

Técnicas cuánticas para la evolución de grafos aleatorios

Enrique F. Borja* Clara Grima† Alberto Márquez‡ Reyes Zambrano§

Resumen

Con la idea de modelar el comportamiento de diversas redes sociales a lo largo del tiempo, mostramos algunos resultados preliminares sobre evolución de grafos aleatorios empleando técnicas inspiradas en la mecánica cuántica. Presentaremos el formalismo y veremos como podemos pasar de una descripción microscópica a una descripción macroscópica. Por último, compararemos nuestro modelo con los bien conocidos grafos de Erdős-Rényi.

Palabras Clave. Grafo aleatorio. Hamiltoniano. Operadores de creación y destrucción. Erdős-Rényi.

1 Introducción

La evolución temporal de grafos es un tema de candente actualidad. La aparición de las redes sociales, y su importancia comercial y política, nos obliga a mejorar nuestra capacidad de modelado de dichos sistemas.

Para ello, introducimos un modelo que nos permite describir la evolución temporal de los valores esperados de las características de los grafos a dos niveles. Por un lado podemos modelar el comportamiento microscópico de las aristas entre nodos tal y como se hace en los trabajos clásicos. Por otro lado, podemos acercarnos a las técnicas de los grafos aleatorios exponenciales donde se trabaja con colectivos siguiendo el espíritu de la mecánica estadística en física. Para acometer este objetivo aplicamos las técnicas de la mecánica estocástica de Baez et al. que toman su inspiración en la mecánica cuántica. Esto nos permite describir los procesos de creación y destrucción de las aristas entre nodos del grafo. Esta idea tiene como ventaja que podemos aplicar las ideas cuánticas sin tener que enfrentarnos a los problemas derivados de su formulación en espacios de Hilbert complejos y del omnipresente principio de indeterminación de Heisenberg.

2 Breve resumen sobre mecánica estocástica

En esta sección vamos a introducir los elementos esenciales de la mecánica estocástica [1] que emplearemos a lo largo de este trabajo. Por razones de espacio y para mantener la claridad de la exposición omitiremos los detalles técnicos.

Queremos describir un sistema (la evolución de un grafo que modela una red dinámica) que está definido según el número de constituyentes (nodos) del mismo. El número de constituyentes se representan por n . En este contexto supondremos que dichos elementos constituyentes del sistema se pueden crear y destruir. Profundizaremos en ello en lo que sigue pero ahora tenemos que introducir el concepto de estado.

Un estado Ψ en mecánica estocástica se define como una serie de potencias formal en la variable z .

$$\Psi = \sum_n n z^n, \quad (1)$$

*Universidad de Sevilla (España), efernandez19@us.es

†Universidad de Sevilla (España), grima@us.es

‡Universidad de Sevilla (España), almar@us.es

§Universidad de Sevilla (España), mzambrano16@alumno.uned.es

donde los coeficientes de la serie ψ_n son las probabilidades de que nuestro sistema tenga un número n de constituyentes. Por supuesto, tenemos que asegurar la condición

$$\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n = 1. \quad (2)$$

Llegados a este punto tenemos que introducir los operadores de creación y de destrucción. Un operador de creación se denota por a^\dagger y su actuación sobre un estado es simplemente la multiplicación por z . Si tomamos el estado $\Psi = z^n$ la actuación del operador a^\dagger viene dada por

$$a^\dagger z^n = z^{n+1}. \quad (3)$$

Por otro lado, el operador de destrucción, que denotaremos por a , actúa como un operador de derivación d/dz . Su actuación sobre el anterior estado da lugar a

$$a z^n = \frac{dz^n}{dz} = z^{n-1}. \quad (4)$$

Es interesante calcular el conmutador entre estos dos operadores,

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad (5)$$

Este conmutador define completamente el álgebra de los operadores que vamos a definir y será de gran utilidad en lo que sigue. De hecho, en mecánica cuántica esta relación es la que define de forma abstracta los operadores de creación y destrucción. Dicho nombre es totalmente apropiado dados los términos en los que hemos definido los estados y la actuación de dichos operadores. Por supuesto, se cumple que $[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0$.

