathcal{L}(K_n)$ , con  $n \geq 5$  y  $K_{(\frac{n}{2}, \frac{n}{2})}$ , con  $n \geq 8$  son hiperenergéticas.*

**Teorema 3.3** [27] *Las gráficas de línea de  $(n,m)$ -bipartita, con  $n \geq 5$  y  $m \geq 2n$ ,  $n \geq 7$  y  $m \geq 2(n-1)$ , son hiperenergéticas.*

- **Hipoenergética** si  $\varepsilon(G) \leq n$ .

En [20] se prueban los siguientes dos resultados para gráficas hipoenergéticas.

**Lema 3.4** Sea  $\Delta$  el mayor grado de la gráfica.

1. Si  $\Delta = 3$ , entonces existen árboles hipoenergéticos para  $n = 4$  y  $n = 7$ .
2. Si  $\Delta = 4$ , entonces existen árboles hipoenergéticos para  $n \geq 5$ , tal que  $n = k \pmod{4}$ ,  $k = 0, 1, 3$ .
3. Si  $\Delta \geq 5$ , entonces existen árboles hipoenergéticos para toda  $n \geq \Delta + 1$ .

Una gráfica es **fuertemente hipoenergética** si  $\varepsilon(G) < n - 1$ .

**Lema 3.5**

1. Supongamos que  $\Delta = 4$  y  $n \geq 5$ , entonces existe un árbol fuertemente hipoenergético con  $n$  vértices, para  $n = 9, 13, 17, 20, 21$  y  $n \geq 23$ .
2. Si  $\Delta = 5$ , entonces existe un árbol fuertemente hipoenergético con  $n$  vértices, para  $n = 6$  y  $n \geq 9$ .
3. Si  $\Delta \geq 6$ , entonces existe un árbol con  $n$  vértices que es fuertemente hipoenergético, para  $n \geq \Delta + 1$ .

Ejemplos de gráficas hiponenergéticas son: unicyclos, biciclos y triciclos [33] [34], la Figura 3.1 muestra algunas de ellas.

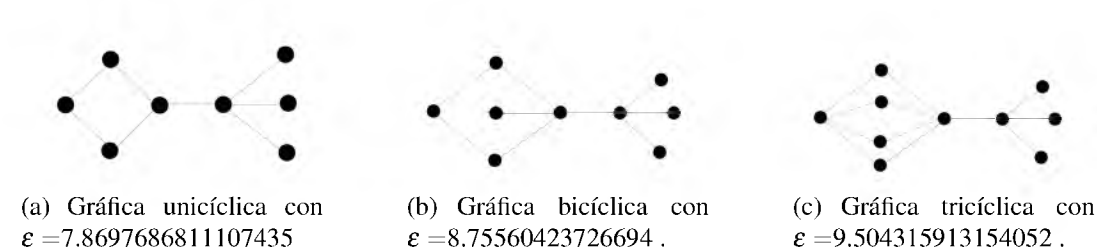


Figura 3.1: Ejemplos de gráficas hipoenergéticas

- **Equienergética** con  $H$ , si  $\varepsilon(G) = \varepsilon(H)$  y sus valores propios correspondientes son distintos para cada gráfica (son no coespectrales).

Una manera sencilla de construir este tipo de gráficas esta dada por el siguiente método.

Sea  $G$  una gráfica con un conjunto de vértices  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ , tomando otro conjunto de vértices  $U = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ , se define una gráfica  $DG$  tal que su conjunto de vértices es  $V(DG) = V \cup U$ , y su conjunto de aristas consiste solo en las que unen a  $u_i$  con los vecinos de  $v_i$  en  $G$ , para  $1 \leq i \leq n$ .

Sea  $U$  el conjunto de los vértices de una copia de  $G$  y haciendo adyacente  $u_i$  a los vecinos de  $v_i$ , el resultado es la gráfica denotada por  $D_2G$  [26][17].

La Figura 3.2 muestra un ejemplo de la gráfica  $DG$  y  $D_2G$  para  $G$  un ciclo de orden 4.

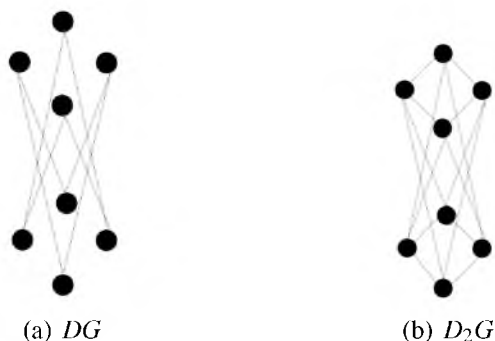


Figura 3.2:  $\varepsilon(DG) = \varepsilon(D_2G) = 8$

**Teorema 3.6 ([29])** Sean  $G_1, G_2$  dos gráficas  $r$ -regular de orden  $n$  y  $r \geq 3$ .

1.  $(\mathcal{L}^2(G_1))^*$  y  $(\mathcal{L}^2(G_2))^*$  son gráficas bipartitas equienergéticas y  $\varepsilon((\mathcal{L}^2(G_1))^*) = \varepsilon((\mathcal{L}^2(G_2))^*) = nr(3r - 5)$ .
2.  $\overline{(\mathcal{L}^2(G_1))^*}$  y  $\overline{(\mathcal{L}^2(G_2))^*}$  son gráficas bipartitas equienergéticas y  $\varepsilon(\overline{(\mathcal{L}^2(G_1))^*}) = \varepsilon(\overline{(\mathcal{L}^2(G_2))^*}) = (5nr - 16)(r - 2) + nr - 8$ .
3.  $\varepsilon(\overline{(\mathcal{L}^2(G_1))^*}) = \varepsilon(\overline{(\mathcal{L}^2(G_2))^*}) = (2nr - 4)(2nr - 3) - 2$ .

- **Cuasienergética** con  $H$ , si  $|\varepsilon(G) - \varepsilon(H)| < \varepsilon$ , con  $\varepsilon > 0$  muy pequeño.

Un obstáculo que se encuentra al momento de buscar gráficas equienergéticas es que la diferencia en sus energías sea muy reducida pero no cero.

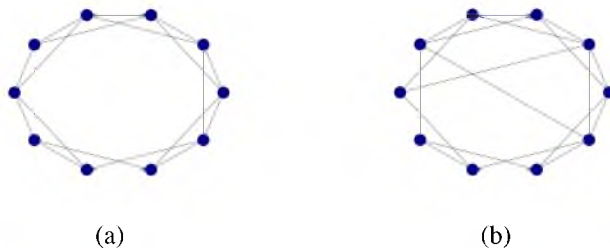


Figura 3.3: En (a)  $\varepsilon(G_a) = 1.69442719099999150$  y en (b),  $\varepsilon(G_b) = 1.6944271909999916$

Se han desarrollado métodos de construcción para cada tipo de gráfica, aunque en general no se conoce qué propiedad estructural cumplen entre ellas tal que sea posible clasificarlas dentro de cada clase.

## 2. Avances en la energía de gráficas

En los últimos 40 años se ha dado una proliferación de trabajos relacionados a la búsqueda de cotas superiores e inferiores de la energía a partir de sus características estructurales. La cota  $\sqrt{2mn}$  (McClelland [22]), aunque es fácil de calcular no nos da una buena aproximación de la energía para fines prácticos como la búsqueda de gráficas equienergéticas y cuasienergéticas por métodos cuantitativos.

$$2\sqrt{m} \leq \varepsilon(G) \leq 2m, \quad \varepsilon(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1)\left[2m - \left(\frac{2m^2}{n}\right)\right]},$$

La desigualdad de la izquierda fue probada por D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs en [8] y la del lado derecho por J.H. Koolen y V. Moulton en [18], quienes también demostraron que para  $G$  bipartita con  $n \geq 2$ ,

$$\varepsilon(G) \leq \frac{n}{\sqrt{8}}(\sqrt{n} + \sqrt{2}).$$

Si  $G$  es  $r$ -regular ( $r < n - 1$ ) y  $\varepsilon > 0$ , R. Balakrishnan demostró en [3], que

$$\varepsilon(G) \leq r + \sqrt{r(n-1)(n-r)}.$$

B. Zhou en [30] probó que para  $G$  libre de cuadrados con grado máximo ( $\Delta$ ) y mínimo ( $\delta$ ),

$$\varepsilon(G) > \frac{2\sqrt{2\delta\Delta}}{2(\delta + \Delta) - 1} \sqrt{2mn}.$$

Si  $n$  es suficientemente grande, V. Nikiforov en [23] probó la siguiente desigualdad,

$$\left(\frac{1}{4} + o(1)\right) < \frac{\varepsilon(G)}{n^{3/2}} < \left(\frac{1}{2} + o(1)\right).$$

Recientemente el resultado dado por E. Estrada en [13] no solo nos dice que la energía de la gráfica está en función de las potencias pares de la traza de la matriz de adyacencia, sino también genera cotas para la energía y describe las aportaciones de subestructuras (camino y ciclo) en ella. Este resultado tiene un significado relevante en química teórica, aunque se puede aplicar a gráficas generales y no solo a gráficas de representación molecular.

**Teorema 3.7 ([13])** Para una gráfica  $G$  conexa, su energía esta determinada mediante,

$$\varepsilon(G) = \lambda_1 \operatorname{tr} \left( \sum_{k=0}^{\infty} \binom{2k}{k} \sum_{l=0}^k (-1)^{k-l} \binom{k}{l} \left( \frac{A}{\lambda_1} \right)^{2l} \right).$$

**Demostración:**

La matriz de adyacencia  $A$ , tiene la propiedad de ser semidefinida positiva (con valores propios  $\lambda_i \geq 0$ ), así:

$$|A| = \sqrt{A^2}.$$

Sin perdida de generalidad, sea  $\lambda_1$  el valor propio más grande de  $A$ , como  $G$  es conexa  $\frac{A}{\lambda_1}$  tiene radio espectral 1 y la matriz

$$B = \left( \frac{A}{\lambda_1} \right)^2 - I,$$

tiene todos sus valores propios en el intervalo  $[-1,0]$ . Expresando  $A$  en función de  $B$

$$\begin{aligned} |A| &= \sqrt{A^2} = \lambda_1 \sqrt{\left( \frac{A}{\lambda_1} \right)^2} \\ &= \lambda_1 \sqrt{I + \left[ \left( \frac{A}{\lambda_1} \right)^2 - I \right]} = \lambda_1 (I + B)^{1/2} \end{aligned}$$

Haciendo uso del teorema del binomio

$$|A| = \lambda_1 (I + B)^{1/2} = \lambda_1 \sum_{k=0}^{\infty} \binom{1/2}{k} B^k$$

En término de su energía  $\operatorname{tr}|A| = \varepsilon(G)$

$$\varepsilon(G) = \operatorname{tr} \left( \lambda_1 \sum_{k=0}^{\infty} \binom{1/2}{k} \left( \frac{A}{\lambda_1} - I \right)^k \right).$$

Aplicando nuevamente el teorema del binomio

$$\varepsilon(G) = \lambda_1 \operatorname{tr} \left( \sum_{k=0}^{\infty} \binom{1/2}{k} \sum_{l=0}^k (-1)^{k-l} \binom{k}{l} \left( \frac{A}{\lambda_1} \right)^{2l} \right).$$

■

### 3. Avances en la energía de redes aleatorias

Mucha de la modelación matemática no es determinista sino estocástica. Si se considera la probabilidad de conexión entre cada vértice como un valor aleatorio e independiente la matriz de adyacencia es una matriz de adyacencia aleatoria con ceros en la diagonal, en particular si  $A$  es una matriz de  $n \times n$ ,  $A$  es una **matriz de Wigner** si cumple las siguientes propiedades:

- Cada  $\delta_{i,j}$ , son variables aleatorias independientes con  $\delta_{i,j} = \delta_{j,i}$ ,
- $\delta_{i,i}$  y  $\delta_{i,j}$  con  $i \neq j$ , tienen distribuciones de probabilidad  $\mathbb{F}_1$  y  $\mathbb{F}_2$ , respectivamente,
- $\text{Var}(\delta_{i,j}) = \sigma_2^2 < \infty$ , para  $i < j < n$ .

