Difusão em Redes

Difusão em redes

- Seja ψ é um vetor de quantidades medidas sobre os vértices de uma rede (massa de água, carga elétrica, calor, gente,...)
- Suponha que a quantidade medida possa fluir pelas arestas (com resistência c).
- A taxa de variação da quantidade u_i em um vértice i é

$$\frac{du_i}{dt} = c \sum_j A_{ij}(u_j - u_i)$$

onde A_{ij} é a matriz de adjacências.

Difusão em redes

- A taxa de variação do vetor u é, portanto, $\frac{du}{dt} = c(A - D)\psi$, onde D é a matriz diagonal que tem o grau k_i do vértice i na entrada D_{ii}.
- A matriz $\mathrm{L} = (D - A)$ é chamada matriz laplaciana (ou simplesmente o laplaciano)
- A evolução das quantidades nos vértices no tempo são as soluções da equação de difusão

$$\frac{du}{dt} + c \cdot L \cdot u = 0$$

Soluções do problema de difusão

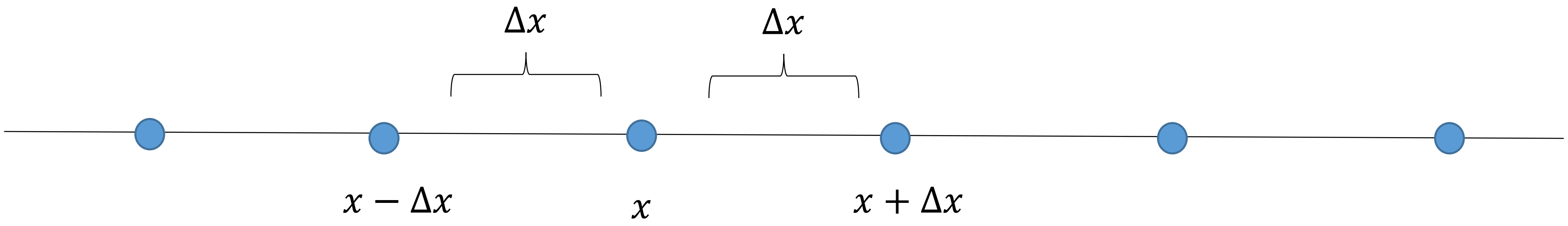
- $\frac{d\psi}{dt} = -L \cdot \psi$
- L é uma matriz simétrica positiva semi-definida:
  - $L = B^T B$, onde B é a matriz de incidência
- L tem n autovalores $\lambda_i \dots \lambda_n$ não negativos e n autovetores correspondentes $v_i \dots v_n$ ortonormais.
- Se $\psi(t) = a_1(t) \cdot v_1 + \cdots + a_n(t) \cdot v_n$ então a solução é
$$a_i(t) = a_i(0)e^{-\lambda_i t}$$

Autovalores do laplaciano

- Existe ao menos um autovalor nulo
- Todos os autovalores são maiores ou iguais a zero
- Ordenando os autovalores $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$ o menor autovalor λ_1 é sempre igual a zero.
- Se há C componentes conexas há C autovalores iguais a zero.
- Se há apenas uma componente conexa o segundo autovalor dá uma dica do grau de conectividade da rede. É chamado de “conectividade algébrica da rede” ou número de Fiedler da rede.

Exemplo

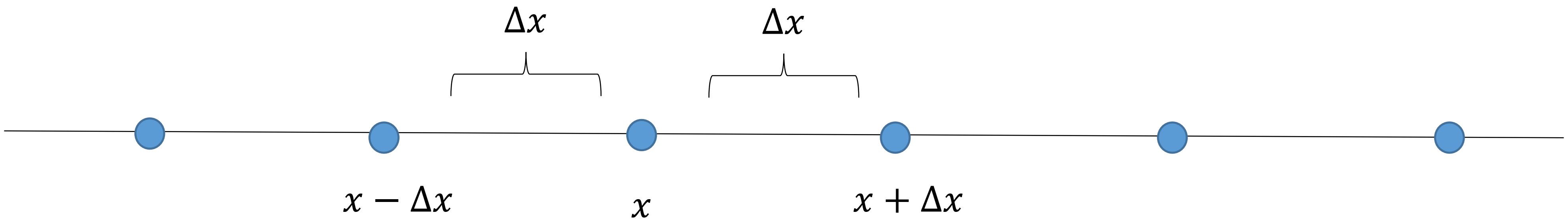
- Suponha um grafo com n vértices (n grande) que represente um anel.
- Os n vértices estão igualmente espaçados por uma distância Δx.
- Se o número de vértices é grande, então, olhando um pedaço do anel, o grafo é aproximadamente como na figura abaixo



Exemplo

- O laplaciano correspondente ao vértice x é

$$L=\begin{pmatrix} -2, & 1, & \dots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$



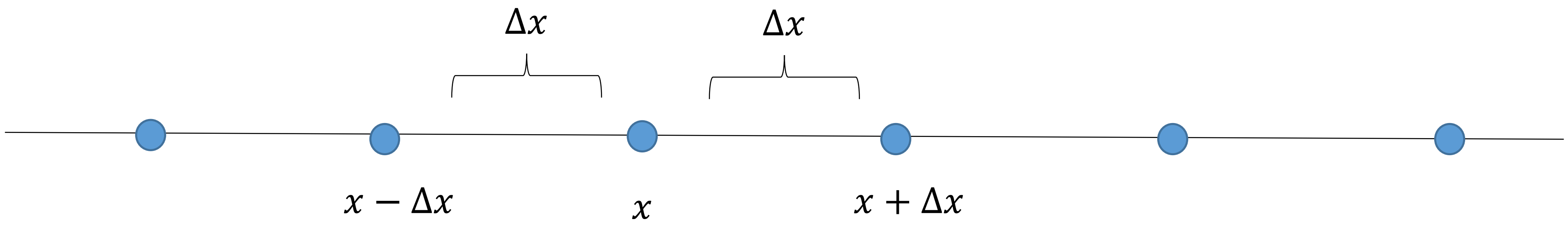
Exemplo

- O laplaciano correspondente ao vértice x é

$$
L=\begin{pmatrix} -2, & 1, & \dots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \end{pmatrix}
$$

