

Grafos Aleatórios Exponenciais

Tássio Naia dos Santos

DISSERTAÇÃO APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
MESTRE EM CIÊNCIAS

INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Programa: Ciência da Computação
Orientador: Prof. Dr. Yoshiharu Kohayakawa

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu auxílio financeiro da
CAPES.

São Paulo, novembro 2013

Grafos Aleatórios Exponenciais

Esta é a versão original da dissertação elaborada pelo candidato Tássio Naia dos Santos, tal como submetida à Comissão Julgadora.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer especialmente à minha esposa Sophie e minha família pela paciência e apoio inestimáveis; a Yoshiharu Kohayakawa pela orientação e inspiração; e Fábio Happ Botler por mais do que cabe aqui dizer. Também agradeço Florência Graciela Leonardi, Daniel Morgato Martin e Rafael Crivellari Saliba Schouery pelos perspicazes comentários sobre o texto. Por fim, agradeço à CAPES pelo apoio dado ao projeto.

Resumo

Santos, T.N. **Grafos Aleatórios Exponenciais.** Dissertação — Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

Estudamos o comportamento da família aresta-triângulo de grafos aleatórios exponenciais (ERG) usando métodos de Monte Carlo baseados em Cadeias de Markov. Comparamos contagens de subgrafos e correlações entre arestas de ERGs às de Grafos Aleatórios Binomiais (BRG, também chamados de Erdős-Rényi).

É um resultado teórico conhecido que para algumas parametrizações os limites das contagens de subgrafos de ERGs convergem para os de BRGs, assintoticamente no número de vértices [BBS11, CD11]. Observamos esse fenômeno em grafos com poucos (≈ 20) vértices em nossas simulações.

Abstract

Santos, T.N. **Exponential Random Graphs.** Dissertation — Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

We study the behavior of the edge-triangle family of exponential random graphs (ERG) using the Markov Chain Monte Carlo method. We compare ERG subgraph counts and edge correlations to those of the classic Binomial Random Graph (BRG, also called Erdős–Rényi model).

It is a known theoretical result that for some parameterizations the limit ERG subgraph counts converge to those of BRGs, as the number of vertices grows [BBS11, CD11]. We observe this phenomenon on graphs with few (≈ 20) vertices in our simulations.

Sumário

Lista de Tabelas	xi
Lista de Figuras	xiii
1 Introdução	1
2 Preliminares	3
2.1 Valores assintóticos	4
2.2 Probabilidade discreta	4
Probabilidade Condicional	4
Variáveis aleatórias	5
Esperança e variância	5
Esperança condicional	6
2.3 Grafos	6
Agrupamento em redes empíricas	7
2.4 Estatística	7
3 Grafos Aleatórios Binomiais e Exponenciais	9
3.1 Grafo Aleatório Binomial	9
Propriedades de $G(n, p)$	9
3.2 Grafo Aleatório Exponencial	10
Estrutura de dependência	11
3.3 Grafos de Markov	12
3.4 O modelo aresta-triângulo	13
3.5 Modelo aresta-triângulo e BRGs	15
4 MCMC	17
4.1 Cadeias de Markov	17
4.2 Métodos de Monte Carlo baseados em Cadeias de Markov	18
4.3 Tempo de mistura de grafos aleatórios exponenciais	19
5 Limites de Grafos	23
6 Experimentos computacionais	25
6.1 Software para simulação	26
6.2 Experimentos	26
6.3 Comparação	27
7 Discussão e comentários finais	29
Referências Bibliográficas	31
A Tabelas dos experimentos computacionais	35

Lista de Tabelas

6.1	Crescimento de $\binom{n}{2}$ em função de n . A <i>ordem</i> de x é $10^{\lfloor \log_{10} x \rfloor}$	26
6.2	Algumas estatísticas das amostras.	28
A.1	Sumário de estatísticas das amostras de ERG aresta-triângulo	35
A.2	Sumário de estatísticas das amostras dos BRG $G(n, u^*)$	37
A.3	Alguns valores numéricos de $u^* = u^*(\beta_1, \beta_2)$	40

Lista de Figuras

2.1	Exemplos de grafos.	6
6.1	Gráfico de u^* em função de (β_1, β_2)	27
7.1	Amostra do modelo aresta-triângulo que é quase-bipartida.	30

Capítulo 1

Introdução

Diversas questões interessantes podem ser formuladas em termos de uma “rede” de interações entre alguma classe de objetos. Essa abstração é bastante versátil: podemos pensar em redes “físicas” (por exemplo, malhas ferroviárias ligando cidades, conexões entre neurônios), “sociais” (colaboração entre pesquisadores, amizades), “conceituais” (*links* entre páginas da internet, interação entre genes), entre outras.