Los valores propios  $\lambda_i$  de la matriz  $A$  son ahora valores aleatorios, con función de distribución espectral

$$\mathbb{F}_A(x) = \frac{1}{n} \#\{\lambda_i \leq x, i = 1, \dots, n\} \quad (1)$$

Para cuando  $n \rightarrow \infty$  el **Teorema de Wigner** asegura que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mathbb{F}_A(x)}{n^{1/2}} \rightarrow \mathbb{F}(x) = \int_{-\infty}^x \frac{\sqrt{4\sigma_2^2 - t^2} \mathbf{1}_{|x| \geq 2\sigma_2}}{2\sigma_2^2 \pi} \quad (2)$$

La matriz de adyacencia  $A$  de una gráfica tipo Erdős-Rényi es una matriz de Wigner con  $\mathbb{F}_2 = 0$  y  $\mathbb{F}_2$  binomial, y su energía se aproxima usando el Teorema 3.8, la demostración formal no se incluye en esta tesis. Para profundizar en el tema se recomienda la siguiente referencia [21, §6, Teorema 6.2].

**Teorema 3.8** *Para toda  $\mathcal{G} \in \mathcal{G}_{(n,p)}$  su energía está descrita por*

$$\varepsilon(\mathcal{G}) = n^{3/2} \left( \frac{8}{3\pi} \sqrt{p(1-p)} + o(1) \right)$$

En la Figura 3.4 se muestra la energía de gráficas generadas por el modelo de Erdős-Rényi de orden 200 con probabilidad de conexión de 0 a 1 en pasos de 0.01.

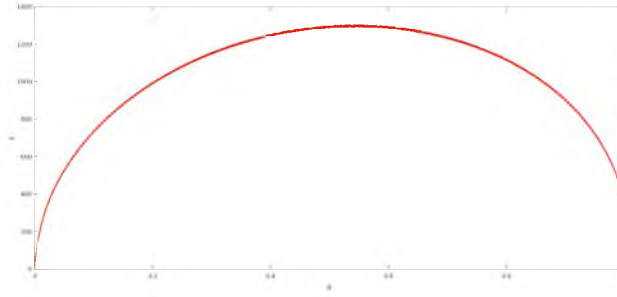


Figura 3.4: Energía de redes de Erdős-Rényi

## 4. Definición de energía por vértices

A pesar de que la definición formal de energía de una gráfica no es nueva, la definición de energía por vértices es reciente [2] y trata de explicar la aportación de cada vértice al valor de la energía total.

Para una gráfica  $G$  de orden  $n$ , la energía de su vértice  $v_i$ ,  $\varepsilon_G(v_i)$ , formalmente se define como

$$\varepsilon_G(v_i) = |A|_{i,i} = |AA^*|_{i,i},$$

donde  $A$  es la matriz de adyacencia de  $G$ ,  $|A|$  su norma y  $A^*$  la matriz adjunta de  $A$ . En nuestro caso  $A^* = A' = A$ , puesto que  $A$  es una matriz real y simétrica, además  $\varepsilon(G) = \text{tr}|A|$ , que se traduce como la suma de las energías de todos los vértices de  $G$ :

$$\varepsilon(G) = \sum_{i=1}^n |A|_{i,i}.$$

**Lema 3.9** [[2], Lema 2.2] *Sea  $G$  de orden  $n$  con valores propios  $\lambda_j$ ,  $j = 1, \dots, n$*

$$\varepsilon_G(v_i) = \sum_{j=1}^n p_{i,j} |\lambda_j|,$$

$i = 1, \dots, n$  y  $p_{i,j}$  pesos que cumplen

$$\sum_{i=1}^n p_{i,j} = \sum_{j=1}^n p_{i,j} = 1,$$

por lo cual  $p_{i,j} = u_{i,j}$ , donde  $U = (u_{i,j})$  es la matriz orto-normalizada de vectores propios (por columna) de  $A$ .

### **Demostración:**

La matriz  $A$  tiene  $n$  vectores propios independientes  $u_1, u_2, \dots, u_n$  y valores propios  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ ,

nombrando  $U = [u_1, u_2, \dots, u_n]$  a la matriz de vectores propios y  $V = (\delta_{i,j} \lambda_i)$ , para  $1 \leq i, j \leq n$ , la matriz con los valores propios de  $A$  en su diagonal. Teniendo la igualdad  $U^{-1} = U^t$ ,

$$A = UVU^t,$$

$$AA^* = (UVU^t)(UV^*U^t) = UVV^*U^t,$$

lo que implica

$$|A| = (AA^*)^{1/2} = (UVV^*U^t)^{1/2} = U(VV^*)^{1/2}U^t$$

donde  $[(VV^*)^{1/2}]_{i,j} = \delta_{i,j} |\lambda_i|$ , entonces

$$|A|_{i,i} = \sum_{j,h=1}^n U_{i,h} [(VV^*)^{1/2}]_{h,j} U_{j,i}^t = \sum_{j=1}^n u_{ij} |\lambda_i| u_{i,j}$$

por lo tanto

$$|A|_{i,i} = \sum_{j=0}^n u_{i,j}^2 |\lambda_i|.$$

■

El concepto de energía por vértices extiende la noción de energía de una gráfica y asocia  $\varepsilon_G(v_i)$  al valor propio  $\lambda_i$  cumpliendo

$$\sum_{i=1}^n \varepsilon_G(v_i) = \varepsilon(G). \quad (1)$$

Una definición análoga con el uso de la integral de Coulson se define en [1], en la que además se aplica este resultado a la descripción de la energía de gráficas bipartitas, árboles.

$$\varepsilon_G(v_j) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} 1 - \frac{ix\phi(G-v_i; ix)}{\phi(G; ix)} dx. \quad (2)$$

Sea  $L$  la matriz Laplaciana de  $G$ , con valores propios  $\beta_1 \geq \beta_2 \geq \dots \geq \beta_n$ , la energía Laplaciana de  $G$ , se define de manera análoga a la tradicional como

$$\varepsilon(G) = \sum_{i=1}^n \left| \beta_i - \frac{2m}{n} \right|, \quad (3)$$

# Capítulo 4

## Software y algoritmos utilizados

Con la finalidad de alcanzar los objetivos propuestos se desarrolló e implementó un algoritmo, eficiente en tiempo y recursos, que permita obtener la energía total, energía por vértices, energía laplaciana, coeficiente de agrupamiento, coeficiente de agrupamiento por cuadrados, centralidad, centralidad por ciclos, excentricidad, PageRank, aristas y grados de una gráfica.

El conjunto de gráficas generadas de la familia de redes  $\mathcal{SW}_{(n,k,p)}$ , es el resultado de variar la probabilidad de 0 a 1 en pasos de 0,01 y el grado promedio del menor valor par mayor a  $\log n$  al menor valor par de  $n - \log n$ , donde  $n$  es el orden de la gráfica, lo que asegura la conexidad de las redes que se generan. Además para la obtención de los resultados mostrados en el Capítulo 4, se fijó el orden de la red de mundo pequeño en  $n = 50, 100, 150, 200, 500$  y  $1000$ .

El número total de gráficas generadas se muestra en el cuadro 4.1.

Cuadro 4.1:

Orden	Número de gráficas generadas
50	2222
100	4545
150	7575
200	9595
500	24745
1000	49793

La visualización de las gráficas se hizo con la biblioteca de *matplotlib* en *python*, se prefirió visualizar los mapas de calor desde Octave por la facilidad en el manejo de matrices sin necesidad de instalar alguna biblioteca adicional. La obtención de las imágenes se realizó sin problemas de tiempo o recursos en la tarjeta gráfica de una computadora con las siguientes especificaciones: Intel

®Core™i3–2330M CPU @ 2.20GHz × 4, de 4 GB de RAM y tarjeta gráfica Intel®Sandybridge Mobile con los software libres GNU Octave 4.2.2 y Python 3.7.0, ejecutándose en Fedora 29.

Para la obtención de las medidas de energía por vértices y energía total de la familia de redes generadas, fue necesario un equipo de cómputo con procesador Intel Xeon®E5-2620 0 @ 2.00 GHZ × 12 de 16 GB de memoria RAM, GNU Octave 4.2.2, Python 3.7.0, ejecutándose en Ubuntu 16.04.

Los resultados de la energía total de las gráficas tienen una precisión de  $1 \times 10^{-14}$  y la energía por vértices se puede calcular con precisiones convenientes mediante la biblioteca *Decimal* de Python. Lo anterior es útil para obtener una búsqueda más precisa de posibles gráficas equienergéticas.

Con la finalidad de evitar la pérdida de información y sobrecargar la memoria en la computadora, los resultados finales se guardan en formato *.dat* para su interpretación en cualquier otro lenguaje de programación o software visualizador de datos y los resultados generados en la ejecución del software son guardados en el formato *.pkl*, nativo de *python* y disponible en la biblioteca *pickle*. Se refirió el formato *.pkl* debido a la representación binaria de objetos como listas y diccionarios que pueden ser reconstruidos, además de la eficiente compresión de los datos. En general *pickle* es la forma preferida de codificar datos de un objeto en un medio de Python.

A continuación se muestran los pseudocódigos de los algoritmos desarrollados en este trabajo, recordando durante la lectura que  $A$  es la matriz de adyacencia de la red  $\mathcal{SW}$ ,  $A'$  la transpuesta de  $A$ ,  $X$  el vector de valores propios,  $V$  la matriz de vectores propios,  $len(X)$  la longitud de un vector y  $sum(X)$  la suma de los valores de un vector. El pseudocódigo mostrado en el Algoritmo 1 es el pseudocódigo del algoritmo general.

**Entrada:**  $n$  = Número de Vértices,  $p_i$  = Probabilidad inicial.  $p_f$  = Probabilidad final,  $p_v$  = Variación de la probabilidad.

**Salida :** Archivos *.pkl*

```
Medida=open("nombre.pkl","ba"); // Crear y abrir archivos de escritura binaria .pkl.
```

```
for k in range(log n, n – log n, gv, 2) do
    for p in range(0, 1, p0) do
        SW=Crear_Grafica(n, p, k)
        M=Calcular_medida(SW)
        pickle.dump(M, Medida)
    end
end
```

**Algoritmo 1:** Esquema del cálculo de medidas en la red.

Para la subrutina de Crear\_Gráfica, existe un algoritmo en Python que genera automáticamente

redes de tipo  $\mathcal{SW}$  proporcionándole los parámetros  $n, k, p$ , sin embargo, este algoritmo no era lo suficientemente conveniente en cuestiones de tiempo de ejecución, en específico la parte de creación de la matriz de adyacencia, por lo que se programó un nuevo algoritmo para remplazarlo (Algoritmo 2).

```

Entrada:  $n, E(G)$ 
Salida :  $A$ 
for  $i$  in  $range(0,n)$  do
     $A = Crear\_matriz\_de\_ceros(n,n)$ 
    for  $e_{i,j} \in E(G)$  do
         $A[i][j] = 1$ 
         $A[j][i] = 1$ 
    end
end
return  $A$ 

```

**Algoritmo 2:** Matriz de adyacencia

El Algoritmo 3, evita calcular la gráfica complemento de  $G$  para el cálculo de la energía de  $\overline{G}$ .

```

Entrada:  $n, A$ 
Salida :  $\overline{A}$ 
for  $i$  in  $range(0,n)$  do
    for  $j$  in  $range(i,n)$  do
        if  $A[i][j] == 1$  then
             $A[i][j] = 0$ 
             $A[j][i] = 0$ 
        end
        else
             $A[i][j] = 1$ 
             $A[j][i] = 1$ 
        end
    end
end

```

**Algoritmo 3:** Matriz complemento

Para el cálculo de las medidas; grados, coeficiente de agrupamiento, coeficiente de agrupamiento por cuadrados, coeficiente de PageRank, excentricidad, centralidad, centralidad por intermediación y valores propios, se utilizaron algoritmos ya programados en Python, que se encuentran en la biblioteca *networkx*.

Algunos invariantes como: energía, energía por vértice, energía Laplaciana y centralidad por ciclos no se encontraban implementadas, por lo que se realizó el código cuyo pseudocódigo se muestra en los Algoritmos 4, 5 y 7.

Otros algoritmos como el del cálculo de la matriz Laplaciana y borrar caminos de gráficas ya existen pero fueron reemplazados por código propio que trabaja más eficientemente, la reducción del tiempo de ejecución se debe al uso de la biblioteca *numpy* que agiliza el uso de listas en python, el uso de operaciones con conjuntos que reemplazan algunas operaciones con listas y la eliminación de cálculos adicionales en las funciones originales de *python*.

