

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

O p -espectro laplaciano de um grafo

Elizandro Max Borba¹

Departamento de Matemática Pura e Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS,

Área de Ciências Exatas, Uergs, Vacaria, RS

Eliseu Fritscher²

Departamento de Matemática Pura e Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS

Abstract. The p -spectral radius of a graph G with adjacency matrix A is defined as $\lambda^{(p)}(G) = \max\{x^T Ax : \|x\|_p = 1\}$. This parameter shows remarkable connection with graph invariants, and were used to generalize some extremal problems. In this work, we apply the same approach to the laplacian matrix L . We define the *laplacian p -spectral radius* as $\mu^{(p)}(G) = \max\{x^T Lx : \|x\|_p = 1\}$, and the *p -algebraic connectivity* as $a^{(p)}(G) = \min\{x^T Lx : \|x\|_p = 1 \text{ and } x_1 + x_2 + \dots + x_n = 0\}$. We show that $\mu^{(p)}(G)$ relates to invariants such as maximum degree and maximum cut size, and $a^{(p)}(G)$ shows potential application to the problem of graph partitioning.

Keywords. Grafos, matriz laplaciana, raio p -espectral laplaciano, conectividade p -algébrica, particionamento.

1 Introdução

A obtenção do espectro de uma matriz real simétrica pode ser formulada como um problema de otimização utilizando os Teoremas de Rayleigh e de Courant-Fischer. Por exemplo, o raio espectral de $\lambda(G)$ de um grafo é dado por $\max\{x^T Ax : \|x\| = 1\}$. Recentemente, Keevash, Lenz e Mubayi [6] generalizaram essa abordagem, substituindo a norma Euclidiana $\|x\|$ pela p -norma $\|x\|_p$, definindo então o raio p -espectral $\lambda^{(p)}(G)$. Este parâmetro mostra surpreendente conexão com alguns invariantes de um grafo. Enquanto $\lambda^{(2)}(G)$ é o raio espectral usual, $\lambda^{(1)}(G)$ corresponde ao lagrangiano de G , e $\lambda^{(\infty)}(G)/2$ é igual ao número de arestas de G . Nessa generalização, referiremo-nos a x como um *p -autovetor* associado ao valor ótimo, que chamaremos *p -autovalor*.

Um resultado interessante dessa nova teoria envolve a caracterização de grafos “livres de K_r ”, ou seja, que não possuem um grafo completo com r vértices como subgrafo. Turán [10] mostrou que o grafo r -partido equilibrado (chamado então de “grafo de Turán”, denotado por $T_r(n)$) possui o maior número de arestas dentre os grafos de ordem n livres de K_{r+1} . Kang e Nikiforov [5] mostraram que, para $p \geq 1$, $T_r(n)$ também é máximo para

¹elizandro-borba@uergs.edu.br, elizandro.max@ufrgs.br

²eliseu.fritscher@gmail.com

$\lambda^{(p)}(G)$ dentre os grafos de ordem n livres de K_{r+1} , generalizando o resultado de Turán, que é o caso em que $p = \infty$.

Esse trabalho aplica essa abordagem à matriz laplaciana $L = L(G)$ de um grafo G . Primeiramente, definimos e estudamos o raio p -espectral laplaciano $\mu^{(p)}(G)$, definido por $\mu^{(p)}(G) = \max\{x^T Lx : \|x\|_p = 1\}$. Assim como $\lambda^{(p)}(G)$, o parâmetro $\mu^{(p)}(G)$ se relaciona a invariantes de G , como grau máximo e tamanho de um corte máximo.