O foco desta dissertação é o *grafo aleatório exponencial* (ERG), um modelo usado para o estudo de redes empíricas (isto é, redes que são *observadas* na natureza, na sociedade, *et cetera*). Este é um modelo probabilístico, e sua aplicação envolve cálculos feitos com o auxílio de computadores. Estudamos um dos métodos mais usados para obter amostras de ERGs, chamado Método de Monte Carlo baseados em Cadeias de Markov (MCMC, definido na seção 4.2). Num caráter exploratório, amostramos alguns grafos aleatórios exponenciais (modelo aresta-triângulo, veja seção 3.4), e comparamos algumas características dessa amostra com a obtida de uma outra distribuição (grafos aleatórios binomiais, veja seção 3.1).

O próximo capítulo apresenta conceitos de probabilidade (seção 2.2), combinatória (seção 2.3) e estatística (seção 2.4) que são usados nos demais capítulos.

Capítulo 2

Preliminares

Neste capítulo introduzimos notações e conceitos elementares de probabilidade e combinatória. Usamos os símbolos

$\doteq$ indica “igualdade por definição”

$\mathbb{N}$ conjunto dos números naturais $\mathbb{N} \doteq \{1, 2, 3, \dots\}$

$\mathbb{R}$ conjunto dos números reais

2^A *conjunto potência* de A (*power set*), $2^A \doteq \{B : B \subseteq A\}$

$[n]$ subconjunto “canônico” com n elementos, $[n] \doteq \{1, \dots, n\}$

$|A|$ número de elementos no conjunto A , por exemplo $|2^{[n]}| = 2^n$

$n!$ fatorial, $n! \doteq n(n-1)(n-2) \cdots 2 \cdot 1$

$(n)_k$ fatorial decrescente (*falling factorial*), $(n)_k \doteq n(n-1)(n-2) \cdots (n-k+1)$

$\binom{A}{k}$ família de *k -subconjuntos*, $\binom{A}{k} \doteq \{B \subseteq A : |B| = k\}$

$\binom{n}{k}$ número de k -subconjuntos de $[n]$, $\binom{n}{k} \doteq |\binom{[n]}{k}| = \frac{(n)_k}{k!}$

$f[A]$ imagem da função f aplicada sobre A , $f[A] \doteq \{f(a) : a \in A\}$

A^k se A é um conjunto, indica o produto cartesiano $A \times A \times \cdots \times A$ (k fatores)

p, q exceto quando afirmado em contrário, neste texto $0 \leq p \leq 1$ e $q \doteq 1 - p$

$V(H), E(H), N(v)$ conjunto de vértices e de arestas de H ; conjunto de vizinhos de v

Adotamos a notação “[propriedade]” de Iverson, que significa:

$$[\text{propriedade}] \doteq \begin{cases} 1 & \text{se a propriedade vale, e} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Por exemplo: $\binom{n}{k} = \sum_{A \subseteq [n]} [|A| = k]$.

2.1 Valores assintóticos

Sejam f e g seqüências de números positivos. Escrevemos $f = o(g)$ se $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(n)}{g(n)} = 0$, e escrevemos $f = \Omega(g)$ se existem constantes C e n_0 tais que $Cf(n) \geq g(n)$ para $n > n_0$. Finalmente, escrevemos $f = \Theta(g)$ se $f = \Omega(g)$ e $g = \Omega(f)$.

Todos os logaritmos são relativos à base natural $e \approx 2.718$.

2.2 Probabilidade discreta

Um espaço de probabilidade é uma tripla $(\Omega, \mathcal{F}, P)$, onde Ω é um *conjunto enumerável* (i.e., existe injeção $f: \Omega \rightarrow \mathbb{N}$), $\mathcal{F} = 2^\Omega$ é o conjunto de todos os subconjuntos de Ω e $P: \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ é uma função que satisfaz às seguintes propriedades:

1. $0 \leq P \leq 1$, para todo $A \in \mathcal{F}$;
2. $P(\Omega) = 1$;
3. se $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{F}$ são dois a dois disjuntos, então $P(\bigcup_{k=1}^{\infty} A_k) = \sum_{k=1}^{\infty} P(A_k)$.

