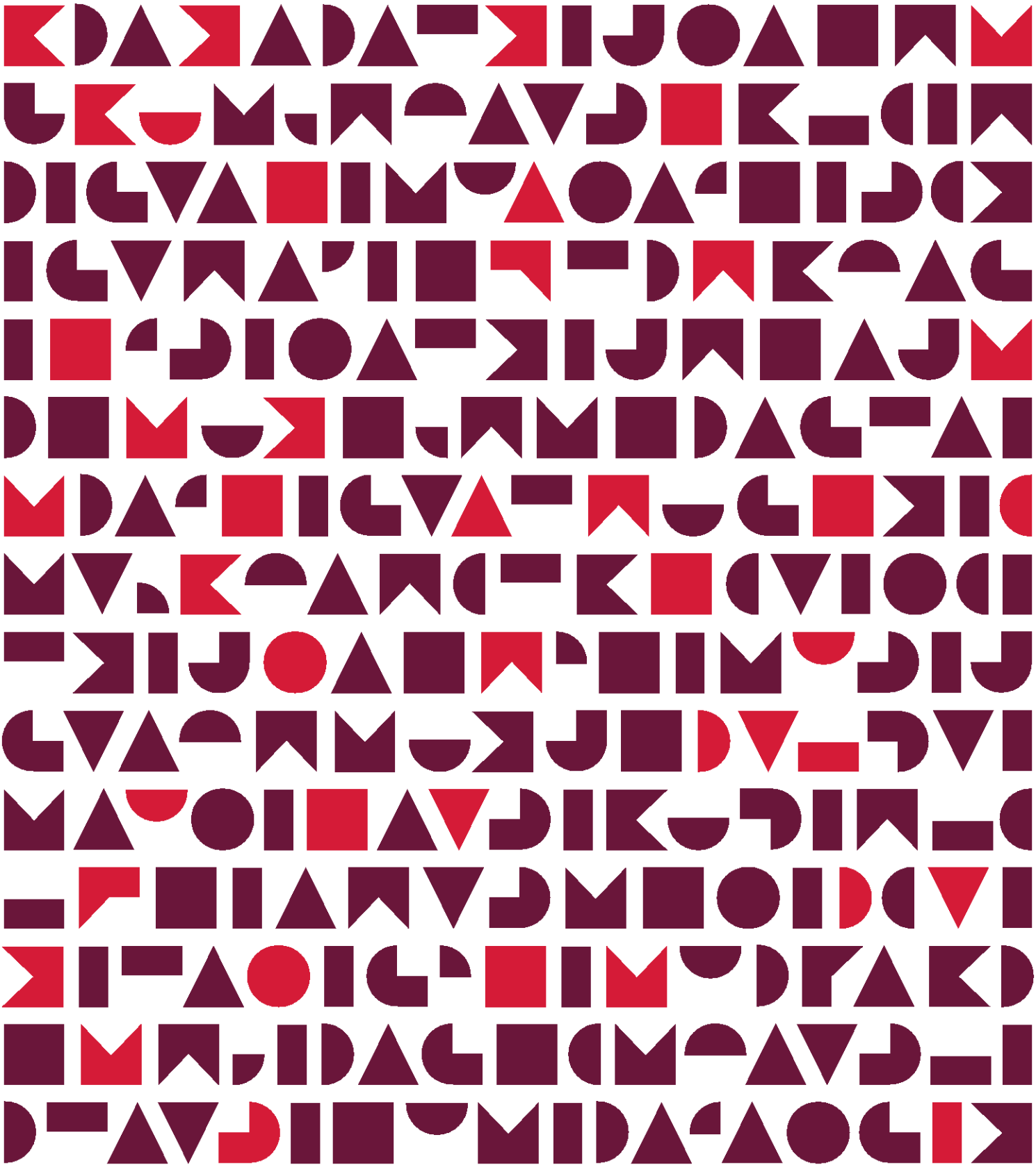

VI JMDA

VI Jornadas de Matemática Discreta y Algorítmica

21-23 de julio de 2008 Departament de Matemàtica Universitat de Lleida

ISBN: 978-84-8409-263-6
DL: L-1.014-2008

© Ediciones i Publicaciones de la UdL, 2008
© del texto: los autores
Editores: Josep Conde, Joan Gimbert, Josep M. Miret, Ramiro Moreno, Magda Valls