**Entrada:**  $A$   
**Salida :**  $\varepsilon$   
 $[X, V] = eig(A)$   
 $\varepsilon = sum(abs(X))$   
**return**  $\varepsilon$

**Algoritmo 4:** Energía

**Entrada:**  $X, V$   
**Salida :**  $\varepsilon_G(v)$   
 $V = V'$   
 $V = Gram\_Schmidt(V)$   
**if**  $len(V) == 1$  **then**  
    **for**  $e$  **in**  $V$  **do**  
         $suma = sum(e * abs(X))$   
    **end**  
    **else**  
        **for**  $i$  **in**  $range(0, len(X))$  **do**  
             $suma = 0$   
            **for**  $j$  **in**  $range(0, len(X))$  **do**  
                 $suma += V[i][j]^2 * abs(X[j])$   
            **end**  
             $\varepsilon_G = [\varepsilon_G, suma]$   
        **end**  
    **end**  
**end**  
**return**  $\varepsilon_G$

**Algoritmo 5:** Energía por vértices

**Entrada:**  $V$   
**Salida :**  $V^*$   
 $V^* = []$  **for**  $vector$  **in**  $V$  **do**  
     $w1 = vector - sum(producto\_punto(vector, b) * b \text{ for } b \text{ in } base)$   
     $w2 = w1 / norm(W_1)$   
     $V^* = [base, w2]$   
**end**  
**return**  $V^*$

**Algoritmo 6:** Gram Schmidt

```

Entrada:  $\mathcal{S}^W$  =Gráfica,  $n$  = Orden de  $\mathcal{S}^W$ .
Salida : SCC =Lista de longitud  $n$  de las medidas de excentricidad por ciclos.
H=Sin_hojas( $\mathcal{S}^W$ ); // Elimina los vértices de grado menor a dos sin
  modificar sus nombres.
Validos=H.nodes
Longitudes=zeros(( $n$ , $n$ ))
for ( $i = 0; i < \text{len}(\text{Validos}) - 1; i++$ ) do
  for ( $j = i + 1; j < \text{len}(\text{Validos}); j++$ ) do
    G=H.copy()
    Camino1=Busqueda_a_profundidad(G,Validos[i],Validos[j])
    Remover(G,Camino1); // Elimina los aristas del camino de G
    if Es_conexa(G) then
      Camino2=Busqueda_a_profundidad(G,Validos[i],Validos[j])
      Longitudes[Validos[i]][Validos[j]]=len(camino1)+len(camino2)
    end
  end
  SCC=[]
  for ( $i = 0; i < n; i++$ ) do
    Suma=sum(Longitudes [i:])
    if Suma>0 then
      | SCC=[SCC,1/Suma]
    end
    else
      | SCC=[SCC,0]
    end
  end
  return SCC
end

```

#### Algoritmo 7: Centralidad ciclos

Los Algoritmo 10 9, 10, 11 y 12 se implementaron con el fin de buscar gráficas equienergéticas no isomorfas.

```

Entrada: Energía, Grados, Gráficas
Salida : Seleccionados.pkl
Indices=Equienergeticas(Energía,Grados)
if len(indices) > 0 then
  | Guardar_seleccionados(Indices,Gráficas,Energías); // Crea y guarda solo las
  | gráficas seleccionadas.
end
return 0

```

#### Algoritmo 8: Buscar equienergéticas

**Entrada:** Energía, Grados  
**Salida :** Indices  
Energia=Agregar\_indices(Energia)  
Energia\_iguales=[]  
ig=Buscar\_Energias(Energias[0],Energias[1:],Energia\_iguales)  
nombre=Iguales-"\_-energia  
f=open(nombre,"ba")  
eq=Comparar\_grado(ig,grados)  
pickle.dump(eq,f)  
f.close()  
**return** nombre

**Algoritmo 9:** Equienergéticas

**Entrada:** pivote,arreglo,iguales  
**Salida :** iguales  
**while** *len(arreglo)>1* **do**  
    validos=[pivote[0]]  
    pivote=pivote[1] contador=0 indices=[i for i in range(0,len(arreglo)) if  
        arreglo[i][1]==pivote]  
    **for** *i in indices* **do**  
        validos=[validos,arreglo[i-contador][0]]  
        arreglo.pop(i-contador)  
        contador+=1  
    **end**  
    **if** *len(validos)>1* **then**  
        iguales=[iguales,validos]  
    **end**  
    **if** *len(arreglo)>1* **then**  
        pivote=arreglo[0]  
        arreglo=arreglo[1:]  
    **end**  
**end**  
**return** *iguales*

**Algoritmo 10:** Buscar\_Energía

**Entrada:** pivote,arreglo,iguales  
**Salida :** iguales  
indexado=[] **for** *i in range(0,len(lista))* **do**  
    indexado=[indexado,[i,x[i]]]  
**end**  
**return** *indexado*

**Algoritmo 11:** Agregar\_indice

```

Entrada: pivote,arreglo,iguales
Salida : iguales
while len(arreglo)>1 do
    iguales.append(pivote[0])
    pivote=pivote[1]
    indices=[]
    for i in range(0,len(arreglo)) do
        if arreglo[i][1]==pivote then
            indices=[indices,i]
        end
    end
    contador=0 for i in indices do
        arreglo.pop(i-contador)
        contador+=1
    end
    if len(arreglo)==1 then
        pivote=arreglo[0]
        arreglo=arreglo[1:]
    end
end

```

#### Algoritmo 12: Buscar\_Grado

Una vez generadas todas las gráficas y calculadas sus medidas se analizó el comportamiento de esas medidas en comparación con la energía por vértices, para eso se tomó  $X = \{\epsilon_G(v_1), \epsilon_G(v_2), \dots, \epsilon_G(v_n)\}$ , el conjunto de energías por vértices y  $Y = \{m(v_1), m(v_2), \dots, m(v_n)\}$ , algunas de las medidas por vértice de la gráfica que se consideran en el Capítulo 2. Se puede saber que tan relacionados están  $X$  y  $Y$  usando el coeficiente de correlación de Pearson.

**Definición 4.1 (Coeficiente de Correlación de Pearson)** Sea  $X$  y  $Y$  dos variables aleatorias sobre una población, el coeficiente de correlación de Pearson se calcula como:

$$\rho_{X,Y} = \frac{\sigma_X \sigma_Y}{\sigma_{X,Y}} \quad (1)$$

Para  $\sigma_X$  y  $\sigma_Y$  las varianzas respectivas de  $X$  y  $Y$  y  $\sigma_{X,Y}$  la covarianza entre ellas.

Por otra parte, para la búsqueda de posibles gráficas equienergéticas, se generaron 500,000 gráficas de orden 10 con grado promedio  $k = 4, 6$  y  $8$  y probabilidad de reconexión  $p = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  y  $1$ , se verificó que no fueran isomorfos comparando la lista de sus grados ordenados en forma ascendente.

# Capítulo 5

## Resultados

### 1. Análisis del comportamiento de la energía en $\mathcal{S}\mathcal{W}$

Los resultados a continuación muestran un estudio experimental profundo en redes  $\mathcal{S}\mathcal{W}$ , logrado gracias a los algoritmos desarrollados en esta tesis.

Para dar un ejemplo del alcance de los algoritmos, se produjeron 49692 gráficas de orden 1000 con  $p$  variando de 0 a 1 en pasos de 0.01 y  $k$  de  $\log n$  a  $n - \log n$  en pasos de 2, más aún su energía es calculada con una precisión de  $1 \times 10^{-14}$ , para cada gráfica se guardó la siguiente información: aristas, energía total, energía por vértices, energía Laplaciana, grados, coeficiente de agrupamiento, coeficiente de agrupamiento por cuadrados, coeficiente de PageRank, excentricidad, centralidad, centralidad por ciclos, centralidad por intermediación y valores propios.

Los datos de la energía generados para poder construir la gráfica en la Figura 5.1, requirieron aproximadamente 15 días, en dicha gráfica el plano  $(k, p)$  corresponde a la probabilidad de reconexión  $p$  y al grado promedio  $k$ , el eje  $z$  representa a la  $\epsilon(\mathcal{S}\mathcal{W})$ , cada triada  $(k, p, \epsilon)$  corresponde a una gráfica  $\mathcal{S}\mathcal{W} \in \mathcal{S}\mathcal{W}_{(1000, k, p)}$ . Se pudo observar cómo para los casos en que el grado promedio  $k \approx \log n$ ,  $k \approx n$  y la probabilidad de reconexión  $p \approx 0$  (color morado) la energía es reducida en comparación a la de gráficas  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  con  $k \approx n/2$  y  $p \geq 0,5$  (color amarillo). Las curvas de nivel muestran la localización de las posibles gráficas equienergéticas, construir gráficas que puedan ser equienergéticas resulta complicado aun restringiendo  $k$  y  $p$  a valores específicos, por la gran cantidad de posibles gráficas que se pueden generar, la Figura 5.2 complementa lo encontrado en la Figura 5.1 en cuanto a las curvas de nivel.

Para cualquier  $n$  el comportamiento de la energía es similar al descrito por la Figura 5.1. Los

mismos algoritmos se ejecutaron para  $n = 100, 150, 200$  y  $500$ , sin embargo, por cuestiones de espacio no se agregaron a este trabajo .

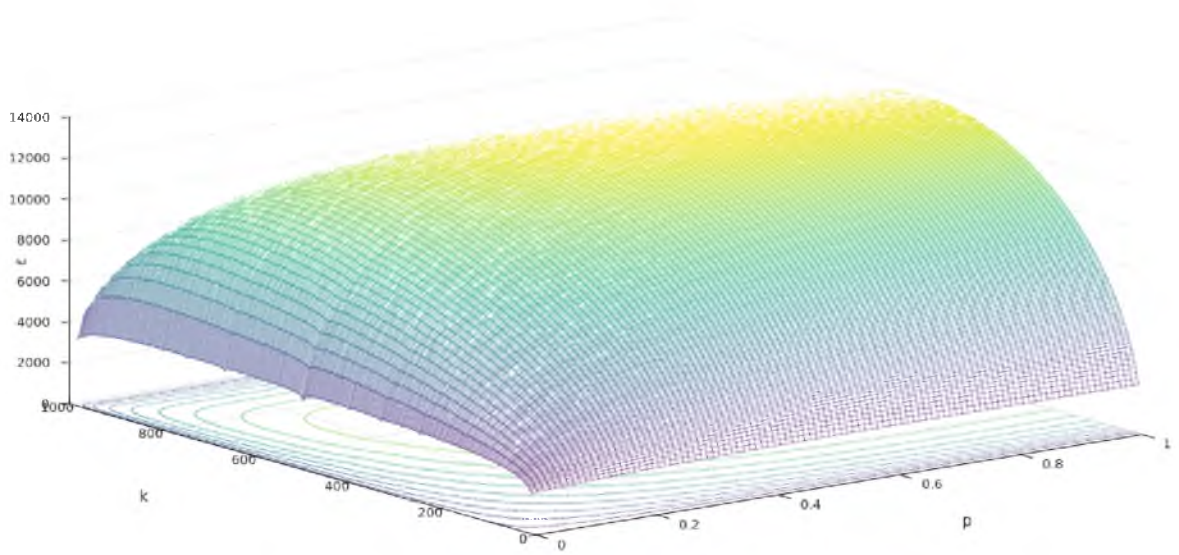


Figura 5.1:  $\epsilon(\mathcal{SW}(1000, k, p))$

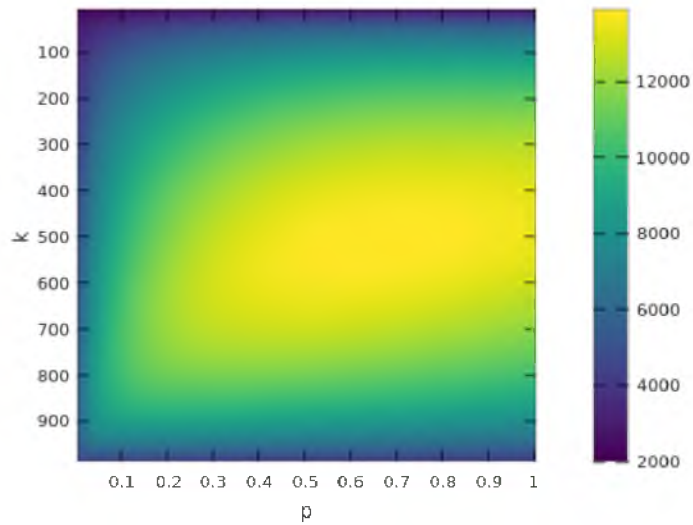


Figura 5.2: Curvas de nivel de  $\epsilon(\mathcal{SW}(n, k, p))$

Para entender mejor la Figura 5.1 la complementamos con lo siguiente: En la Figura 5.3 (a) se describe el crecimiento de la energía para distintos valores de  $n$ , con  $k \approx n/2$  al dividir  $\varepsilon(\mathcal{S}\mathcal{W}_{n,n/2,p})/\varepsilon(\mathcal{S}\mathcal{W}_{n,n/2,0})$ . La velocidad de crecimiento es mayor conforme  $n$  aumenta. En 5.3 (b) para  $n$  y  $k$  fijas y variando  $p$ , la energía no siempre es creciente, disminuye conforme  $p$  se acerca a 1. En comparación con  $\varepsilon(\overline{\mathcal{S}\mathcal{W}})$ , se ve en 5.3 (c) que  $\varepsilon(\overline{\mathcal{S}\mathcal{W}})$  (rojo) es semejante a reflejar la gráfica de  $\varepsilon(\mathcal{S}\mathcal{W})$  en  $p \approx 0.5$ .