Podemos motivar esses axiomas da probabilidade interpretando $P(A)$ como a frequência empírica esperada para a ocorrência do evento A . Se realizamos n experimentos “independentes” (isto é, tais que o resultado de cada um não influencia o dos demais), e se contamos o número n_A ocorrências de A nos experimentos, então a frequência empírica $f(A) \doteq n_A/n$ deve estar próxima de $P(A)$ quando n é “grande o bastante”. Note que a função f satisfaz às três propriedades acima.

Probabilidade Condicional

Muitas afirmações sobre probabilidade têm a forma “se A ocorre, então a probabilidade de B é p ”, onde A e B são eventos e p é uma probabilidade. Para incluir este tipo de formulação em nosso formalismo, consideramos um experimento repetido n vezes, e dois eventos A e B , dos quais registramos os números de ocorrências n_A e n_B , respectivamente. Suponha que estejamos interessados em realizações do experimento nas quais B ocorre, e que ignoremos os demais experimentos. Nesta subcoleção de experimentos, a proporção de vezes que A ocorre é $n_{A \cap B}/n_B$, já que B ocorre em cada uma delas, e podemos escrever

$$\frac{n_{A \cap B}}{n_B} = \frac{n_{A \cap B}/n}{n_B/n},$$

onde $n_{A \cap B}$ é o número de ocorrências simultâneas de A e B . Estas frações podem ser vistas como probabilidades, e motivam a definição a seguir.

Dado que um evento B ocorre, sabemos que A ocorre se e somente se $A \cap B$ ocorre. Assim, a probabilidade condicional de A dado B , que denotamos por $P(A|B)$, deve ser proporcional a $P(A \cap B)$. Seja $P(A|B) = \alpha P(A \cap B)$ para alguma constante $\alpha = \alpha(B)$. A probabilidade condicional $P(\Omega|B)$ deve ser igual a 1, e então $\alpha P(\Omega \cap B) = 1$, donde $\alpha = 1/P(B)$. Assim, definimos a probabilidade condicional do evento A dado que um evento B ocorre por $P(A|B) \doteq P(A \cap B)/P(B)$. Observe que $(\Omega_B, \mathcal{F}_B, P_B)$,

onde $\Omega_B \doteq \Omega \cap B$, $\mathcal{F}_B \doteq \{A \cap B : A \in \mathcal{F}\}$, e $P_B(A) \doteq P(A|B)$ é um espaço de probabilidade.

Esta definição é o ponto de partida para a formalização do conceito de “independência”: dizemos que os eventos A e B são *independentes* se $P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B)$. Se $P(B) > 0$, isso implica que $P(A|B) = P(A)$ e $P(B|A) = P(B)$.

Por fim, enunciamos um resultado importante, a *lei da probabilidade total*. Seja $\mathcal{F} = \{B_i : i \in I\}$ partição de Ω , isto é, uma família de subconjuntos de Ω tal que $\bigcup_{i \in I} B_i = \Omega$ e, para $i, j \in I$, temos $B_i \cap B_j = \emptyset$ sempre que $i \neq j$. Então, para todo evento A , vale $P(A) = \sum_{i \in I} P(A|B_i) \cdot P(B_i)$.

Variáveis aleatórias

Seja $(\mathcal{F}, \Omega, P)$ um espaço de probabilidade, como na seção anterior. Uma *variável aleatória (real)*, ou VA, é uma função $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que para todo $a \in \mathbb{R}$, podemos atribuir probabilidade ao evento

$$\{X \leq a\} \doteq \{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq a\},$$

isto é, tal que $\{X \leq a\} \in \mathcal{F}$. Em particular, uma função $X : \Omega \rightarrow E$, onde E é um conjunto enumerável é dita uma *variável aleatória discreta* se para todo $x \in E$ vale $\{X = x\} \in \mathcal{F}$ (onde $\{X = x\} \doteq \{\omega \in \Omega : X(\omega) = x\}$). Uma *variável aleatória indicadora* de um evento A é $f_A(\omega) \doteq [\omega \in A]$.