Diseño de portada: Martí Pujolàs

Impresión: Service Point

Grafos Planares Autosimilares como Modelos de Redes Complejas *

F. Comellas[1]

Departament de Matemàtica Aplicada IV
Universitat Politècnica de Catalunya
comellas@ma4.upc.edu

Resumen. En este trabajo presentamos una familia de grafos planares, modulares y autosimilares, con propiedades pequeño mundo y de invariancia de escala. Los parámetros básicos de los grafos son comparables a los de redes asociadas a sistemas complejos y por lo tanto los grafos constituyen buenos modelos para este tipo de redes. Como que su parámetro de apiñamiento o *clustering* es nulo, esta familia de grafos constituye una construcción explícita en contraposición a la caracterización en la literatura de las redes jerárquicas modulares que se basa en una relación del parámetro de apiñamiento de los vértices inversamente proporcional al grado.

Palabras clave: Redes complejas, Grafos autosimilares, Redes modulares, Grafos jerárquicos.

1 Introducción

En numerosos estudios recientes se ha constatado que muchas de las redes asociadas a sistemas complejos, como la World Wide Web, Internet, la red telefónica, redes de transporte (incluyendo las redes de distribución de energía o agua), redes biológicas y sociales, etc., pueden clasificarse en una nueva categoría que ahora se conoce como "redes pequeño mundo con invariancia de escala" (*small-world scale-free*), véase [1,10] y referencias allí citadas. Estas redes presentan a la vez una distancia media entre nodos pequeña, así como un diámetro reducido, con relación a una red aleatoria con el mismo número de nodos y enlaces, y también en ciertos casos un apiñamiento de nodos o *clustering* relativamente elevado. (El coeficiente de apiñamiento de un nodo es la fracción de posibles enlaces entre sus vecinos que realmente están presentes en la red. La media de este parámetro para todos los nodos se conoce como coeficiente de agrupamiento de la red.) Otra de sus características comunes es que la distribución del número de enlaces de los nodos sigue una ley potencial y se dice que las redes presentan invariancia de escala (son *scale-free*) en

* Trabajo subvencionado por el Ministerio de Educación y Ciencia y el Fondo Europeo para el Desarrollo Regional (FEDER) gracias al proyecto TEC2005-03575.

contraste con una distribución tipo Poisson característica de los modelos aleatorios clásicos. Además, y gracias a la introducción reciente de una medida de fractalidad para grafos, se ha determinado que las redes reales son a menudo autosimilares [14,15]. Ciertas de estas redes se denominan jerárquicas siendo esta propiedad un reflejo de la modularidad de los sistemas que modelan.

Si bien la mayoría de modelos en teoría de grafos que se han publicado son probabilísticos, en los últimos años también se han propuesto modelos deterministas realizados a menudo con construcciones iterativas en que, a cada paso, se añade uno o varios vértices que se conectan a subestructuras existentes en el grafo (por ejemplo en los llamados k-árboles [3]). Otro método que se ha considerado produce grafos mediante la duplicación de ciertas de sus subestructuras, por ejemplo en [4]. Aquí proponemos una familia de grafos que generaliza estos métodos al añadir en cada iteración una estructura más compleja que un simple vértice. El resultado es una familia de grafos planares, modulares y autosimilares, con propiedades pequeño mundo y de invariancía de escala y que son un contraejemplo en la caracterización habitual de grafos jerárquicos. Una construcción similar a la que presentamos aquí, pero basada en triángulos y que presenta un coeficiente de agrupamiento elevado, puede consultarse en [18].