O segundo menor autovalor de L , conhecido como *conectividade algébrica* e denotado por $a(G)$, tem relação com a conectividade de um grafo [3, 4]. Um autovetor associado a $a(G)$, conhecido como *vetor de Fiedler*, é usado como aproximação para o particionamento de um grafo via minimização do RatioCut, segundo o sinal de suas entradas, pois é a solução para uma versão relaxada do problema [7]. Problemas de particionamento costumam ser do tipo NP-difícil e possuem inúmeras aplicações, como por exemplo a segmentação de imagens. Isso tem motivado heurísticas de particionamento baseadas nesse vetor (ver, por exemplo, [9]). Desde então, métodos espectrais de particionamento têm motivado a pesquisa na área [8]. Em particular, Bühler e Hein [2] descrevem um método em que também utilizam a p -norma na restrição, e modificam a função objetivo utilizando uma versão não-linear do operador laplaciano (chamado p -laplaciano). Isso motiva a definição de uma *conectividade p -algébrica* $a^{(p)}(G)$, dada por $a^{(p)}(G) = \min\{x^T Lx : \|x\|_p = 1 \text{ e } x_1 + x_2 + \dots + x_n = 0\}$.

De fato, verificamos que o particionamento pode se alterar bastante conforme se altera o valor de p . Comparamos os particionamentos baseados em um vértice especial, que chamamos de *vértice canônico*. Os experimentos computacionais mostram que o número de vértices na mesma classe do vértice canônico é pequena quando $p = \infty$, e aumenta conforme p decresce, o que também é visto em [2], mas aí não se aborda o problema de maximização nem se trata do caso $p = \infty$, como fazemos aqui. Por questão de concisão, não apresentaremos aqui as provas completas; estas podem ser encontradas em [1].

2 Preliminares

$G = (V, E)$ designa um grafo G em que V é seu conjunto de vértices e E é seu conjunto de arestas. $G = (V_1, V_2, E)$ designa um grafo bipartido onde V_1 e V_2 são as classes da bipartição. K_n designa um grafo completo, e $K_{p,q}$ representa um grafo bipartido completo com classes de tamanho p e q . d_i denota o grau (número de vizinhos) de $i \in V$, e d_{ij} é o número de arestas (0 ou 1) entre $i, j \in V$. A *matriz laplaciana* $L(G)$ de um grafo G tem entradas

$$\ell_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{se } ij \in E \\ d_i, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{c. c.} \end{cases}$$

Nos problemas de otimização citados, a função objetivo é

$$Q_G(x) = x^T Lx = \sum_{ij \in E(G)} (x_i - x_j)^2.$$

É fácil verificar que, se G' é subgrafo de G , então $Q_{G'}(x) \leq Q_G(x)$ e, portanto, se G tem n vértices então $Q_G(x) \leq Q_{K_n}(x)$. Além disso, $Q_G(x) = 0$ se x é constante em cada componente conexa do grafo.

Cada vetor x utilizado tem uma entrada x_i associada ao vértice i ; dizemos que x_i é o peso de i . Referenciaremos os subconjuntos de V contendo, respectivamente, os vértices de peso positivo, negativo e zero, como P , N e Z .

3 Raio p -espectral laplaciano

O raio p -espectral laplaciano $\mu^{(p)}(G)$ é definido por

$$\mu^{(p)}(G) = \max_{\|x\|_p=1} x^T Lx.$$

Na proposição que segue damos algumas propriedades básicas deste parâmetro:

Proposição 3.1. *Seja G um grafo qualquer, e considere a função $p \rightarrow \mu^{(p)}(G)$. Então*

1. *Se G tem pelo menos uma aresta, $\mu^{(p)}(G)$ é crescente em p ;*
2. *$\mu^{(p)}(G)$ é contínua em p ;*
3. *$\lim_{p \rightarrow \infty} \mu^{(p)}(G) = \mu^{(\infty)}(G)$.*

Além do fato de que $\mu^{(2)}(G)$ é o raio espectral laplaciano, mostramos que, assim como $\lambda^{(p)}(G)$, este novo parâmetro se relaciona com invariantes de G .

Teorema 3.2. *Para qualquer grafo G , $\mu^{(1)}(G) = \Delta_G$, o grau máximo de G .*

Ideia da Prova. Mostramos que um vetor canônico e_a tal que $d_a = \Delta_G$ é um 1-autovetor, pois que soluções de outra forma podem ser melhoradas. Os 1-autovetores são sempre dessa forma se $\Delta_G \geq 2$. □

No caso $p = \infty$, o problema toma a forma $\mu^{(\infty)}(G) = \max\{Q_G : \max_{i \in G} |x_i| = 1\}$.