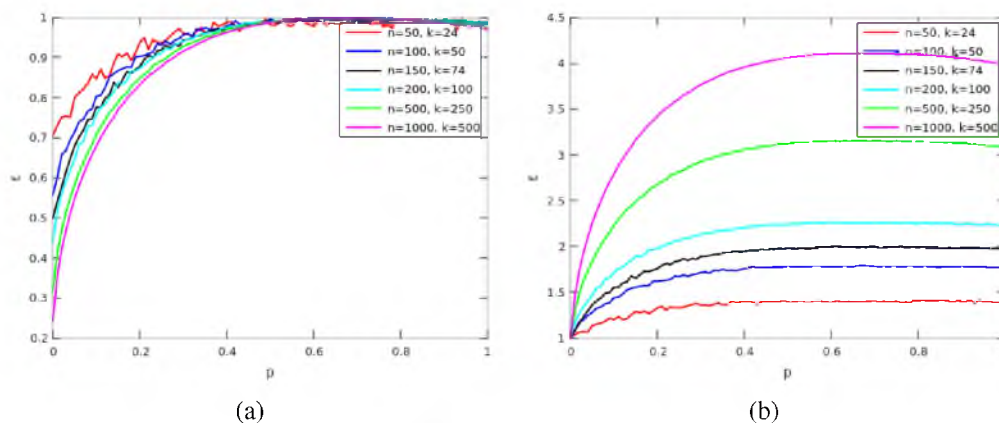


Figura 5.3:  $\varepsilon(\mathcal{S}\mathcal{W})$  al variar  $n$  y  $p$  con  $k \approx n/2$ .

En la Figura 5.4 se observa la simetría que guarda la energía de  $\mathcal{S}\mathcal{W}_{(200,k,0)}$  (azul) y la energía de sus gráficas complemento  $\overline{\mathcal{S}\mathcal{W}}_{(200,k,0)}$  (rojo), con respecto a  $k \approx n/2$ .

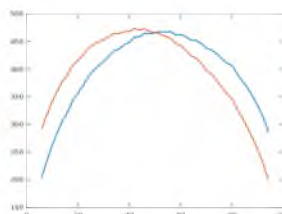


Figura 5.4:

La Figura 5.5 compara los valores de energía obtenidos para gráficas aleatorias de Erdős-Rényi con  $p = 0$ ,  $p = 1$  y número de vértices igual a 1000 variando el valor de  $k$ . Los hundimientos de la energía de  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  al variar  $k$  con  $p = 1$ , son casi simétricos con respecto a  $k = n/2$ , aunque para el lado derecho de  $k = n/2$  la energía es mayor. La diferencia entre los resultados de  $\varepsilon(\mathcal{G}_{(1000,p)})$  y  $\varepsilon(\mathcal{S}\mathcal{W}_{(1000,k,1)})$  en este cálculo se encuentran dentro del intervalo  $[4.3518, 862.20]$ . La zona en la que se observan mayores valores de energía es justamente en donde el grado promedio  $k$  se parece a  $n/2$ , para  $p \gg 0$ , mientras que en  $p = 0$ , la gráfica con  $k = n/2$  tiene menor energía con relación a  $k \approx n/2$ .

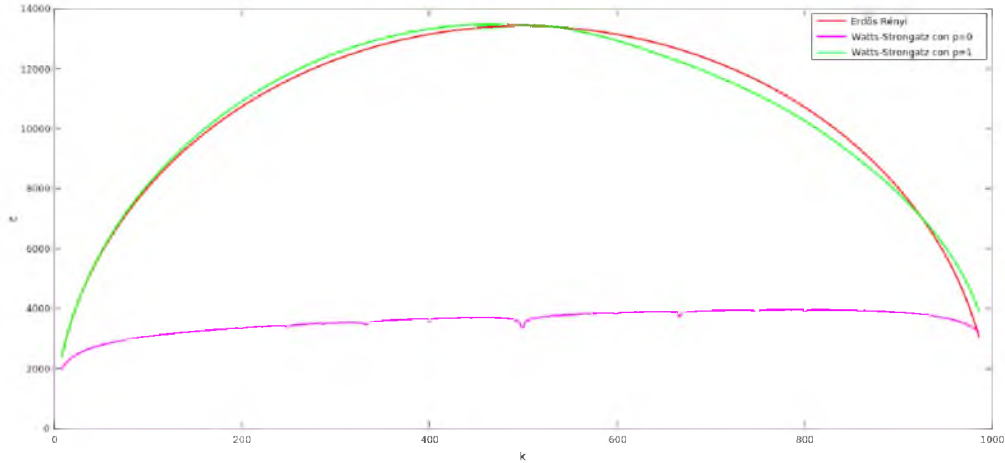


Figura 5.5: Comparación entre  $\varepsilon(\mathcal{G}_{(1000,p)})$  y  $\varepsilon(\mathcal{SW}_{(1000,k,1)})$ .

## 2. Análisis del comportamiento de la energía por vértices en $\mathcal{SW}$

Para observar el comportamiento de la energía por vértice examinamos la distribución de la energía individual dada una gráfica de tipo  $\mathcal{SW}$  con parámetros fijos. Los siguientes histogramas ilustran la distribución de la energía por vértices de gráficas de  $n = 50$ ,  $k$  y  $p$  variando, en el eje  $x$  están colocados los valores de la energía y en el eje  $y$  la frecuencia con que se presenta.  $k$  toma valores de 14, 24 y 36 y  $p$  toma valores en  $p = \{0, 0,3, 0,6, 1\}$ , de izquierda a derecha se varía  $p$  en orden creciente y de abajo hacia arriba se varía  $k$ , es decir, la figura superior derecha corresponde a  $p = 1$  y  $k = 36$ . Puede notarse que la energía por vértice se distribuye normal, excepto para  $k = 0$ , donde todos los vértices toman el mismo valor de energía por vértices, éstas gráficas reafirman que al variar  $k$  para  $p$  fija, el valor de la energía total de  $G$  crece, alcanza un máximo y luego decrece, puede notarse al observar el movimiento de izquierda a derecha y luego otra vez a izquierda de (b), (f) y (j) en la Figura 5.6, también se confirma el comportamiento al variar  $p$ .

Los valores de energía individuales presentan para este tipo de redes mucha consistencia con la energía total, así se observa en la Figura 5.7, es decir, si  $\varepsilon(G) < \varepsilon(H)$  para los vértices individuales  $\max(\varepsilon_G(v)) < \max(\varepsilon_H(u))$ , y similarmente para los valores medio y mínimo.

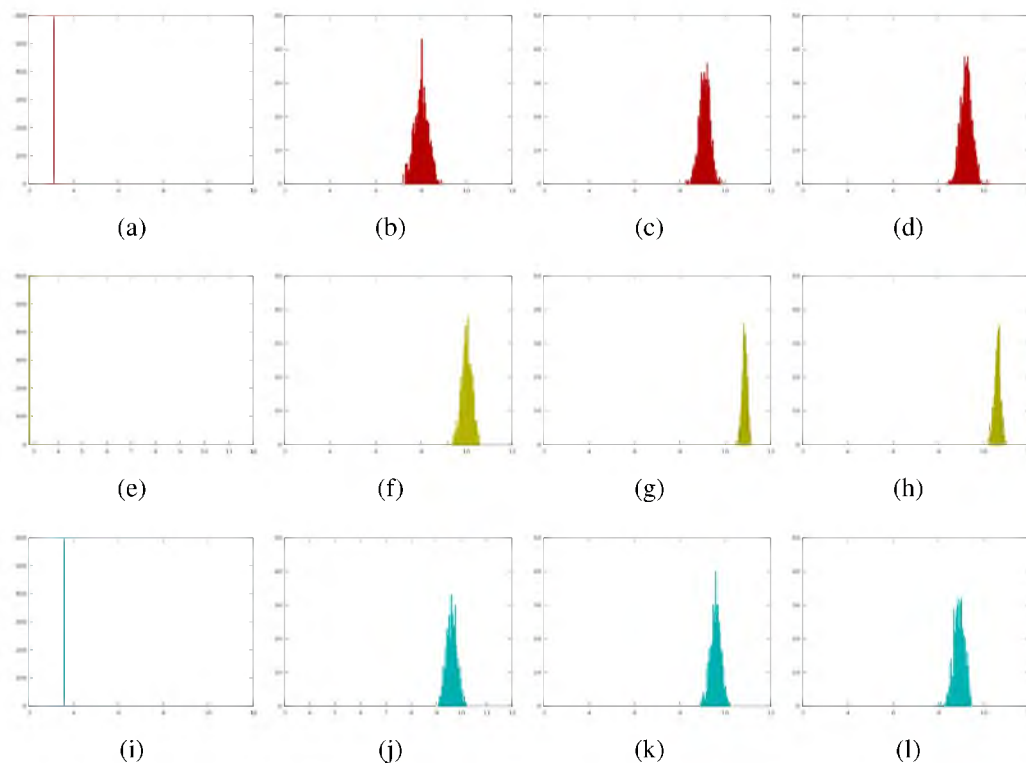
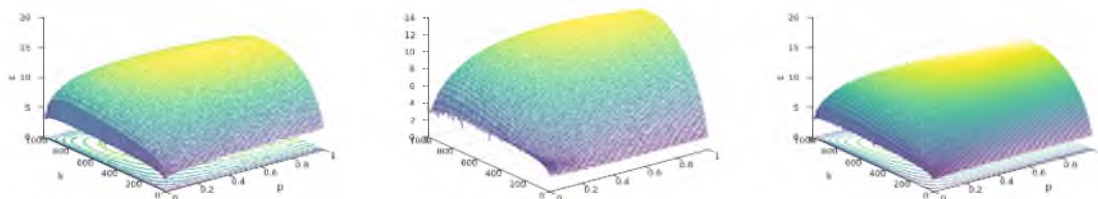


Figura 5.6: Histogramas de energía por vértices.



(a) Máxima energía por vértices    (b) Mínima energía por vértices    (c) Energía por vértices promedio

Figura 5.7:  $\varepsilon(\mathcal{S}\mathcal{W})$  al variar  $n$  y  $p$  con  $k \approx n/2$ .

### 3. Comparación de energías por vértice y otras medidas en redes $\mathcal{S}\mathcal{W}$

#### 3.1. Correlación con el coeficiente de agrupamiento

En el paso 2 del modelo de Watts-Strogatz del conjunto inicial ordenado de vértices  $v_i$ , con  $1 \leq i \leq n$ , se observa que al aumentar la probabilidad de reconexión, los enlaces a los vecinos de

$v_i$  y los enlaces entre sus vecinos desaparecen y en su lugar se crean nuevas conexiones a vértices más alejados a él, en este sentido el diámetro de  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  y el coeficiente de agrupamiento promedio disminuyen al aumentar  $p$ , hasta comportarse de manera similar a una función lineal, para un  $p$  que es más pequeño conforme  $k$  es mas grande, hasta tener  $p = 0$  cuando  $\mathcal{S}\mathcal{W} = K_n$ .