2 Grafos jerárquicos modulares

Diversos autores han venido en llamar grafos jerárquicos a aquellos grafos que presentan una estructura modular que se traduce en una jerarquía en los grados según una distribución potencial. Además consideran que la signatura principal de la jerarquía modular es un comportamiento del coeficiente de apiñamiento con relación al grado según la ley $C(k) \propto 1/k$, véase [7,16]. En esta sección introducimos una familia de grafos modulares y jerárquicos, con invariancia de escala, que tienen la característica de ser planares, y presentar un coeficiente de apiñamiento nulo, demostrando la existencia de grafos jerárquicos que no verifican la relación anterior entre el coeficiente de apiñamiento y el grado de sus vértices.

Modelos deterministas simples de redes jerárquicas han aparecido publicados en [11,12]. Estos modelos consideran la unión de forma recursiva de diversas estructuras básicas (usualmente grafos completos) mediante aristas que las conectan a un vértice raíz. Estos y otros grafos jerárquicos se han considerado en el modelado de redes metabólicas en [9,13]. También aparece modularidad y jerarquía de vértices en modelos basados en k-árboles, o árboles de cliques, en los que a cada paso se añade uno o varios vértices individuales que se conectan a ciertos subgrafos [7,5,17]. La introduccion del llamado *producto jerárquico de grafos* en [6] permite una generalización y un estudio riguroso de algunos de estos modelos.

En [14,15], Song, Havlin y Makse relacionan la propiedad de invariancia de escala con la autosimilitud y ven que muchos grafos autosimilares correspondientes a sistemas complejos reales presentan una dimensión fractal estableciendo una relación entre esta dimensión y el exponente de la ley potencial de los grados. Sin embargo, un modelo clásico de grafo con invariancia de escala, el modelo de adjunción preferente de Barábasi-Albert [1], que muchos autores consideran un modelo indicado para estos sistemas, presenta una dimensión fractal nula. Esta constatación no debe extrañar, ya que el modelo carece de modularidad, consecuencia de su proceso de construcción.

A continuación detallamos la construcción de una familia de grafos que se basa en un proceso iterativo que introduce ciertas subestructuras en cada paso permitiendo la formación de módulos que resultan en un grafo final con estructura autosimilar.

2.1 Algoritmo de generación del grafo $H(t)$

Construimos el grafo como se indica a continuación: Para $t = 0$, $H(0)$ es C_4, un ciclo de longitud 4. Para $t \geq 1$, $H(t)$ se obtiene a partir de $H(t-1)$ considerando todos aquellos de sus ciclos C_4 cuyos vértices no han sido introducidos en la misma iteración (llamamos *ciclo generador* a un ciclo C_4 que verifica esta propiedad y *ciclo pasivo* al ciclo C_4 que no la cumple) y conectando vértice a vértice a cada uno de estos ciclos generadores un nuevo ciclo C_4. Esta operación equivale a añadir al grafo un cubo Q_3 e identificar vértice a vértice el ciclo generador con los de una de sus caras, ver la Figura 1. El proceso se repite hasta que el grafo alcanza el orden deseado.

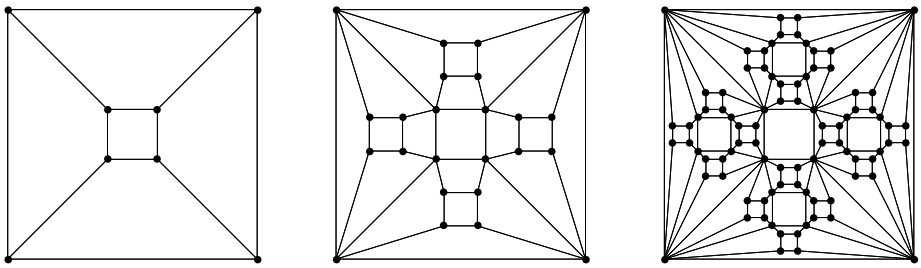

Figura 1. Grafos $H(t)$ correspondientes a las iteraciones $t = 1, 2$ y 3.