Duas variáveis aleatórias *discretas* X e Y são independentes se para todo $x \in X[\Omega]$ e $y \in Y[\Omega]$ vale $P(X = x \text{ e } Y = y) = P(X = x) \cdot P(Y = y)$. Ademais, dizemos que duas variáveis aleatórias discretas X, Y são *condicionalmente independentes*, dadas variáveis Z_i , para $i \in I$ (um conjunto de índices) se para quaisquer valores $z_i \in Z_i[\Omega]$, $i \in I$ e quaisquer $x \in X[\Omega]$ e $y \in Y[\Omega]$ vale

$$P(X = x \text{ e } Y = y | \Omega_Z) = P(X = x | \Omega_Z) \cdot P(Y = y | \Omega_Z),$$

onde $\Omega_Z \doteq \bigcap_{i \in I} \{Z_i = z_i\}$. Note que não existe implicação entre independência e independência condicional (ou vice-versa).

Por fim, um conjunto de variáveis aleatórias $\{X_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ é dito independente se para qualquer subconjunto de índices $A \subseteq \Lambda$ e qualquer conjunto de valores $\{x_\lambda\}_{\lambda \in A}$, com $x_\lambda \in X_\lambda[\Omega]$ vale

$$P\left(\bigcap_{\lambda \in A} \{X_\lambda = x_\lambda\}\right) = \prod_{\lambda \in A} P(X_\lambda = x_\lambda).$$

Esperança e variância

A *esperança* $\mathbb{E}(X)$ de uma variável aleatória X é uma média ponderada dos valores $X[\Omega]$. Se X é uma VA discreta,

$$\mathbb{E}(X) \doteq \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega)P(\omega) = \sum_{x \in X[\Omega]} xP(X = x).$$

Note que, para quaisquer VA, vale $\mathbb{E}(X + Y) = \mathbb{E}(X) + \mathbb{E}(Y)$, e para toda constante c , temos $\mathbb{E}(cX) = c\mathbb{E}(X)$. Finalmente, se X é uma variável indicadora do evento A ,

então $\mathbb{E}(X) = P(A)$. A *variância* $\text{Var}(X)$ de X é definida por

$$\text{Var}(X) \doteq \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2).$$

As duas desigualdades a seguir são apresentadas na maior parte dos textos introdutórios sobre probabilidade, e justificam interpretar a esperança de X como “valor esperado” da variável, e sua variância como uma medida de *concentração* do valor de X no intervalo $[\mathbb{E}(X) - k \text{Var}(X), \mathbb{E}(X) + k \text{Var}(X)]$, para $k > 0$.

Teorema 2.1 (Desigualdade de Markov). Seja X uma VA que assume apenas valores não-negativos. Para todo $t > 0$ temos $P(X - \mathbb{E}(X) \geq t) \leq \mathbb{E}(X)/t$.

Teorema 2.2 (Desigualdade de Chebyshev). Seja X uma VA com esperança $\mathbb{E}(X) = \mu$ finita e variância σ^2 . Para todo $k > 0$ temos $P(|X - \mu| \geq k\sigma) \leq 1/k^2$.

Esperança condicional

A *esperança condicional* da VA discreta X , dado um evento B é definida por

$$\mathbb{E}(X|B) \doteq \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega)P(\omega|B) = \sum_{x \in X[\Omega]} xP(X = x|B)$$

onde $B \in \mathcal{F}$ é algum evento. Se $\mathbb{E}(X)$ é limitada, temos a *lei da esperança total* $\mathbb{E}(X) = \sum_{i \in I} P(B_i)\mathbb{E}(X|B_i)$, onde $\{B_i : i \in I\}$ é uma partição de Ω .