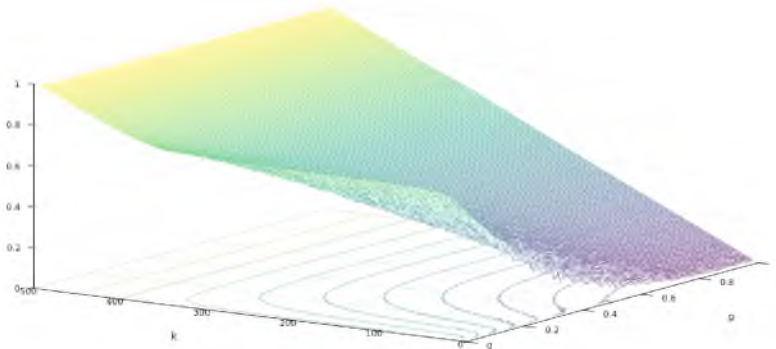
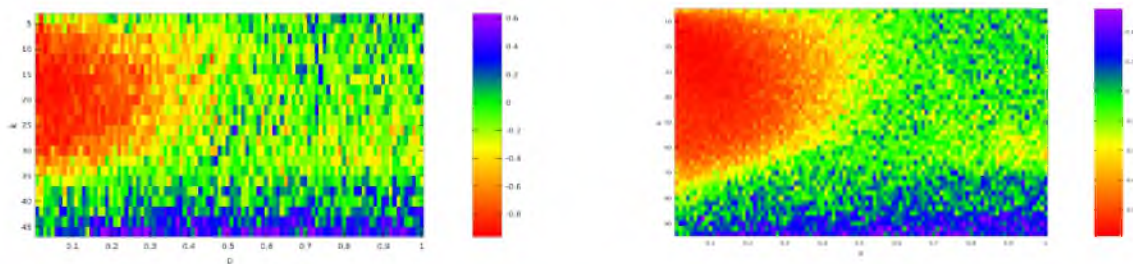


Figura 5.8: Coeficiente de agrupamiento promedio de  $\mathcal{S}\mathcal{W}$ .

La Figura 5.8 muestra los coeficientes de agrupamiento promedio de 24745 redes  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  de 500 vértices, obtenidas al variar  $p$  y  $k$ , la correlación entre los valores individuales de energía en cada vértice y los valores del coeficiente de agrupamiento en cada vértice fueron correlacionados para gráficas con diferentes valores de  $n$ , los valores de correlación son mostrados en la Figura 5.9, el color rojo muestra la relación inversa entre el coeficiente de agrupamiento y la energía en cada vértice, puede observarse que el coeficiente de correlación  $\rho = 1$ , nunca se alcanza y que hay una región importante donde  $\rho = 0$ , mostrando mucha consistencia ante el cambio en el número de vértices.

Los histogramas en la Figura 5.10 muestran la distribución de la energía por vértices para diferentes valores de  $\rho$ .



(a) Para  $\mathcal{S}\mathcal{H}(50, k, p)$

(b) Para  $\mathcal{S}\mathcal{H}(100, k, p)$

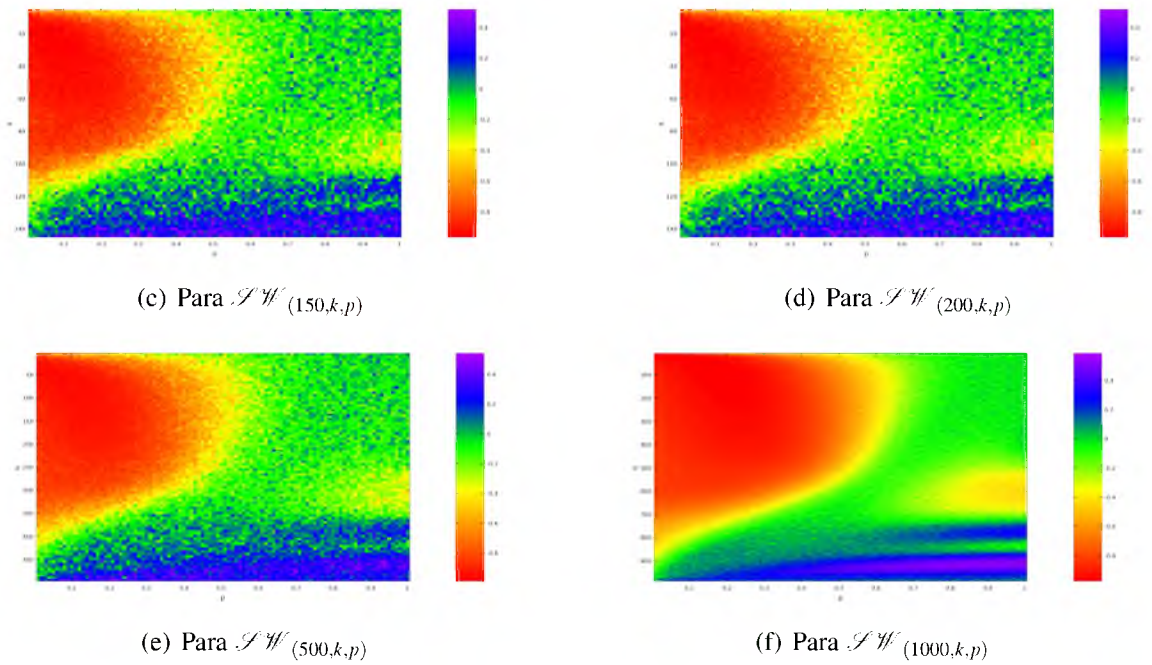


Figura 5.9: Correlación entre coeficiente de agrupamiento y la energía por vértice.

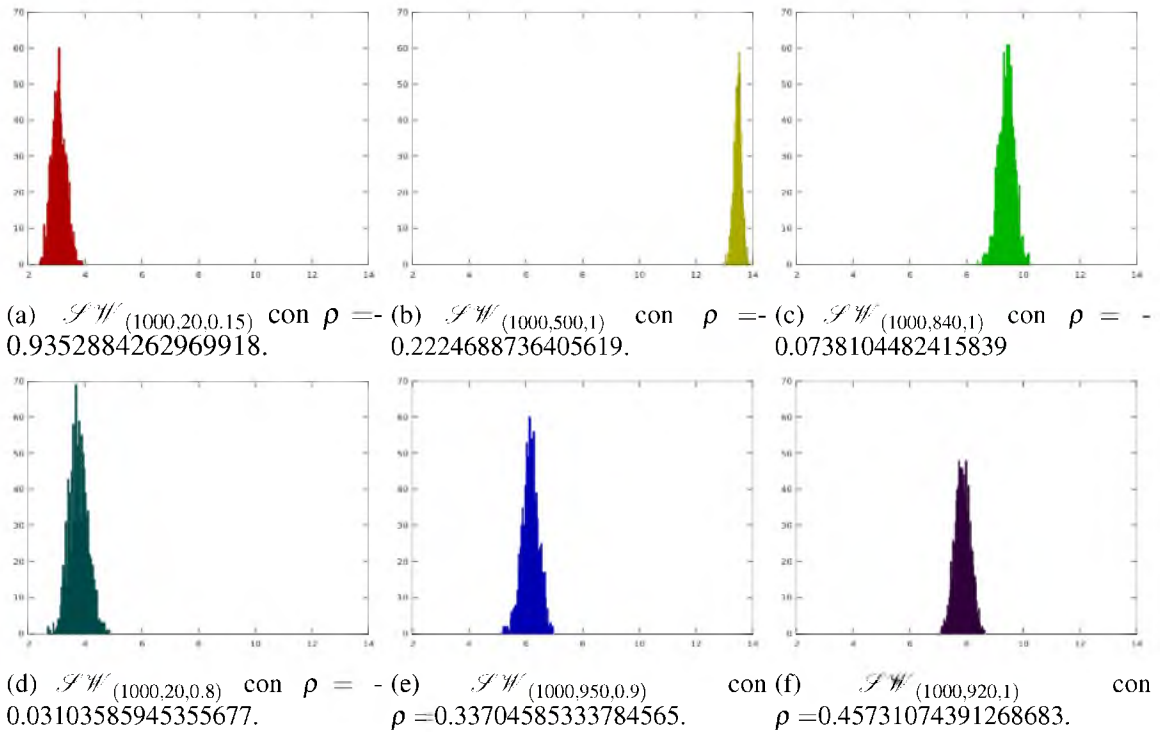


Figura 5.10: Histograma de la distribución de la energía por vértices.

Para observar de forma detallada la relación entre la energía y el coeficiente de agrupamiento mostramos cuatro gráficas de orden 50, mismas que se aprecian en la Figura 5.11. En cada gráfica se indica con colores la variación del coeficiente de agrupamiento de cada vértice y del mismo modo la diferencia de energía a partir de sus tamaños (proporcionales a ella).

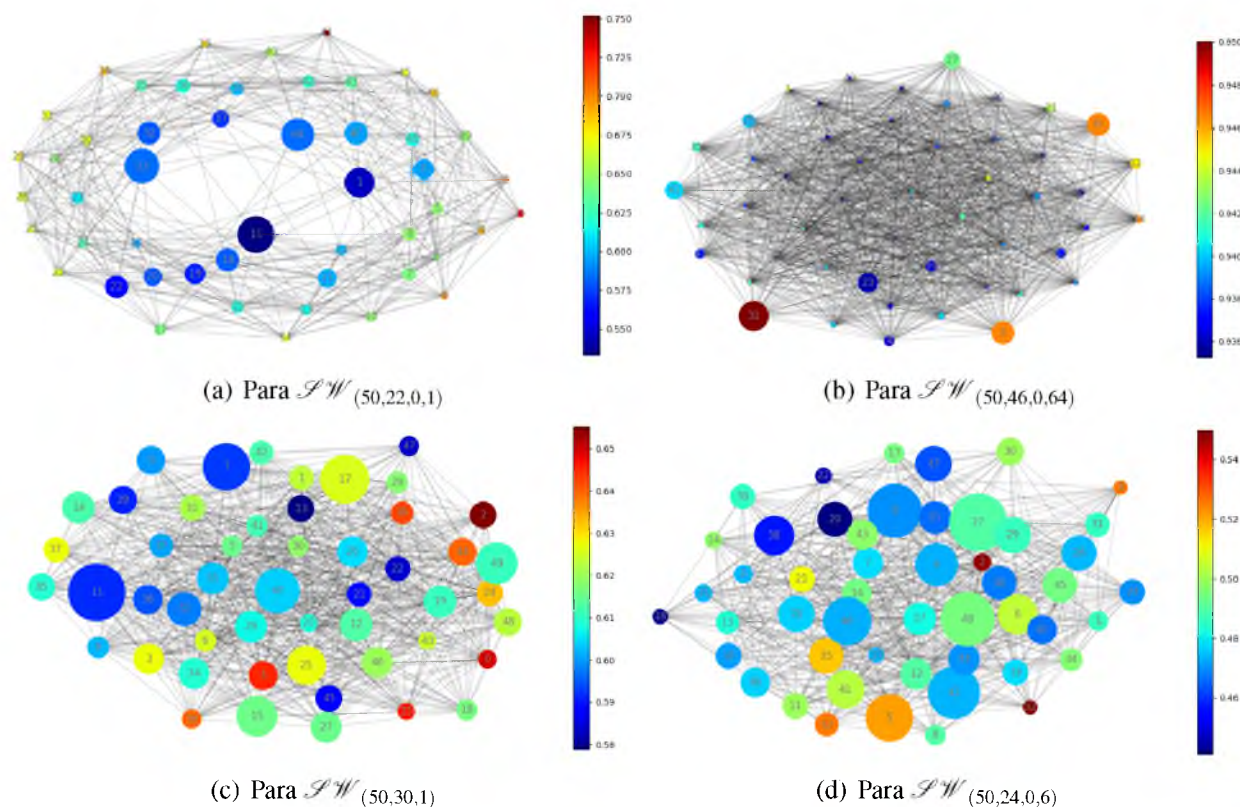


Figura 5.11: Representación de gráficas pertenecientes a distintas zonas del mapa de calor.

Es notorio que en la Figura 5.11 (a) los vértices de menor coeficiente de agrupamiento poseen mayor energía al pertenecer al conjunto de gráficas que viven dentro de la región con coeficiente de correlación negativa (color rojo, Figura 5.9), caso contrario para la Figura 5.11 (b). En 5.11 (c) y 5.11 (d), la diferencia entre la energía de cada vértice es menor, ambas gráficas tienen una energía total alta en comparación al resto del conjunto de gráficas de orden 50, sus valores de  $p$  y  $k$  se encuentran en la región donde  $\rho$  se aproxima a 0, es decir, no hay ninguna relación entre el coeficiente de agrupamiento y la energía, esto explica en parte, porqué el coeficiente de agrupamiento promedio no es una buena medida para entender la energía total de una gráfica.