2.2 Construcción recursiva modular equivalente

El grafo $H(t)$ también puede ser definido como sigue: Para $t = 0$, $H(0)$ es el ciclo C_4. Para $t \geq 1$, $H(t)$ se forma tomando cuatro copias de $H(t-1)$ y

uniéndolas a cuatro caras de un cubo Q_3 (dejando dos caras opuestas libres) identificado los vértices de cada cara con los de un ciclo pasivo inicial de cada uno de los $H(t-1)$, ver la Figura 2.

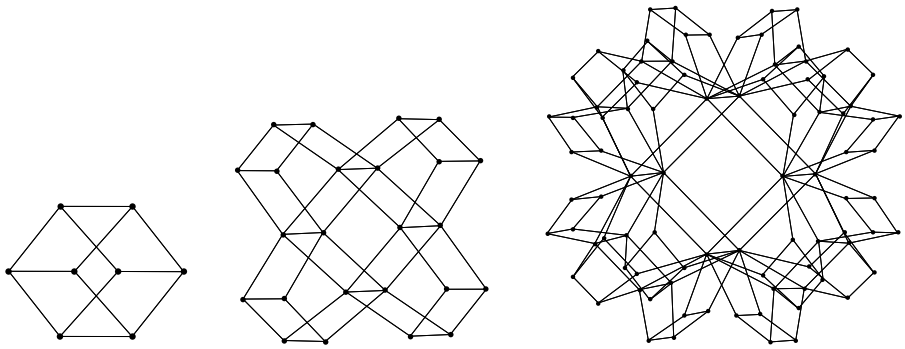

Figura 2. Construcción modular del grafo $H(t)$ para $t = 1, 2$ y 3. En el paso t, conectamos cuatro copias de $H(t-1)$ a las cuatro caras de un cubo Q_3, dejando dos caras opuestas libres. En el texto se describen los detalles.

2.3 Propiedades de $H(t)$

Orden y tamaño de $H(t)$.— Utilizamos la siguiente notación: $\tilde{V}(t)$ y $\tilde{E}(t)$ denotan, respectivamente, el conjunto de vértices y aristas introducidos en el paso t. $\tilde{C}(t)$ indica el número de ciclos generadores C_4 en el paso t (y que se usaran para producir el grafo $H(t+1)$.

Observemos que en cada iteración, todo ciclo generador es reemplazado por cuatro nuevos ciclos generadores y un ciclo pasivo. Es decir: $\tilde{C}(t+1) = 4 \cdot \tilde{C}(t), t \geq 1$ y $\tilde{C}(0) = 1$. Luego $\tilde{C}(t) = 4^t$. Además cada ciclo generador introduce en la siguiente iteración cuatro vértices y ocho aristas nuevas. Es decir,$\tilde{V}(t) = 4 \cdot \tilde{C}(t-1) = 4 \cdot 4^{t-1}$ y $\tilde{E}(t) = 8 \cdot \tilde{C}(t-1) = 8 \cdot 4^{t-1} = 2 \cdot 4^t$ y por lo tanto:

$$|V(t)| = \sum_{i=0}^{t} \tilde{V}(t) = \sum_{i=0}^{t} 4 \cdot 4^{t-1} = \frac{4^{t+1}+8}{3}$$
$$|E(t)| = \sum_{i=0}^{t} \tilde{E}(t) = \sum_{i=0}^{t} 2 \cdot 4^{t} = \frac{2 \cdot 4^{t+1}+4}{3} \qquad (1)$$

Distribución de grados.— Inicialmente, en $t = 0$, el grafo está constituido por un ciclo generador y sus cuatro vértices tienen grado dos.

Cuando un nuevo vértice i se añade al grafo en la iteración t_i ($t_i \geq 1$), éste tiene grado 3. Denotamos por $C(i,t)$ el número de ciclos generadores en la iteración t que crearán nuevos vértices que se conectarán al vértice i en el paso

Paso	Vertices	Aristas	Núm. de ciclos generadores
0	4	4	1
1	8	12	4
2	24	44	16
3	88	172	64
...	...	...	...
t	$\frac{4^{t+1}+8}{3}$	$\frac{2\cdot 4^{t+1}+4}{3}$	4^t
...	...	...	...