Un operador interesante es el operador número, A , que es el que cuenta el número de constituyentes del sistema. Este operador expresa en términos de los operadores a y a^\dagger del siguiente modo,

$$A = a^\dagger a, \quad (6)$$

empleando las relaciones de conmutación entre a y a^\dagger obtenemos los siguientes conmutadores, $[A, A] = 0$, $[A, a^\dagger] = a^\dagger$ y $[A, a] = -a$. La evolución temporal de los estados vendrá definida por la acción de un operador lineal, el Hamiltoniano, representado por H y que definiremos apropiadamente en la siguiente sección para el caso que nos ocupa.

En este trabajo estamos interesados en el estudio de la evolución temporal de los valores esperados de distintos observables del sistema. Sea O un operador construido con operadores a y a^\dagger . Para llegar a los resultados de interés introduciremos una notación compacta útil en los cálculos.

Denotaremos la relación (2) por $\sum \Psi$. Para que la evolución temporal esté bien definida se tienen que cumplir las siguientes relaciones:

$$\sum a^\dagger \Psi = \sum \Psi, \quad (7)$$

y

$$\sum a \Psi = \sum A \Psi. \quad (8)$$

El valor esperado del operador O se define como $\langle O \rangle = \sum O \Psi$. Su evolución temporal viene dada por la siguiente expresión,

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle = \sum O H \Psi. \quad (9)$$

3 El Hamiltoniano definido para grafos

La herramienta fundamental que hará modificar nuestro grafo a lo largo del tiempo es el Hamiltoniano.

Definiremos nuestro grafo G de la forma usual dado un conjunto V de n nodos y un conjunto de aristas E . Los nodos serán indexados por letras latinas minúsculas i, j, \dots que tomarán valores de 1 a n . Las aristas se denotarán por el par de nodos que unen, así ij denotará la arista entre el nodo i y el nodo j . Según la imagen que estamos construyendo podremos construir aristas entre dos nodos aplicando un operador de creación entre los nodos implicados, por lo tanto, a_{ij}^\dagger creará una arista entre los nodos i y j . Los operadores de destrucción actúan de forma análoga. Por ahora nos centraremos en grafos no dirigidos y sin autolazos.

En este caso tenemos que extender las relaciones de conmutación para este caso de la siguiente forma

$$[a_{kl}, a_{ij}^\dagger] = \delta_{kl,ij}, \quad (10)$$

donde la $\delta_{kl,ij}$ es una delta de Kronecker generalizada, que tal y como definiremos las sumas sobre vértices y teniendo en cuenta las características de los grafos en las que estamos trabajando, toma el valor 1 cuando los operadores actúan sobre las misma arista y toma el valor 0 cuando actúan sobre aristas diferentes.

Podemos definir el operador que cuenta las aristas entre un par de nodos

$$A_{ij} = a_{ij}^\dagger a_{ij}, \quad (11)$$

no es difícil notar que este operador es la representación en nuestro modelo del elemento ij de la matriz de adyacencia. Por tanto, nuestro modelo tiene que tener los ingredientes necesarios para asegurar que dichos operadores solo pueden tener autovalores 0 o 1. Este es un punto sutil que está relacionado con el carácter fermiónico de las aristas de la gráfica. Dicho de otro modo, las multiaristas entre un par de nodos no están permitidas.

Las relaciones de conmutación que involucran a los operadores A_{ij} que utilizaremos en los cálculos que siguen son:

$$\begin{aligned} [A_{kl}, A_{ij}] &= 0, \\ [A_{kl}, a_{ij}] &= -a_{kl}\delta_{kl,ij}, \\ [A_{kl}, a_{ij}^\dagger] &= a_{kl}^\dagger\delta_{kl,ij}. \end{aligned}$$

3.1 El Hamiltoniano

Con las herramientas que hemos definido en anteriormente estamos en disposición de construir nuestro Hamiltoniano. Este operador contendrá diversas partes teniendo cada una de ellas un significado en la evolución del grafo. En estas líneas que siguen definiremos cada una de las contribuciones del Hamiltoniano.