2.3 Grafos

A representação abstrata usual de uma rede, ou grafo $G = G(V, E)$ consiste de um conjunto V de *vértices* e um conjunto de *arestas* $E \subseteq \binom{V}{2}$. Quando $\{x, y\} \in E$, dizemos que os vértices x e y estão *conectados*, ou que são *vizinhos*. Um vértice é dito *isolado* se não possui vizinho. Por exemplo, o grafo com 3 vértices todos conectados entre si é chamado *triângulo*, e o grafo em que todos os vértices exceto um possuem o mesmo (único) vizinho é dito uma *estrela* (veja figura 2.1). Em geral, o grafo com n vértices todos conectados entre si é chamado *grafo completo*, e é denotado por K_n . Um *subgrafo* de $G = (V, E)$ é um grafo $H = (V', E')$ tal que $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$; indicamos “ H é subgrafo de G ” por $H \subseteq G$. Bollobás [Bol98] e Diestel [Die10] escreveram excelentes introduções à teoria dos grafos. Neste texto, os grafos são sempre *finitos* (têm conjunto de vértices finito).

Dois grafos $G = (V, E)$ e $H = (W, F)$ são *isomorfos* se existe uma bijeção $f: V \rightarrow W$ tal que $ij \in E \iff f(i)f(j) \in F$.



Figura 2.1: Exemplos de grafos. À esquerda, um triângulo. À direita, uma 5-estrela. Pontos representam vértices e as linhas representam arestas.

Estudos feitos nas últimas décadas apontam características estruturais comuns a várias redes empíricas. O leitor interessado encontrará diversas *surveys* sobre tais características [AB02]. Por exemplo, estas redes têm muitos vértices, e apresentam uma quantidade de arestas linear no número de vértices.

Agrupamento em redes empíricas

Outra propriedade de interesse apresentada por redes empíricas é chamada *agrupamento*. Esta noção captura a ideia de “tendência à transitividade” da relação indicada pelas arestas de um grafo. Informalmente, podemos interpretar esta tendência nas linhas da máxima “amigos de meus amigos são meus amigos”.

Para formalizar essa noção, consideramos, um grafo $G = (V, E)$ cujas arestas representam relações de amizade (vértices representam pessoas). Seja $N(v)$ o conjunto dos vizinhos de algum vértice $v \in V$, e seja $d(v) \doteq |N(v)|$. O número $e_v \doteq |E \cap \binom{N(v)}{2}|$ de arestas conectando vizinhos de v é um número natural entre 0 e $\binom{d(v)}{2}$. Definimos o *índice de agrupamento* por $\text{agrup}(v) \doteq e_v \binom{d(v)}{2}^{-1}$. Estudos sugerem que o valor médio de $\text{agrup}(v)$ em uma rede empírica é “alto” [AB02].

Denotamos o *agrupamento médio* de G por $\text{agrup}(G) \doteq |V|^{-1} \sum_{v \in V} \text{agrup}(v)$. Note que a cada conexão entre vizinhos u e w de v corresponde um triângulo (u, v, w) . Assim, esperamos encontrar um número “grande” de triângulos em redes empíricas.

Naturalmente, convém definir o que é um índice de agrupamento alto. Um modo de fazer isso é tomando como referência o valor médio de $\text{agrup}(G)$, sobre (todos) os grafos com n vértices, que calculamos a seguir (Afirmação 2.3). Usaremos frequentemente este tipo de comparação (veja seção 3.1).

Afirmação 2.3 (Agrupamento médio sobre grafos com n vértices). Seja $\mathcal{G}_n$ o conjunto dos grafos com n vértices. Vale

$$\frac{1}{|\mathcal{G}_n|} \sum_{G \in \mathcal{G}_n} \text{agrup}(G) = \frac{1}{2}.$$

Demonstração. Veja apêndice B. Um argumento simples para este resultado pode ser obtido usando argumentos probabilísticos (veja seção 3.1). $\square$

Em geral, escrevemos n para denotar o número de vértices de um grafo. O número de arestas e triângulos de um grafo G são denotados por $e(G)$ e $t(G)$, respectivamente. Dado um grafo G com conjunto V de vértices e $A \subseteq \binom{V}{2}$, dizemos que $A \subseteq G$ se todas as arestas de A estão presentes em G . Para $i, j \in V$, escrevemos “ $ij \in G$ ” se $\{i, j\}$ é uma aresta de G .

2.4 Estatística

Distinguimos entre parâmetros e estimadores de uma distribuição de probabilidade. Um *parâmetro* é uma função do espaço de probabilidade (por exemplo, a

esperança de uma variável aleatória), e um estimador é uma função de uma amostra, que usamos para estimar o valor de algum parâmetro (por exemplo, a média amostral — veja discussão abaixo).