Tabla 1. Número de vértices, aristas y ciclos generadores de $H(t)$ en cada paso.

$t+1$. En el paso t_i, en que se introduce el vértice i, vemos que $C(i,t_i)=2$. Según el proceso de construcción del grafo, en cada iteración, cada nuevo vecino de i forma parte dos ciclos generadores en los que i también participa. Si denotamos como $k(i,t)$ el grado del vértice i en el paso t, entonces tenemos la siguiente relación: $C(i,t)=k(i,t)-1$.

Calculamos ahora $C(i,t)$. Tal como hemos visto anteriormente, cada ciclo generador en que i participa produce dos nuevos ciclos generadores donde también está i. Es decir $C(i,t)=2\cdot C(i,t-1)$. Gracias a la condición inicial $C(i,t_i)=2$, tenemos que $C(i,t)=2^{t-t_i+1}$. Por lo tanto, el grado del vértice i en el paso t es

$$k(i,t)=2^{t-t_i+1}+1. \tag{2}$$

Los cuatro vértices del paso 0 siguen un proceso ligeramente distinto que el indicado anteriormente. Observamos que en este caso $C(i,0)=2^t$ y $k(i,t)=2^t+1$. Luego, en el paso t, los cuatro vértices iniciales del grafo tienen el mismo grado que los introducidos en el paso 1. De la ecuación (2)

Num. vertices	Grado	Paso
4^t	3	t
4^{t-1}	5	$t-1$
...	...	...
4^{t-i}	$2^{i+1}+1$	$t-i$
...	...	...
4	2^t+1	1
4	2^t+1	0

Tabla 2. Distribución de vértices y grados y paso en que se incorporan al grafo $H(t)$.

y Tabla 2 vemos que el grafo presenta una distribución de grados discreta y por ello utilizaremos la técnica descrita por Newman en [10] para determinar la probabilidad acumulada $P_{\text{cum}}(k)$ que un vértice tenga grado k: $P_{\text{cum}}(k)=\sum_{\tau\le t_i}|V(\tau)|/|V(t_i)|=(4^{t_i+1}+8)/(4^{t+1}+8)$.

Substituyendo t_i, a partir de la ecuación (2), en la expresión anterior $t_i = t+1-\ln(k-1)/\ln 2$ tenemos que $P_{\rm cum}(k) = (16\cdot 4^t\cdot(k-1)^{-2}+8)/(4^t+8)$, que para valores grandes de t, permite escribir que $P_{\rm cum}(k) \sim k^{1-\gamma_k} = k^{-2}$, por lo que la distribución de grados, para grafos grandes, sigue una ley potencial con exponente $\gamma_k = 3$. Estudios de redes asociadas a circuitos electrónicos (que presentan planaridad, modularidad y un apiñamiento bajo) muestran valores del exponente próximos a 3.0 [8,10].

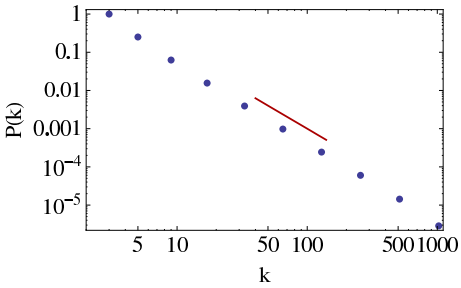

Figura 3. Gráfica log-log de la distribución acumulada de grados para un grafo con $|V| = 1398104$ vértices. La linea de referencia corresponde a una pendiente de -2.