En los cuadros 5.2, 5.1, 5.3 y 5.4 se resumen los datos de los vértices de máxima y mínima energía y coeficiente de agrupamiento de las gráficas de la Figura 5.11.

Energía por vértices			
	$v_i$	$\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i)$	$\mathcal{C}_i$
$\max(\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	16	3.105451687301621	0.5333333333333333
$\min(\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	2	2.419298568562135	0.7076023391812866
Coeficiente de agrupamiento por vértice			
$\max(\mathcal{C}_i)$	41	2.4414358457285172	0.7516339869281046
$\min(\mathcal{C}_i)$	16	3.105451687301621	0.5333333333333333

Cuadro 5.1: Para la gráfica de la figura 5.11 (a) con  $\epsilon(\mathcal{S}\mathcal{W}) = 134.455618035582$  y  $\rho = -0.89451$ .

Energía por vértices			
	$v_i$	$\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i)$	$\mathcal{C}_i$
$\max(\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	31	3.0626884897735187	0.95
$\min(\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	44	2.0811885681524864	0.9362244897959183
Coeficiente de agrupamiento por vértice			
$\max(\mathcal{C}_i)$	31	3.0626884897735187	0.95
$\min(\mathcal{C}_i)$	3	2.284890254765488	0.9352451433857539

Cuadro 5.2: Para la gráfica de la Figura 5.11 (b) con  $\epsilon(\mathcal{S}\mathcal{W}) = 122.61456964929877$  y  $\rho = 0.56236$ .

Energía por vértices			
	$v_i$	$\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i)$	$\mathcal{C}_i$
$\max(\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	11	3.6499076938233785	0.5913978494623656
$\min(\epsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	23	3.190131552456137	0.6467236467236467
Coeficiente de agrupamiento por vértice			
$\max(\mathcal{C}_i)$	2	3.371494021204792	0.5913978494623656
$\min(\mathcal{C}_i)$	13	3.371504781662879	0.6467236467236467

Cuadro 5.3: Para la Figura 5.11 (c) con  $\epsilon(\mathcal{S}\mathcal{W}) = 169.00072523402966$  y  $\rho = -0.32438$ .

Energía por vértices			
	$v_i$	$\varepsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i)$	$\mathcal{C}_i$
$\max(\varepsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	27	3.6527942241646727	0.4894179894179894
$\min(\varepsilon_{\mathcal{S}\mathcal{W}}(v_i))$	3	3.108695604186274	0.5263157894736842
Coeficiente de agrupamiento por vértice			
$\max(\mathcal{C}_i)$	32	3.1193171025993025	0.5497835497835498
$\min(\mathcal{C}_i)$	20	3.4670189541019916	0.4408866995073892

Cuadro 5.4: Para la gráfica de la Figura 5.11 (d) con  $\varepsilon(\mathcal{S}\mathcal{W}) = 169.52205171086408$  y  $\rho = -0.14127$ .

### 3.2. Correlación con el coeficiente por cuadrados

En la Figura 5.12 (a) se muestra el comportamiento en general del coeficiente por cuadrados para redes  $\mathcal{S}\mathcal{W}_{(200,n,p)}$ , a la derecha, en 5.12 (b), se observan los valores de correlación de la energía por vértices y el coeficiente por cuadrados, en la mayor parte de los casos la energía por vértices y el coeficiente de agrupamiento por cuadrados posee correlación negativa, incluso para  $k \approx n/2$ , donde el coeficiente de agrupamiento tradicional en la misma zona transita de correlación negativa a ligeramente positiva.

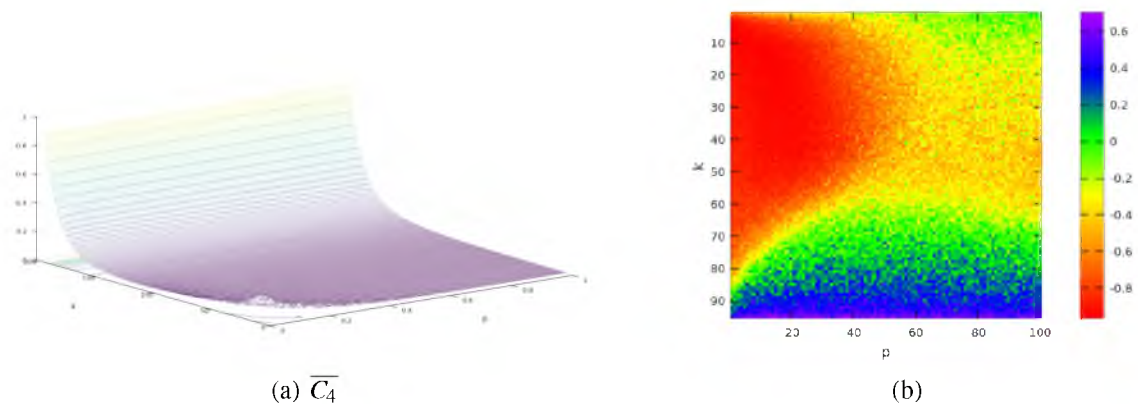


Figura 5.12: Correlación entre coeficiente de agrupamiento por cuadrados y energía por vértice.

### 3.3. Correlación de la energía por vértices y otras medidas de la gráfica.

En esta subsección se compara la energía por vértices con medidas bien conocidas en gráficas y se les calcula el coeficiente de correlación de Pearson con la finalidad de describir el comportamiento

de la energía en base a estas medidas en zonas específicas de  $k$  y  $p$ . La Figura 5.13 muestra el comportamiento de la centralidad al variar  $p$ ,  $k$  y la correlación entre energía por vértices y centralidad, a diferencia de las medidas anteriores hay valores de  $(p, k)$  donde se alcanza  $\rho = 1$  y  $\rho = -1$ , tal es el caso de  $(0.5, 40)$  y  $(0.5, 160)$ .

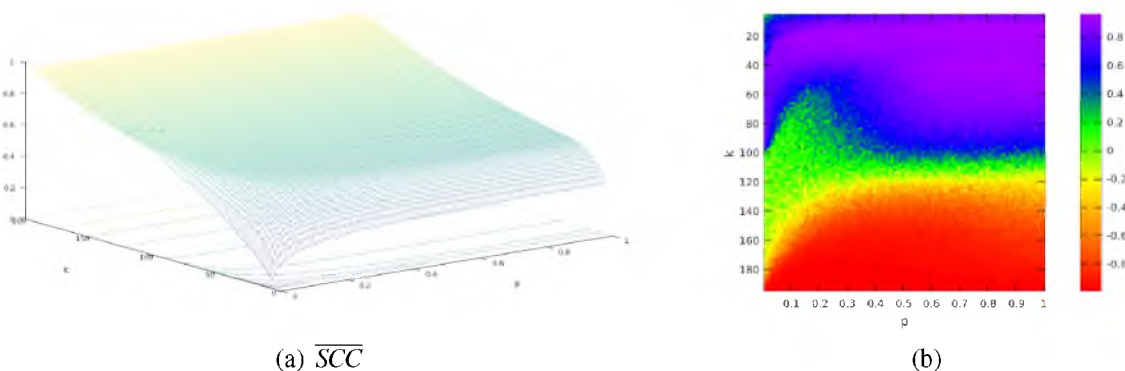


Figura 5.13: Correlación entre centralidad por ciclos y energía por vértices.

El comportamiento de la centralidad por ciclos es muy similar al descrito por la centralidad por cercanía, aunque esta última es una medida de robustez de la gráfica, esto se debe que en las redes de mundo pequeño no se da el fenómeno de fragilidad a borrados maliciosos de vértices (la gráfica es robusta al borrado aleatorio de vértices pero puede volverse disconexa al eliminar vértices específicos de ella) tal como sucede en gráficas de Barábasi-Albert.

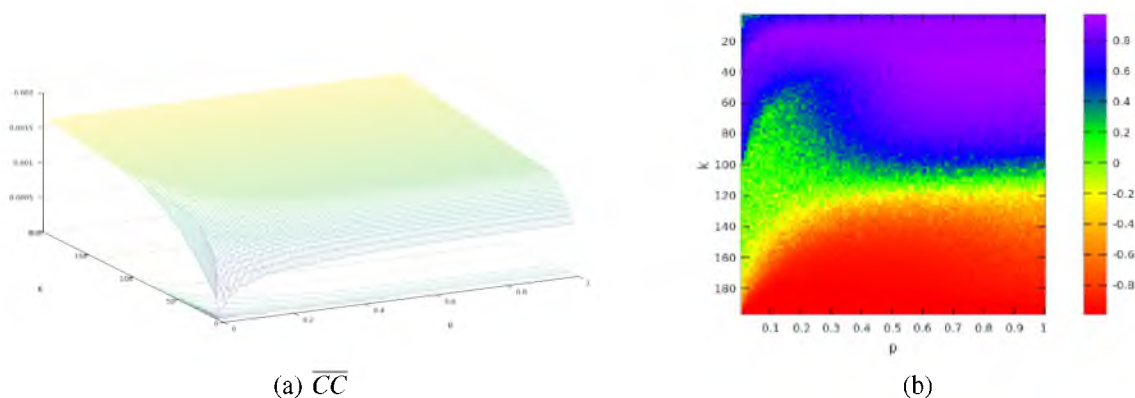


Figura 5.14: Correlación entre energía por vértices y centralidad.

La Figura 5.15 muestra el comportamiento de la excentricidad al variar  $p$ ,  $k$  y la correlación entre energía por vértices y excentricidad, el valor de ésta se indetermina en muchos puntos

(color morado en (a)) debido a que la varianza entre la excentricidad de los vértices de la red es aproximadamente cero.

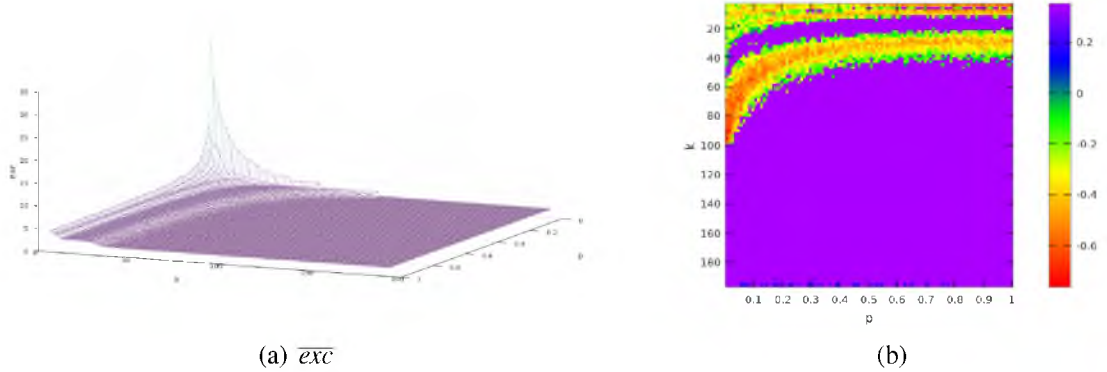


Figura 5.15: Correlación entre excentricidad y energía por vértices.

Para medir el PageRank en los vértices de cada gráfica producida, se utilizó un  $\alpha = 0,9$ , las variaciones de la medida de PageRank son muy pequeñas pero tiene un efecto significativo al compararse con la energía por vértices. El mismo mapa de color se obtiene para el grado del vértice correlacionado con su energía individual.

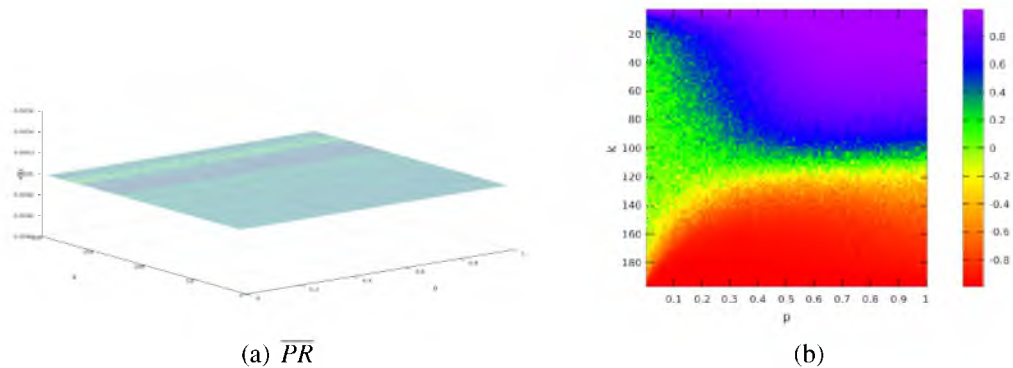


Figura 5.16: Correlación entre la energía por vértices y PageRank

La Figura 5.17 (a) es similar a la Figura 5.15 (a) pero la correlación con la energía por vértices es completamente diferente y no se indetermina en ningún punto.