Hamiltoniano libre

El Hamiltoniano libre simplemente da cuenta del número de aristas presentes en el grafo.

$$H_0 = \gamma_0 \sum_i \sum_{j < i} A_{ij}, \quad (12)$$

donde γ_0 es un parámetro real que tiene que ser fijado dependiendo de las propiedades del grafo.

Hamiltoniano aleatorio

En esta parte del Hamiltoniano se tiene en cuenta la posibilidad de que dos nodos cualesquiera del grafo se interactúen entre sí creando o destruyendo una arista entre ellos.

$$H_R = \alpha \sum_i \sum_{j > i} (a_{ij}^\dagger - 1)(1 - A_{ij}) + \beta \sum_i \sum_{j > i} (a_{ij} - A_{ij}), \quad (13)$$

donde α y β son parámetros reales que cumplen $\alpha + \beta = 1$.

El Hamiltoniano total será por tanto

$$H = H_0 + H_R$$

Como veremos en la próxima sección la única parte de Hamiltoniano que genera evolución temporal es el H_R dado que H_0 conmuta con todos los observables que vamos a estudiar al estar estos contruidos como composición de operadores del tipo A_{ij} .

4 Erdős-Rényi

En esta sección exponemos cómo nuestro modelo puede recuperar el comportamiento de un grafo aleatorio de Erdős-Rényi,[2], en términos de los valores promedio de cantidades medibles en el grafo. El modelo nos da la evolución temporal de estos valores promedio y se recuperan los resultados conocidos en el límite de tiempos de evolución grandes.

Número total de Aristas

El número total de aristas de nuestro grafo como $E = \sum_k \sum_{l>k} A_{kl}$. La evolución temporal del valor promedio de este observable viene dado por:

$$\frac{d}{dt}\langle E \rangle = \sum E H_R \Psi. \quad (14)$$

El resultado, para un estado inicial $\Psi_0 = 1$, el grafo sin aristas, tiene la forma

$$\langle E(t) \rangle = \frac{\alpha n(n-1)}{2} - \frac{\alpha n(n-1)}{2} e^{-t}. \quad (15)$$

Se puede calcular cualquier otra magnitud relevante del grafo como el grado promedio de un nodo, el número de caminos de longitud 2, el número de 2-estrellas, etc. Todos los resultados son idénticos asintóticamente con los resultados conocidos de este tipo de grafos.

Empleando estos resultados podemos acometer el estudio estadístico de un colectivo de grafos aleatorios [3]. Para ello utilizamos la función de partición del sistema suponiendo que el promedio del número total de aristas está fijado. La función de partición está definida por

$$Z = \sum_{\mathcal{G}} e^{\langle H_0 \rangle} = (1 + e^{\gamma_0})^{\binom{n}{2}}, \quad (16)$$

donde \mathcal{G} es el colectivo de todos los grafos posibles considerando que son todas equiprobables e imponiendo un valor esperado del número de aristas. A partir de este resultado es trivial recuperar la distribución de probabilidad de Erdős-Rényi para obtener un grafo concreto dentro del colectivo.

$$P(G) = \left(\frac{e^{\gamma_0}}{1 + e^{\gamma_0}} \right)^{\langle E \rangle} \left(\frac{1}{1 + e^{\gamma_0}} \right)^{\binom{n}{2} - \langle E \rangle} \quad (17)$$

Referencias

- [1] Baez, J. C., Biamonde, J.: A Course on Quantum Techniques for Stochastic Mechanics, arXiv:1209.3632v1 [quant-ph], 2012.
- [2] Albert, Réka., Barabasi, Albert-Lazlo.: Statistical Mechanics of complex networks, Reviews of modern physics 74 2002, 47 – 97.
- [3] Fronczak, Agata.: Exponential random graph models, Chapter in Encyclopedia of Social Network Analysis and Mining, R. Alhajj, J. Rokne (Eds.) Springer-Verlag 2014.