Diámetro.— A cada paso introducimos, por cada ciclo generador, cuatro nuevos vértices que constituyen un nuevo ciclo C_4 (y están entre si a distancia máxima 2, como también lo están los del ciclo generador al que se unen). Al estar todos ellos unidos directamente al grafo de la iteración anterior, en el peor caso el diámetro crecerá exactamente en dos unidades. Luego $D_t = D_{t-1}+2$. $t \geq 2$. Como que $D_1 = 3$, obtenemos que El diámetro de $H(t)$ és $D_t = 2\cdot t+1$ si $t \geq 1$.

S*trength o carga de un vértice* .— La carga de un vértice está asociada en la literatura a recursos o propiedades asociadas al mismo, como por ejemplo el número total de publicaciones de un autor, en el caso de la red del número de Erdös, el número de pasajeros anuales en un aeropuerto para la red de aeropuertos, etc. Aquí asociaremos a los vértices el área del ciclo pasivo determinado por los cuatro vértices que se introducen al grafo en un paso determinado del proceso de construcción del mismo. Para ello suponemos una representación planar equilibrada del grafo. Así en el instante inicial el área és $\mathcal{A}_0$ y denotamos $\mathcal{A}_t$ al área del ciclo pasivo que se introduce en el paso t. Establecemos, por convención, que en cada paso el área de éste ciclo es $1/5$ del área del ciclo al cual se conecta (puesto que la introducción del ciclo pasivo va asociada a la introducción simultanea de cuatro ciclos generadores) y de esta forma tenemos que $\mathcal{A}_t = (\frac{1}{5})^t\mathcal{A}_0$. Un vértice i introducido en t_i tendrá carga $s(i,t_i) = (\frac{1}{5})^{t_i}\mathcal{A}_0$ que mantendrá en pasos posteriores $t > t_i$. Dado que nos interesa encontrar la distribución de cargas de todos los vértices del grafo en el paso t, vemos que $s(i,t_i) = (\frac{1}{5})^{t_i-t}\cdot\mathcal{A}_t$. Usando ahora la ecuación (2) obte-

nemos la siguiente ley potencial en la correlación entre la carga y el grado de un vértice:

$$s(i,t) = \frac{1}{5} \cdot \mathcal{A}_t \cdot (k(i,t) - 1)^{\ln 5/\ln 3}, \tag{3}$$

que para valores altos del grado k implica que, $s(k) \sim k^{\ln 5/\ln 3}$.

Valores del exponente similares a este han sido observados en la relación entre la carga y el grado de nodos en redes reales como la de aeropuertos, Internet o la red de colaboración de científicos [2].

Si realizamos un cálculo paralelo al de la distribución de grados efectuado antes, encontramos que la distribución de carga sigue también una ley potencial con exponente:

$$\gamma_s = 1 + 2\frac{\ln 2}{\ln 5}. \tag{4}$$

Se ha determinado que en el caso de grafos con pesos con una correlación no lineal entre la carga y el grado $s(k) \sim k^{\beta}$ y si las distribuciones de grados y carga obedecen a leyes potenciales, $P(k) \sim k^{-\gamma_k}$ y $P(s) \sim s^{-\gamma_s}$, entonces existe una relación general entre γ_k y γ_s dada por $\gamma_s = \frac{\gamma_k}{\beta} + \frac{\beta-1}{\beta}$ [2]. Como en la familia de grafos que consideramos $\gamma_k = 3$ y $\beta = \ln 5/\ln 3$. Entonces de la relación anterior, el exponente de la distribución de cargas resulta ser $\gamma_s = 3\frac{\ln 2}{\ln 3} + \ln 2(\frac{\ln 5}{\ln 2} - 1)/\ln 5$, obteniendo el mismo valor de γ_s (4) que hemos calculado directamente a partir de la distribución de cargas.