Teorema 3.3. *Seja η o tamanho de um corte máximo de um grafo G qualquer. Então $\mu^{(\infty)}(G) = 4\eta$.*

Ideia da Prova. Mostramos que um ∞ -autovetor x é tal que $|x_i| = 1, i = 1, \dots, n$. Cada vetor x dessa forma pode ser associado a uma bipartição de G em dois conjuntos V_1 e V_2 , para a qual $x_i = 1$ se $i \in V_1$ e $x_i = -1$ $i \in V_2$, e de modo que $Q_G(x) = 4E(V_1, V_2)$. Note que o valor máximo que $E(V_1, V_2)$ pode atingir é o tamanho de um corte máximo, η . □

Em particular, o valor máximo de $\mu^{(\infty)}(G)$ dentre grafos de ordem n é

$$\mu^{(\infty)}(K_n) = \mu^{(\infty)}(K_{\lfloor n/2 \rfloor, \lceil n/2 \rceil}) = n^2 - (n \bmod 2).$$

Apresentamos agora algumas propriedades quando $2 \leq p < \infty$.

Proposição 3.4. *Seja $G = (V_1, V_2, E)$ um grafo bipartido completo. Se $p \geq 2$, então $\mu^{(p)}(G) = |V_1||V_2|(a + b)^2$, onde*

$$a = \left(|V_1| + |V_2| \left(\frac{|V_1|}{|V_2|} \right)^{\frac{p}{p-1}} \right)^{-1/p}, \quad b = \left(\frac{|V_1|}{|V_2|} \right)^{\frac{1}{p-1}} a.$$

Ideia da prova. Mostramos que, se x é um p -autovetor, os vértices com peso não-positivo pertencem a uma classe e os vértices com peso não-negativo pertencem à outra classe, e vértices na mesma classe têm o mesmo peso, e então aplicamos o método de Lagrange. \square

Pelo Teorema 3.3, o grafo bipartido completo equilibrado é maximal para $\mu^{(\infty)}$ dentre grafos com n vértices. Conjecturamos que esse mesmo grafo é maximal para $\mu^{(p)}$ se $2 \leq p < \infty$. Mostramos o resultado para n par.

Lema 3.1. *Seja G um grafo com n vértices. Se n é par, então para $p \geq 2$,*

$$\mu^{(p)}(G) \leq \mu^{(p)}(K_{n/2,n/2}),$$

com igualdade se e somente se G possui $K_{n/2,n/2}$ como subgrafo.

4 Conectividade p -algébrica

A conectividade p -algébrica $a^{(p)}(G)$ é definida por

$$a^{(p)}(G) = \min_{\|x\|_p=1, x_1+x_2+\dots+x_n=0} x^T Lx$$

Inicialmente, generalizamos uma propriedade importante da conectividade algébrica:

Teorema 4.1. *Para $p \geq 1$, $a^{(p)}(G) = 0$ se e somente se G é desconexo.*

As propriedades funcionais de $a^{(p)}(G)$ são similares às de $\mu^{(p)}(G)$.

Proposição 4.2. *Seja G um grafo qualquer, e considere a função $p \rightarrow a^{(p)}(G)$. Então:*

1. *Se G é conexo, $a^{(p)}(G)$ é crescente em p ;*
2. *$a^{(p)}(G)$ é contínua em p ;*
3. *$\lim_{p \rightarrow \infty} a^{(p)}(G) = a^{(\infty)}(G)$.*

No caso $p = \infty$, o problema se torna $a^{(\infty)}(G) = \min\{Q_G : \max_{i \in G} |x_i| = 1 \text{ e } x_1 + \dots + x_n = 0\}$. Uma estratégia é fazer $x_n = -1$; as restrições tomam a forma $x_1 + \dots + x_{n-1} = 1$ e $|x_i| \leq 1, i = 1, 2, \dots, n-1$. No pior caso, devemos resolver esse subproblema n vezes. O lema a seguir, entretanto, nos diz que podemos relaxar o problema, ignorando a restrição $|x_i| \leq 1$, caso alguma entrada tenha valor absoluto 1.