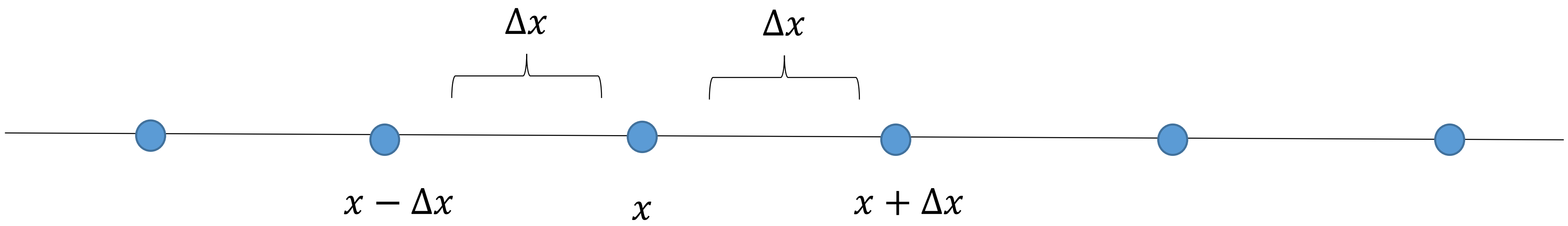
- Portanto, a linha correspondente ao vértice x é

$$
(0,0,\dots,\underset{\substack{\uparrow \\ x-\Delta x}}{1},\underset{\substack{\uparrow \\ x}}{-2},\underset{\substack{\uparrow \\ x+\Delta x}}{1},\dots,0)
$$



Exemplo

- Portanto, a linha correspondente ao vértice x é $(0,0,\ldots,\underset{x-\Delta x}{\underset{\uparrow}{1}},\underset{x}{\underset{\uparrow}{-2}},\underset{x+\Delta x}{\underset{\uparrow}{1}},\ldots,0)$
- Assim, a equação de evolução da quantidade u no vértice x pode ser escrita por $u_t = c \cdot [u(x-\Delta x) - 2\mathrm{u}(x) + u(x+\Delta x)]$
- Fazendo $\Delta x \to 0$ e c variar de acordo (como?) ficamos com a formulação contínua da equação do calor $u_t = ku_{xx}$.



Passeios aleatórios (random walks)

- Considere um passeio aleatório em uma rede (não orientada).
  - Partícula vagando pela rede de vértice em vértice através das arestas
- Denote $p_j(t)$ a probabilidade da partícula estar no vértice j no tempo t. Então no próximo passo $t+1$ a probabilidade da partícula estar no vértice i é $p_i(t+1) = \sum_j A_{ij} p_j(t)/k_j$

$$p(t+1) = A \cdot D^{-1} p(t)$$

Um estado estacionário é um vetor p^* tal que

$$p^* = A \cdot D^{-1} p^*$$

Passeio aleatório e o laplaciano

- A matriz $A \cdot D^{-1}$ é estocástica
- Estado estacionário: $p^* = A \cdot D^{-1} p^*$
- Como $A = D - L$ então $LD^{-1}p^* = 0$, ou seja, $D^{-1}p^*$ pertence ao núcleo de L.
- Numa rede conexa temos que $p^* = D \cdot (1,1,..,1)^T$. Normalizando, podemos escrever $p^* = \frac{1}{2m}(k_1, k_2, \dots, k_m)^T$

Tempo médio da primeira passagem

- Dado que começamos um passeio aleatório em um vértice o qual é o tempo médio esperado para alcançar o vértice d?
- Solução: faça o estado “estar no vértice j” ser um estado absorvente $A_{id} = 0, A_{dd} = 1$
- Tempo médio da primeira passagem: $\mathrm{E}(T) = \sum_{t=1}^{\infty} t \cdot (p_d(t) - p_d(t-1))$
- Como calcular $p_i(t)$ neste contexto?

Tempo médio da primeira passagem

- Como calcular $p_i(t)$ neste contexto?
- Monte as matrizes A' e D' removendo a linha e a coluna d (estado absorvente) e também o vetor p' removendo a entrada d do vetor.
- $p'(t) = A' \cdot (D')^{-1} \cdot \mathrm{p}'(t-1)$
- $p'(t) = (A' \cdot (D')^{-1})^t \cdot p'(0)$
- $p_d(t) = 1 - u^T \cdot p'(t)$, onde $u = (1,1,\ldots,1)$

Tempo médio da primeira passagem

- Juntando tudo:

$$E(T) = \sum t \cdot u^T \cdot \left(p'(t) - p'(t-1)\right) = u^T \cdot \left[I - A' \cdot {D'}^{-1}\right]^{-1} \cdot p'(0)$$

- A matriz $\left[I - A' \cdot {D'}^{-1}\right]$ pode ser escrita como $D'L'^{-1}$
- $E(T) = u^T \cdot D'L'^{-1} \cdot p'(0)$