Considere uma distribuição de probabilidade P , uniforme, sobre o conjunto $[n]$. A probabilidade do evento $A \subseteq [n]$ é $P(A) \doteq |A|/n$. Seja $X(i) \doteq i$ uma VA nesse espaço de probabilidade. A esperança de X é um parâmetro do modelo, com valor $\mathbb{E}(X) \doteq \sum_{i \in [n]} iP(X = i) = \sum_{i=1}^n i/n = (n+1)/2$. Sejam $X_1, X_2, \dots, X_k$ VAs idênticas a X (i.e., com a mesma distribuição) e independentes. Podemos estimar X usando a média amostral $M \doteq \sum_{i=1}^k X_i/k$. Note que $\mathbb{E}(M) = \mathbb{E}(X)$.

Adotamos a média amostral $\bar{X}$ e o desvio-padrão amostral s_X como estimadores, respectivamente, da esperança $\mathbb{E}(X)$ e do desvio-padrão $\sqrt{\text{Var } X}$, definidos a seguir.

A *média amostral* de X é denotada por $\bar{X}$, e seu *desvio padrão amostral* por s_X .

$$\bar{X} \doteq \frac{\sum_{i=1}^N X_i}{N} \quad \text{e} \quad s_X \doteq \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2}{N-1}},$$

onde as amostras são indexadas de 1 a N . Ademais, estimamos a covariância $C(x, y) \doteq \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))(Y - \mathbb{E}(Y)))$ e a correlação $C(x, y)/\sqrt{\text{Var } X \cdot \text{Var } Y}$ entre duas VAs X e Y , pela sua *covariância amostral* $\text{Cov}(X, Y)$ e *correlação amostral* $\text{Corr}(X, Y)$, respectivamente:

$$\text{Cov}(X, Y) \doteq \frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{N-1} \quad \text{e} \quad \text{Corr}(X, Y) \doteq \frac{\text{Cov}(X, Y)}{s_X s_Y}.$$

Informalmente, a covariância é uma medida de uma relação de linearidade entre VAs, e a correlação é uma versão normalizada da covariância (uma vez que $|\text{Corr}(X, Y)| \leq 1$). Note que uma expressão equivalente para a covariância entre X e Y é $\mathbb{E}(XY) - \mathbb{E}(X)\mathbb{E}(Y)$, e portanto variáveis independentes têm correlação nula.

Capítulo 3

Grafos Aleatórios Binomiais e Exponenciais

Nas discussões a seguir, usamos a palavra *modelo* para indicar uma distribuição, ou família de distribuições de probabilidade. Os modelos que abordamos possuem *parâmetros*, entre eles o número de vértices n , e com frequência estamos interessados no comportamento de amostras do modelo quando n tende a infinito.

3.1 Grafo Aleatório Binomial

Um *grafo aleatório* é uma variável aleatória que assume grafos como valores. Um dos modelos mais estudados é o Grafo Aleatório Binomial (BRG), denotado por $G(n, p)$. Ele é um grafo com n vértices rotulados, em que cada aresta está independentemente presente com probabilidade $p = p(n)$. Assim, $G(n, 1/2)$ é uma distribuição uniforme sobre os $2^{\binom{n}{2}}$ grafos rotulados. Em geral, a probabilidade de $G(n, p)$ ser um dado grafo $H = ([n], E)$ é

$$P(H) = p^{e(H)}(1 - p)^{\binom{n}{2} - e(H)}. \quad (3.1)$$

Para um tratamento mais extensivo do assunto, referimos o leitor a Bollobás [Bol01] e a Janson, Łuczak e Ruciński [JLR00].

Propriedades de $G(n, p)$

Nesta seção calculamos o número esperado de arestas e de triângulos de $G(n, p)$. Os cálculos são simples, e ilustram um tipo de raciocínio probabilístico importante no estudo de combinatória probabilística.

Afirmção 3.1 Seja $G \sim G(n, p)$, e $A \subseteq [n]$ um subconjunto dos vértices de G . O número esperado de arestas de G entre vértices em A é $\mathbb{E}(e(A)) = \binom{|A|}{2}p$.