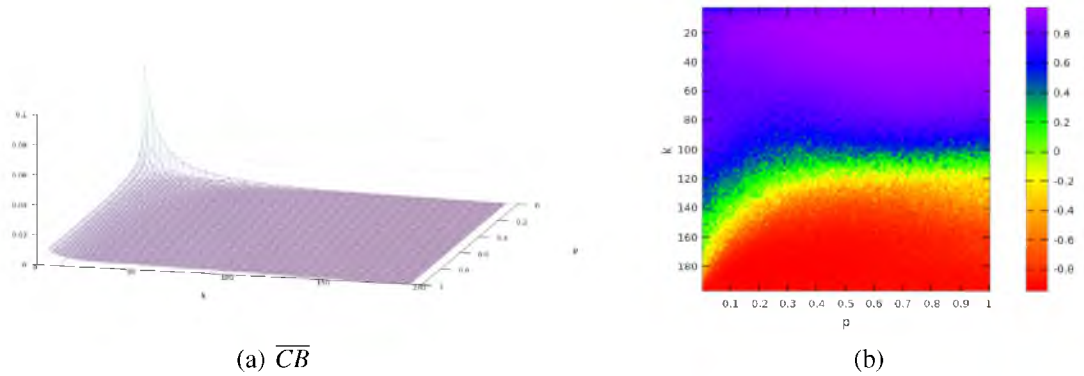


Figura 5.17: Correlación entre la energía por vértices y la centralidad por intermediación.

## 4. Energía Laplaciana

A diferencia de la energía en función de la matriz de adyacencia de la gráfica  $G$ , la energía Laplaciana es una medida de centralidad en el grado promedio  $k = \frac{2m}{n}$ , para  $\mathcal{S}\mathcal{W}$ .

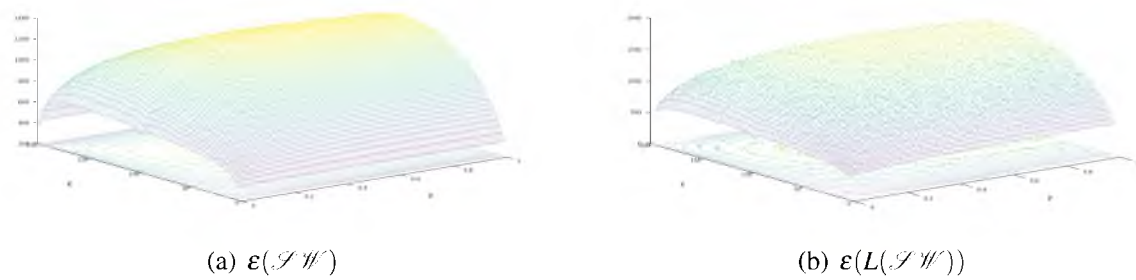


Figura 5.18: Energía Laplaciana para  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  de orden 200.

El comportamiento de la energía Laplaciana es similar al de la energía definida de manera tradicional. En la Figura 5.18 (b) se observa mayor ruido que en la Figura 5.18 (a).

La entropía de valores propios para la energía y energía Laplaciana es completamente diferente, mientras que para la energía Laplaciana es decreciente al aumentar  $k$ , para  $H_{M,1}$  es creciente al aumentar  $k$  y al disminuir  $p$ , este fenómeno se observa en la Figura 5.19.

Observe la similitud entre la Figura 5.9 y la Figura 5.20. La correlación en mayor parte es negativa aunque a diferencia de ésta, no existen regiones bien definidas por un color para  $n = 200$ .

Para  $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_n$ , valores propios de la matriz Laplaciana de cualquier gráfica  $G$ ,  $\beta_3$  se denomina conectividad espectral o parámetro de Fiedler [14], mientras más pequeño sea mas

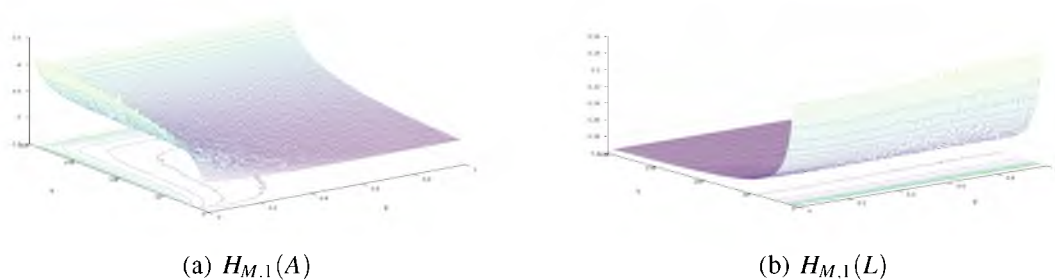


Figura 5.19: Valores de entropía  $H_{M,1}$ .

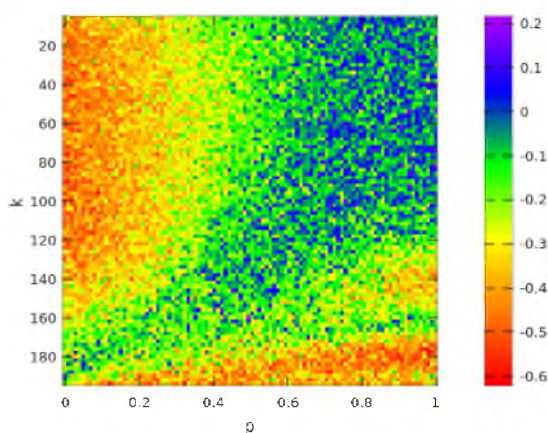


Figura 5.20: Correlación entre energía Laplaciana y coeficiente de agrupamiento

sincronizada estará la red y tendrá un aspecto más modular. En nuestro caso  $\beta_3$  es positivo, puesto que las redes  $\mathcal{S}W_{(n,k,p)}$  se consideran conexas.

El comportamiento de los  $\beta_3$  es inverso al del diámetro de  $\mathcal{S}W_{(200,k,p)}$  al variar  $p$  y  $k$  pero muy similar a la correlación existente entre energía por vértice para la definición tradicional y la Laplaciana.

Al aumentar el  $k$ , por obvias razones, el valor de  $\beta_3$  también aumenta, pero no de manera uniforme, pues en la misma zona en que en la Figura 5.20 el coeficiente de correlación es casi nulo, los valores de  $\beta_3$  poseen ruido (Figura 5.21).

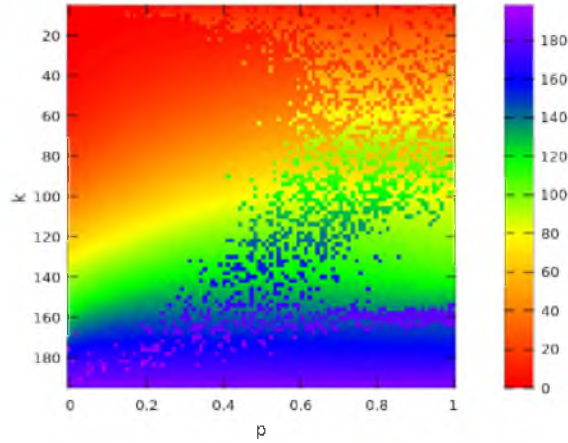


Figura 5.21:  $\beta_3$  para  $\mathcal{SW}_{(200,k,p)}$

## 5. Algunas subgráficas de interés para la aproximación de la energía en una gráfica

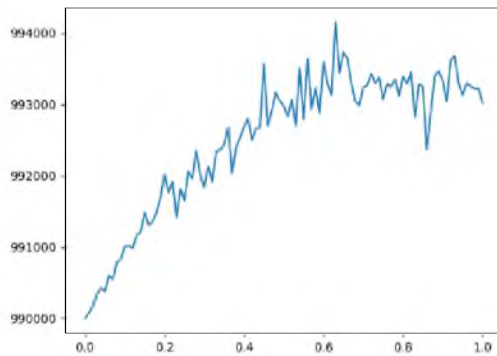
Para  $\mathcal{SW}$  de 200 vértices con grado promedio  $k = 100$ , se analiza el número de subgráficas consideradas por E. Estrada en [13]. La cota propuesta en este artículo considera el cálculo de la cardinalidad de subgráficas específicas, algunas de ellas son:

- $P_3$ : Caminos de 3 vértices.
- $C_4$ : Ciclos de longitud 4.
- $C_3$ : Ciclos de longitud 3.
- $P_4$ : Caminos de 4 vértices.
- $S_{1,3}$ : Es la gráfica estrella de tres vértices unidos a un vértice central.
- $D_4$ : Es la gráfica diamante.
- $F$ : Es un cuadrado con un nodo pendiente.
- $H$ : Consiste en dos triángulos conectados por un vértice.
- $C_6$ : Ciclo de longitud 6.

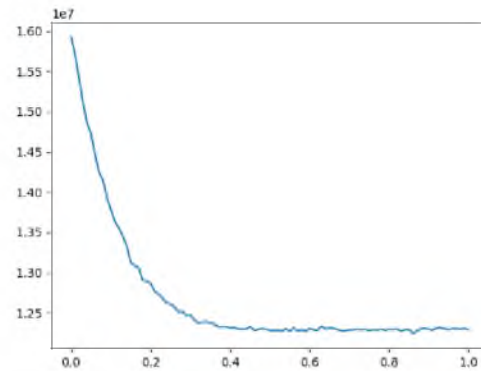
$$\varepsilon(G) \leq \left(\frac{5\lambda_1}{16}\right)n + \left(\frac{15\lambda_1^4 - 5\lambda_1^2 + 1}{8\lambda_1^5}\right)m - \left(\frac{5\lambda_1^2 - 3}{4\lambda_1^5}\right)P_3 - \left(\frac{5\lambda_1^2 - 6}{2\lambda_1^5}\right)C_4 + \left(\frac{3}{2\lambda_1^5}\right)C_3 +$$

$$\left(\frac{3}{8\lambda_1^5}\right)P_4 + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right)S_{1,3} + \left(\frac{9}{4\lambda_1^5}\right)D_4 + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right)F + \left(\frac{3}{2\lambda_1^5}\right)H + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right)C_6 \quad (1)$$

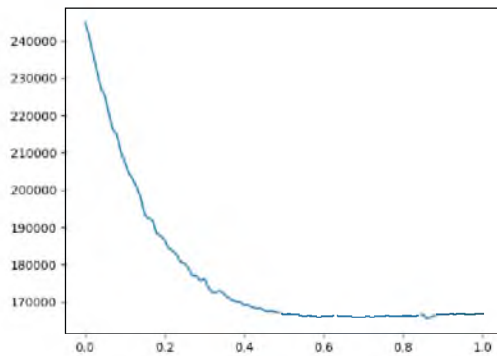
Estas subgráficas poseen una relación directa o inversa de acuerdo al signo del coeficiente correspondiente a cada una de ellas en la ecuación 1.