Lema 4.1. $a^{(\infty)}(G) = \min\{Q_G(x) : x_1 + x_2 + \dots + x_n = 0 \text{ e } |x_k| = 1 \text{ para algum } k\}$

Este é um problema quadrático convexo com restrições lineares. Um vetor que satisfaça as condições de Karush-Kuhn-Tucker será uma solução ótima. Como L é positiva semidefinida, o problema é resolvido em tempo polinomial [11].

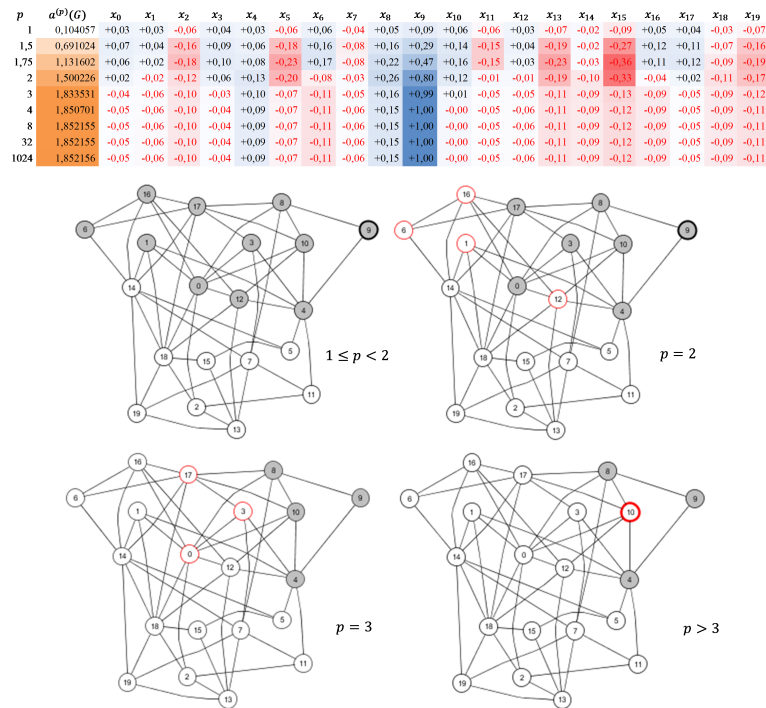


Figura 1: Cálculo numérico de $a^{(p)}(G)$ e p -autovetor para vários valores de p .

4.1 Aplicações ao particionamento de um grafo

Como um vetor de Fiedler, associado a $a(G)$, é uma aproximação do problema do particionamento via minimização do RatioCut, é natural inquirir que tipo de particionamento obtemos usando o p -autovetor associado à conectividade p -algébrica. Em particular, como o particionamento se altera variando o valor de p , e qual a relação com o particionamento dado pelo vetor de Fiedler. A Figura 1 mostra um exemplo de experimento computacional realizado sobre um mesmo grafo, no qual computamos $a^{(p)}(G)$ e seus respectivos p -autovetores, para p variando de 1 a um valor muito alto. Usamos $p = 1024$ como aproximação para $p = \infty$ (pela Proposição 4.2).

Os particionamentos pelo sinal das entradas do vetor: as classes são P (em fonte preta na tabela) e $N \cup Z$ (fonte vermelha). Se x é um p -autovetor, $-x$ também é, já que $Q_G(x) = Q_G(-x)$. Assim, para cada valor de p , a partir do vetor x obtido, buscamos escolher x ou $-x$ modo que fosse possível fazer alguma comparação entre os particionamentos. Uma ideia é escolher um vértice i como referência, escolhendo então x ou $-x$ de modo que a entrada correspondente a i fosse positiva. Notou-se uma boa base de comparação quando esse vértice de referência é tal que, no caso $p = \infty$, tem peso absoluto 1.