Demonstração. Seja $X_e = [e \in E(G)]$. Assim, $X_e = 1$ se a aresta e está presente, e 0 caso contrário. Como X_e é uma variável indicadora, vale $\mathbb{E}(X_e) = P(X_e = 1)$. Ademais, $e(A) = \sum_{e \in \binom{A}{2}} X_e$, e por linearidade da esperança

$$\mathbb{E}(e(A)) = \mathbb{E}\left(\sum_{e \in \binom{A}{2}} X_e\right) = \sum_{e \in \binom{A}{2}} \mathbb{E}(X_e) = \binom{|A|}{2}p. \quad \square$$

Afirmção 3.2 Seja $G \sim G(n, p)$. Vale $\mathbb{E}(\text{agrup}(G)) = p^3$.

Demonstração. Por linearidade da esperança, temos

$$\mathbb{E}(\text{agrup}(G)) = n^{-1} \sum_{v \in [n]} \mathbb{E}(\text{agrup}(v)). \quad (3.2)$$

Considere os eventos $\Omega_A \doteq \{N(v) = A\}$, para $A \subseteq [n] - v$. Esses eventos formam uma *partição* de Ω (pois $\Omega = \bigcup_{A \subseteq [n]-v} \Omega_A$ e ainda $\Omega_A \cap \Omega_B = \emptyset$ se $A \neq B$). Assim,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\text{agrup}(v)) &= \sum_{A \subseteq [n]-v} P(\Omega_A) \mathbb{E}(\text{agrup}(v) | \Omega_A) \\ &= \sum_{A \subseteq [n]-v} P(\Omega_A) \mathbb{E}(e(A) | \Omega_A) \binom{|A|}{2}^{-1} \\ &= \sum_{A \subseteq [n]-v} P(\Omega_A) \binom{|A|}{2} p \binom{|A|}{2}^{-1} \\ &= p, \end{aligned}$$

Onde usamos a afirmação 3.1 para obter $\mathbb{E}(e(A) | \Omega_A) = \binom{|A|}{2} p$. Substituindo este valor na equação (3.2), completamos a demonstração. $\square$

Uma prova alternativa da afirmação 3.2 está no apêndice B.

Afirmção 3.3 Seja $G \sim G(n, p)$. Vale $\mathbb{E}(t(G)) = \binom{n}{3} p$.

Demonstração. Seja $X(\{u, v, w\}) = [\{u, v, w\} \text{ formam triângulo em } G]$. Assim

$$\mathbb{E}(t(G)) = \mathbb{E}\left(\sum_{A \in \binom{[n]}{3}} X(A)\right) = \sum_{A \in \binom{[n]}{3}} \mathbb{E}(X(A)) = \sum_{A \in \binom{[n]}{3}} p^3 = \binom{n}{3} p^3. \quad \square$$

3.2 Grafo Aleatório Exponencial

Apesar de rico em propriedades, o modelo BRG não é apropriado para descrever redes empíricas — como observado por Erdős e Rényi [ER60]. De fato, existem muitos outros modelos para redes na literatura da área [WS98, AB99, CDS10, vdH09] propostos com esse objetivo em vista. Nosso foco é o modelo chamado grafo aleatório exponencial (ERG), que é usado nas ciências sociais [HL81, SPRH06]. A probabilidade de um grafo G com n vértices neste modelo é dada por

$$p_\beta(G) \doteq \exp\left(\sum_{i=1}^k \beta_i T_i(G) - \psi(\beta)\right) \quad (3.3)$$

onde $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_k)$ é um vetor de parâmetros reais, $T_1, T_2, \dots, T_k$ são funções reais no espaço dos grafos (por exemplo, número de arestas, triângulos, estrelas, circuitos, ...), e ψ é uma *constante de normalização*, para que $\sum_G p_\beta(G) = 1$.

A expressão no expoente é por vezes chamada de Hamiltoniano (um termo da mecânica estatística, sem parentesco com o termo da teoria dos grafos), que é usado para ponderar a medida de probabilidade no espaço dos grafos, atribuindo maior massa a grafos com propriedades “desejáveis”. Por exemplo, fixamos parâmetros $h, \beta > 0$ e,

para todo grafo G com n vértices rotulados, $e(G)$ arestas e $t(G)$ triângulos, definimos o Hamiltoniano de G como

$$H(G) \doteq he(G) + \beta t(G). \quad (3.4)$$

Uma medida de probabilidade no espaço dos grafos pode então ser definida como

$$p_n(G) = \frac{e^{H(G)}}{e^{-\psi}}, \quad (3.5)$$

onde ψ é a constante de normalização, por vezes chamada de *função de partição*.