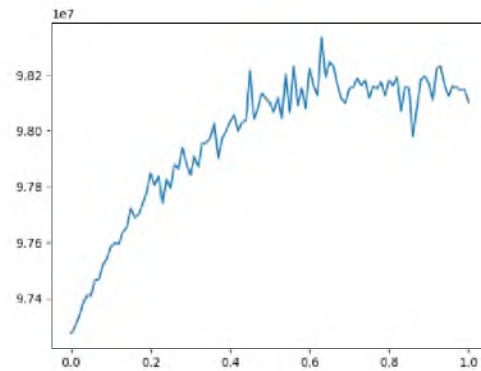
(a)  $|P_3|$



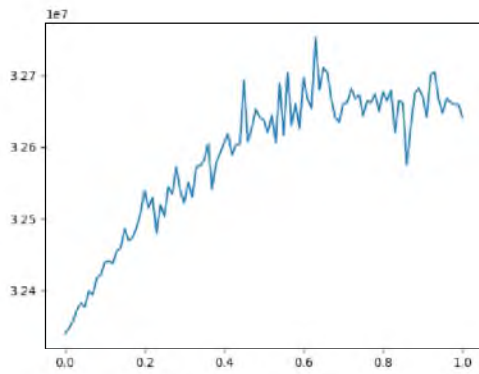
(b)  $|C_4|$



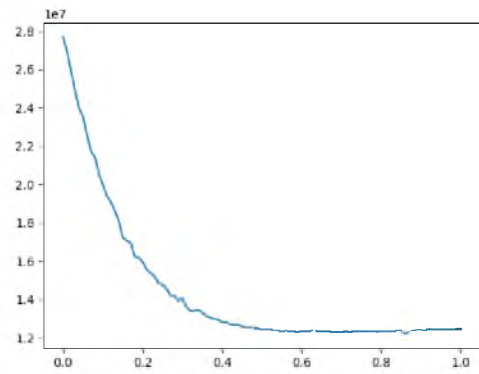
(c)  $|C_3|$



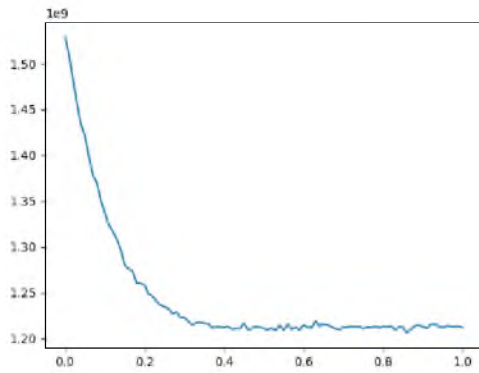
(d)  $|P_4|$



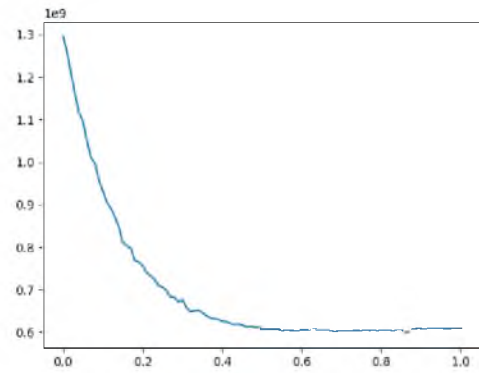
(e)  $|S_{1,3}|$



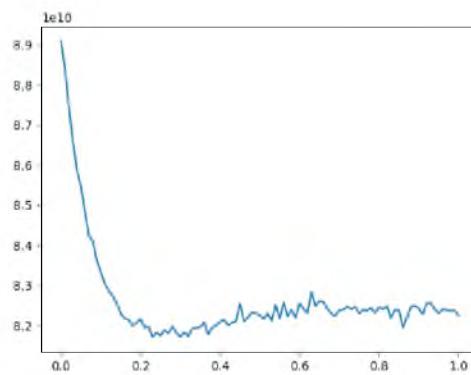
(f)  $|D_4|$



(g)  $|F|$



(h)  $|H|$



(i)  $|C_6|$

Figura 5.22: Número de subgráficas en  $\mathcal{S}\mathcal{W}$  con  $n = 200$  y  $k = 100$ .

# Capítulo 6

## Conclusiones

Durante el desarrollo de este trabajo se revisaron conceptos de teoría de las gráficas, medidas invariantes en gráficas, probabilidad y álgebra lineal.

Los algoritmos desarrollados en el transcurso de este trabajo generan gráficas aleatorias de mundo pequeño de forma más eficiente que los algoritmos de las librerías de Python, de la misma manera, calculan invariantes para dichas gráficas mejorando los tiempos conocidos y el uso de memoria, además se realizaron programas para nuevos invariantes como la centralidad por ciclos, la energía y energía Laplaciana de una gráfica y su energía por vértices.

Los programas realizados permitieron ahondar en el conocimiento de la energía y energía por vértices en las redes aleatorias de mundo pequeño, se relacionó la energía por vértices con medidas como: grados, coeficiente de agrupamiento, coeficiente de agrupamiento por cuadrados, coeficiente de PageRank, excentricidad, centralidad, centralidad por ciclos, centralidad por intermediación y valores propios.

Para las redes generadas variando los parámetros de grado promedio ( $k$ ) y probabilidad de reconexión ( $p$ ) se representaron los datos encontrados mediante una gráfica tridimensional que muestra el comportamiento de la energía total, en ella se observa que para  $n$  y  $p$  fijas, el valor de la energía al incrementar  $k$  tiene un comportamiento parabólico, cuyo máximo se alcanza alrededor de  $k = n/2$ , en contraste, para  $n$  y  $k$  fijos al variar  $p$  la gráfica de la energía se comporta como una función logarítmica que alcanza un máximo y decrece casi imperceptiblemente.

Se analizó el comportamiento de las energías individuales variando  $k$  y  $p$ . Dado  $n$ ,  $k$  y  $p$  fijos, si  $p$  es diferente de 0, la energía por vértices muestra una distribución normal, los valores mínimo, máximo y medio de las energías por vértices en una gráfica de este tipo cambian consistentemente

con la energía total.

Para las medidas del coeficiente de agrupamiento y coeficiente de agrupamiento por cuadrados se determinaron las regiones de  $p$  y  $k$  donde la correlación de dichas medidas y la energía por vértices toman diferentes valores, destaca la región donde la correlación tiene valor  $-1$ , es decir, para mayores valores de energía por vértice el valor de la medida es menor, e inversamente, para menores valores de energía por vértice el valor de la medida es mayor, dicha región es aproximadamente aquella donde  $p < 0.5$  y  $k < n/2$ ; la región donde la correlación tiene valor cercano a  $0$  se encuentra alrededor de  $p > 0.5$  y  $k < n/2$ ; otra cuestión notable es que no hay una región en que el valor de la correlación se aproxime a  $1$ .

Para las medidas de centralidad, centralidad por ciclos, PageRank y grado también se determinaron las regiones de  $p$  y  $k$  donde la correlación de dichas medidas y la energía por vértices toma diferentes valores, la región donde la correlación tiene valor  $0$  es aproximadamente aquella alrededor de  $k = n/2$  y valores de  $p$  pequeños; la región donde la correlación tiene valor cercano a  $-1$  se encuentra alrededor de  $k > n/2$ ; y la región donde la correlación tiene valor cercano a  $1$  se encuentra alrededor de  $k < n/2$ .

Un comportamiento diferente se observa para la correlación entre la energía por vértices y la centralidad por intermediación donde la región con correlación  $0$  es mínima y se alcanzan valores de  $1$  y  $-1$  para valores pequeños y grandes de  $k$ , respectivamente. Algo totalmente diferente a todo lo mencionado se obtiene para la relación entre excentricidad y energía por vértices.

En cuanto a la energía Laplaciana se observó el comportamiento del valor de la correlación entre energía Laplaciana y coeficiente de agrupamiento, así como el tercer valor propio de la matriz Laplaciana, conocido como parámetro de Fiedler, se sabe que mientras más pequeño sea más sincronizada estará la red y tendrá un aspecto más modular, los valores más pequeños en este caso se obtuvieron para  $k > n/2$  y los más grandes para  $k$  cercano a  $n$ .

Aunque no se presenta en esta tesis, se está realizando la interfaz gráfica que facilita el acceso a las funciones que calculan las medidas consideradas para las redes de mundo pequeño, por otra parte, en este trabajo solo se utilizó la correlación de Pearson, por lo que queda pendiente encontrar la relación entre la energía por vértices y otras medidas invariantes en redes utilizando otro tipo de correlación.

Dada la gran cantidad de información que logró producirse al generar redes aleatorias y calcular sus invariantes hay todavía muchos datos que pueden ser procesados y mostrados en formas diferentes que no fueron agotadas en este trabajo.

Finalmente, con las herramientas computacionales desarrolladas en esta tesis se puede hacer el mismo análisis para redes de Albert-Barabási, hacer una comparación con las redes de mundo pequeño y para ambos modelos seguir con la búsqueda de propiedades interesantes y patrones para gráficas equienergéticas.

# Bibliografía

- [1] O. Arizmendi, B. C. Luna-Olivera, M. Ramírez-Ibáñez, *Coulson integral formula for the vertex energy of a graph*, arXiv 1809.07833v1 [math], México, 2018.
- [2] O. Arizmendi, J. Hidalgo, O. Juárez, *Energy of a vertex*, arXiv 1805.05483v1 [math], México, 2016.
- [3] R. Balakrishnan, F. Emmert-Streic, *The energy of a graph*, Lin. Algebra Appl., Bharathidasan Universit, 2004.
- [4] A. Barabási and R. Albert, *Emergence of scaling in complex networks*, Science, University of Notre Dame, 1999.
- [5] M. Barthelemy, *Small-world networks: Evidence for a crossover picture*, Phys. Rev. Lett. 82: 3180, Boston University, 1999.
- [6] A. Barrat, M. Weigt, *On the properties of small-world network models*, Springer-Verlag, 2000.
- [7] C.A. Coulson, *On the calculation of the energy in unsaturated hydrocarbon moleculless*, Cambridge Philosophical Society, Inglaterra, 1940.
- [8] D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, *Spectra of Graphs – Theory and Application*, Academic, New York, 1980.
- [9] M. Dehmer, L. Sivakumar, K. Varmuza, *Uniquely discriminating molecular structures using novel eigenvalue-based descriptors*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem.,67, 147–172, 2012.
- [10] R. Diestel, *Graphs Theory*, Board, 4, Universität Hamburg, 2014.
- [11] R. Durrett, *Raph Graph Dinamic*, Cambridge University Press, Inglaterra, 2007.
- [12] P. Erdős, A.Rényi, *On random graphs I*, Publicationes Mathematicae, Budapest, 1959.

- [13] E. Estrada and M. Benzi , *What is the meaning of the graph energy after all?*, arXiv:1704.00779v1 [math], University of Strathclyde, 2017.
- [14] M. Fiedler, *Algebraic Connectivity of Graph*, Czech. Math. J., 23 298-305, 1973.
- [15] I. Gutman, *The Energy of a Graph*, Sekt. Forschungsz, Graz 103, 1–22, Serbia, 1978.
- [16] Y. Hou, I. Gutman, *Hyperenergetic line graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 43, 29–39, 2001.
- [17] G. Indulal, A. Vijayakumar, *On a pair of equienergetic graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 55, 83–90, 2006.
- [18] J.H. Koolen, V. Moulton, *Maximal energy graphs*, Adv. Appl. Math. , University of Bielefel, 2001.
- [19] V. Kraus, M. Dehmer, F. Emmert-Streic, *Probabilistic inequalities for evaluating structural network measures*, Sciencedirec, Alemania, 2014.
- [20] X. Li, H. Ma, *Hypoenergetic and strongly hypoenergetic trees*, arXiv:0905.3944 [math], 2009.
- [21] X. Li, Y. Shi, I. Gutman, *Graph Energy*, Springer Science+Business Media, Serbia, 2012.
- [22] B. J. McClelland, *Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of  $\pi$ -electron energies*, J. Chem. Phys., The University of Salford, 1971.
- [23] V. Nikiforov, *The energy of  $C_4$ -free graphs of bounded degree*, arXiv:0711.3497 [math], University of Memphis, 2008.
- [24] P. G. Lind, Marta C. González, J. Herrmann, *Cycles and clustering in bipartite networks*, Physical Review, 2005.
- [25] L. Page, S. Brin, R. Motwani, T. Winograd, *The PageRank Citation Ranking: Bringing Order to the Web*, Technical Report, Stanford InfoLab, 1998.
- [26] E. Sampathkumar, *On duplicate graphs*, J. Indian Math. Soc., 37, 285–293, 1973.
- [27] H.B. Walikar, H.S. Ramane, P.R. Hampiholi, *On the Energy of a Graph*, Allied, New Delhi, pp. 120–123, 1999.
- [28] D.H. Watts, S.H Strogatz, *Collective dynamics of "small-world" networks*, Nature, USA, 1998.

- [29] L. Xu, Y. Hou, *Equienergetic bipartite graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 57, 363–370, 2007.
- [30] B. Zhou, M. Dehmer, F. Emmert-Streic, *Lower bounds for energy of quadrangle-free graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. , South China Normal University, 2006.
- [31] X. Zhou, X. Liang, J. Z. Shusen Zhang, *Cycle Based Network Centrality*, Springer Nature, Beijing, 2018.
- [32] L. Ye, R. Chen, *Ordering of trees with given bipartition by their energies and Hosoya indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 52, 193–208, 2004.
- [33] Z. You, B. Liu, *On hypoenergetic unicyclic and bicyclic graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 61, 479–486, 2009.
- [34] Z. You, B. Liu, I. Gutman, *Note on hypoenergetic graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 62, 491–498, 2009.