Lema 4.2. *Seja G um grafo conexo com no mínimo três vértices e x tal que $\|x\|_\infty = 1$ e $Q_G(x) = a^{(\infty)}(G)$. Então existe exatamente um vértice i tal que $|x_i| = 1$.*

Ideia da prova. Seja x um ∞ -autovetor. Existem apenas dois casos de interesse em que $|x_a| = |x_b| = 1$ para $a, b \in V(G)$: (I) $x_a = x_b = 1$ e (II) $x_a = -x_b = 1$. Podemos

fazer trocas adequadas de modo a diminuir o valor absoluto de x_a ou de x_b , diminuindo também o valor de Q_G . Assim, usamos o caso I sucessivamente em P até que haja apenas um vértice com valor absoluto 1 em P , e analogamente em N . Por fim, usamos o caso II para deixar apenas um vértice com valor absoluto 1.

Caso I. Seja $P' = P \cup Z \setminus \{a, b\}$. Para $\epsilon > 0$, definimos x' tal que $x'_b = 1 - \epsilon$, $x'_j = x_j + \epsilon/|N|$ se $j \in N$, mantendo as demais entradas inalteradas. Seja $\Delta = Q_G(x) - Q_G(x')$. Então,

$$\frac{|N|}{2\epsilon} \Delta = \sum_{\substack{aj \in E \\ j \in N}} (1 + |x_j|) + (|N| + 1) \sum_{\substack{bj \in E \\ j \in N}} (1 + |x_j|) + |N| \sum_{\substack{bi \in E \\ i \in P'}} (1 - x_i) + \sum_{\substack{ij \in E \\ i \in P', j \in N}} (x_i + |x_j|) + O(\epsilon)$$

Observe que $1 - x_i \geq 0$ e que, para valores de ϵ arbitrariamente pequenos, Δ é positivo. Como G é conexo, as demais somas não podem ser simultaneamente nulas.

Caso II. Sejam $P' = P \setminus \{a\}$ e $N' = N \setminus \{b\}$. Temos dois subcasos a considerar: (a) $|Z| \geq 1$ e (b) $|Z| = 0$. Especificaremos somente as trocas a serem feitas para melhorar o valor de Q_G . Argumentos similares aos do caso anterior são aplicados para provar que a soma de $\Delta' = Q_G(x) - Q_G(x')$ e $\Delta'' = Q_G(x) - Q_G(x'')$ é positiva.

Subcaso IIa. x' é tal que $x'_a = 1 - \epsilon$, $x'_k = \epsilon/|Z|$ se $k \in Z$, e demais entradas inalteradas. Similarmente, no vetor x'' , consideramos $x''_b = -1 + \epsilon$ e $x''_k = -\epsilon/|Z|$ se $k \in Z$.

Subcaso IIb. Note que, nesse subcaso, como $x_1 + x_2 + \dots + x_n = 0$, então P' e N' não são vazios. O vetor x' é tal que $x'_a = 1 - \epsilon$, $x'_i = x_i + \epsilon/|N'|$ se $i \in N'$, e demais entradas inalteradas. Similarmente, em x'' , $x''_b = -1 + \epsilon$ e $x''_j = x_j - \epsilon/|Z|$ se $j \in P'$. \square

O vértice ao qual o Lema 4.2 se refere irá efetuar um papel importante na análise de resultados experimentais, o que nos leva à seguinte definição:

Definição 4.3. *Seja x tal que $\|x\|_\infty = 1$ e $Q_G(x) = a^{(\infty)}(G)$. O vértice canônico i de x é o vértice i tal que $|x_i| = 1$.*

Observe que o vértice canônico é único dentre as entradas de um ∞ -autovetor unitário, mas não necessariamente único dentre os vértices de G . Por exemplo, se i e $j \in V(G)$ são equivalentes (ou seja, existe um automorfismo ϕ de G tal que $\phi(i) = j$), então i e j serão canônicos para autovetores diferentes; em grafos vértice-transitivos (que incluem grafos completos e ciclos), qualquer vértice será vértice canônico de algum autovetor. A existência de um grafo em que vértices não-equivalentes são canônicos para diferentes autovetores é uma questão em aberto.