3 Conclusiones

La familia de grafos introducida y estudiada en este trabajo tiene como características principales la planaridad, la modularidad, la existencia de una jerarquía de grados, y que los grafos son pequeño-mundo y constituyen un ejemplo de grafos jerárquicos con coeficiente de apiñamiento nulo. La combinación de modularidad con características de invariancia de escala se presenta en muchas redes reales asociadas a organismos vivos (por ejemplo redes de interacción proteina-proteina) y también en ciertas redes sociales y tecnológicas [12,13,8,10]. El hecho que este modelo presenta apiñamiento nulo lo hace interesante en estudios en los que se quiera aislar las influencia mutua de otras propiedades. El carácter determinista de estos grafos, frente a los modelos aleatorios considerados en muchas ocasiones, facilita el cálculo exacto de muchos de los parámetros.

Por otra parte, variaciones simples del mismo permitirían la introducción de apiñamiento. Por ejemplo, añadiendo a los ciclos pasivos una arista se introducen dos triángulos por ciclo que crean apiñamiento sin perder la planaridad. La substitución de los ciclos pasivos for grafos completos K_4 produce grafos con coeficiente de apiñamiento relativamente elevado, pero en este caso los grafos ya no son planares.

Referencias

[1] R. Albert, A.-L. Barabási. Statistical mechanics of complex networks, *Rev. Mod. Phys.* 74:47–97, 2002.

[2] A. Barrat, M. Barthélemy, R. Pastor-Satorras, A. Vespignani. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 101:3747, 2004.

[3] L.W. Beineke, R.E. Pippert. Properties and characterization of k-trees. *Mathematika* 18:141–151, 1971.

[4] F. Chung, L. Lu, T.G. Dewey, D.J. Galas. Duplication models for biological networks. *J. Comput. Biol.* 10(5):677–87, 2003.

[5] F. Comellas, G. Fertin, A. Raspaud. Recursive graphs with small-world scale-free properties, *Phys. Rev. E* 69:037104, 2004.

[6] L. Barriere, F. Comellas, C.Dalfó, M.A. Fiol. The hierarchical product of graphs. *Discrete Appled Math.* En prensa, 2008.

[7] S.N. Dorogovtsev, A.V. Goltsev, J.F.F. Mendes. Pseudofractal scale-free web. *Phys. Rev. E* 65:066122, 2002.

[8] R. Ferrer i Cancho, C. Janssen, R.V. Solé Topology of technology graphs: Small world patterns in electronic circuits. *Phys. Rev. E* 64:046119, 2001.

[9] H. Jeong, B. Tombor, R. Albert, Z.N. Oltvai, A.-L. Barabási. The large-scale organization of metabolic networks. *Nature* 407:651–654, 2000.

[10] M.E.J. Newman, The structure and function of complex networks, *SIAM Review* ,45:167–256, 2003 .

[11] J.D. Noh, Exact scaling properties of a hierarchical network model, *Phys. Rev. E* 67:045103, 2003 .

[12] E. Ravasz, A.-L. Barabási. Hierarchical organization in complex networks. *Phys. Rev. E* 67:026112, 2003 .

[13] E. Ravasz, A. L. Somera, D. A. Mongru, Z. N. Oltvai, A.-L. Barabási. Hierarchical organization of modularity in metabolic networks. *Science* 297:1551–1555, 2002.

[14] C. Song, S. Havlin, H. A. Makse. Self-similarity of complex networks. *Nature*, 433:392–395, 2005.

[15] C. Song, S. Havlin, H. A. Makse. Origins of fractality in the growth of complex networks. *Nature Phys.*, 2:275–281, 2006.

[16] S. Wuchty, E. Ravasz, A.-L. Barabási, "The Architecture of Biological Networks", Complex Systems in Biomedicine, T.S. Deisboeck, J. Yasha Kresh and T.B. Kepler (Editors), Kluwer Academic Publishing, New York, 2003.

[17] Z.Z. Zhang, F. Comellas, G. Fertin, and L.L. Rong. High dimensional Apollonian networks. *J Phys A: Math Gen* 39:1811–1818, 2006.

[18] Z.Z. Zhang, S. Zhou, L. Fang, J. Guan, Y. Zhang. Maximal planar scale-free Sierpinski networks with small-world effect and power law strength-degree correlation. *Eur. Phys. Lett.* 79:38007, 2007.