Analisando os resultados experimentais, alguns padrões podem ser observados:

1. Nenhum vértice tem peso nulo para $p < 2$;
2. Utilizamos o vértice canônico para comparar os particionamentos;
3. O número de vértices na classe do vértice canônico tende a decrescer à medida que p aumenta;
4. Acima de um certo valor de p , a partição não mais se altera;
5. Quando $p = 1$, o particionamento é mais equilibrado.

O primeiro item desta lista aponta uma importante diferença em relação ao particionamento pelo vetor de Fiedler, onde eventualmente há vértices de peso nulo. O lema a seguir mostra que não existe vértice com peso nulo no caso $p = 1$. Assim, podemos fazer o particionamento por sinal sem nenhuma ambiguidade quanto aos vértices com peso nulo.

Lema 4.3. *Seja G um grafo conexo e x tal que $\|x\|_1 = 1$ e $Q_G(x) = a^{(1)}(G)$. Então $|x_i| > 0$, para todo $i \in G$.*

Ideia da Prova. O método é similar ao do Lema 4.2. Se $|Z| > 0$, definimos x' e x'' tais que $x'_k = \epsilon/|Z|$ e $x''_k = -\epsilon/|Z|$ se $k \in Z$, $x'_i = x_i - \epsilon/|P|$ se $k \in P$ e $x''_j = x_j + \epsilon/|N|$ se $k \in N$. \square

5 Conclusão e Trabalhos Futuros

Vimos que a aplicação do conceito de p -espectro à matriz laplaciana proveu vários resultados, como a conexão a invariantes e aplicações ao particionamento de grafos. Sobre o p -espectro laplaciano em geral e o raio p -espectral laplaciano, alguns possíveis trabalhos futuros incluem: investigar os intervalos $1 \leq p \leq 2$ para $\mu^{(p)}(G)$ e $2 \leq p \leq \infty$ para $a^{(p)}(G)$; aplicar a problemas extremais; investigar os demais p -autovalores; aplicar a outras matrizes, como a laplaciana sem sinal e a laplaciana normalizada; investigar que relação pode existir entre $\mu^{(p)}(G)$ e parâmetros envolvendo soma de graus ou tamanho de cortes.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer a Sebastian Richter e Carlos Hoppen pelas ideias e auxílio, e à Petrobras (Programa PRH-216) pelo apoio.

Referências

- [1] Borba, E. M., O p -espectro laplaciano de um grafo, Qualificação para Doutorado em Matemática Aplicada, UFRGS, (2015).
- [2] Bühler, T., Hein, M.: Spectral clustering based on the graph p -laplacian. In: ICML. Volume 382, ACM 81-88 (2009).
- [3] J. Cheeger, Problems in Analysis. Princeton Univ. Press, cap. A lower bound for the smallest eigenvalue of the Laplacian, pp. 195-199 (1970).
- [4] M. Fiedler, Algebraic connectivity of graphs, Czechoslovak Math. J., vol. 23, pp. 298-305 (1973).
- [5] L. Kang e V. Nikiforov. Extremal problems for the p -spectral radius of graphs. [Online]. Disponível em: arxiv.org/abs/1402.3239 (2014).
- [6] P. Keevash, J. Lenz, e D. Mubayi. Spectral extremal problems for hypergraphs. [Online]. Disponível em: arXiv:1304.0050 (2014).
- [7] U. Luxburg, A tutorial on spectral clustering, Statistics and Computing, 17 (2007).
- [8] B. Peng, L. Zhang, e D. Zhang, A survey of graph theoretical approaches to image segmentation, Pattern Recognition, vol. 46, no 3, pp. 1020-1038 (2013).
- [9] A. Pothen, H. D. Simon, e K. P. Liou, Partitioning sparse matrices with eigenvectors of graphs, SIAM Journal of Matrix Anal. Appl., no 11, pp. 430-452 (1990).
- [10] P. Turán, On an extremal problem in graph theory (em húngaro), Matematikai és Fizikai Lapok, vol. 48, pp. 436-452 (1941).
- [11] Y. Ye e E. Tse, An extension of Karmarkar's projective algorithm for convex quadratic algorithm, Mathematical Programming, no 44, pp. 157-159 (1989).