Observe que todo BRG é ERG. Considere o ERG com distribuição $p_n(G) = \exp(\beta e(G) - \psi)$, onde ψ é uma função de n e β . Como a soma das probabilidades dos grafos com n -vértices deve ser igual a 1, temos

$$1 = \sum_{i=0}^{\binom{n}{2}} \sum_{\substack{G \\ e(G)=i}} \exp(\beta i - \psi) = e^{-\psi} \sum_{i=0}^{\binom{n}{2}} \binom{\binom{n}{2}}{i} e^{\beta i} = e^{-\psi} (1 + e^\beta)^{\binom{n}{2}}, \quad (3.6)$$

onde G percorre todos os grafos com n vértices e i arestas. Então $e^\psi = (1 + e^\beta)^{\binom{n}{2}}$ e

$$p_n(G) = e^{e(G)\beta} (1 + e^\beta)^{-\binom{n}{2}} = \left(\frac{e^\beta}{1 + e^\beta} \right)^{e(G)} \left(1 - \frac{e^\beta}{1 + e^\beta} \right)^{\binom{n}{2} - e(G)}, \quad (3.7)$$

que é $G(n, e^\beta/(1 + e^\beta))$ com $0 < p = e^\beta/(1 + e^\beta) < 1$. Nos casos extremos, quando $p \in \{0, 1\}$, o grafo aleatório $G(n, p)$ assume valores únicos, e pode ser escrito na forma de um ERG usando funções indicadoras (do grafo vazio e do grafo completo).

Contudo, em geral, a distribuição de probabilidade de ERGs e de BRGs são distintas. Ademais, elas são difíceis de calcular (já que o número de grafos é $2^{\binom{n}{2}}$), o que impossibilita na prática a amostragem direta de ERGs. Isto motivou a busca de distribuições que aproximem ERGs. Em particular, deseja-se amostrar ERGs. Tais amostras são essenciais para aplicações estatísticas desses modelos [CD11].

Apresentamos a seguir uma caracterização das funções de probabilidade de grafos aleatórios, obtida por Frank e Strauss [FS86], aplicando o lema de Hammersley–Clifford [Bes74, Gri]. Ela é expressa em termos das dependências condicionais entre variáveis indicadoras das arestas do grafo.

Será útil representar um grafo $G = (V, E)$ com n vértices por um vetor $\mathbf{x} = (x_e) \in \{0, 1\}^{\binom{n}{2}}$, tal que $x_e = [e \in E]$. Assim, um grafo aleatório é uma distribuição de probabilidade sobre o conjunto desses vetores.

Estrutura de dependência

Sejam $Z_1, \dots, Z_m$ variáveis aleatórias discretas (isto é, variáveis que assumem valores em um conjunto finito). O *grafo de dependência* D de $Z_1, \dots, Z_m$ é um grafo com conjunto de vértices $[m]$, e arestas consistindo dos pares $\{i, j\} \in \binom{[m]}{2}$ tais que Z_i e Z_j são condicionalmente dependentes, dado o valor das demais variáveis

$$\begin{aligned} &P(Z_i = z_i, Z_j = z_j \mid Z_k = z_k, k \neq i, j) \\ &= P(Z_i = z_i \mid Z_k = z_k, k \neq i, j) P(Z_j = z_j \mid Z_k = z_k, k \neq i, j), \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde $z_k \in \{0, 1\}$, para todo $k \in [m]$ e $i, j, k \in [m]$. Por exemplo, uma sequência de variáveis aleatórias independentes possui grafo de dependência vazio (isto é, sem arestas), e uma cadeia de Markov $(Z_1, \dots, Z_m)$ possui grafo de dependência com arestas $\{i, i+1\}$ para $i \in [m-1]$ (veja seção 4.1). Uma *clique* do grafo de dependência D é um subconjunto não-vazio A de $[m]$ tal que $\binom{A}{2} \subseteq E(D)$.

Teorema 3.4 (Frank–Strauss [FS86]). Qualquer grafo aleatório G com conjunto de vértices $[n]$ e estrutura de dependência D tem função de probabilidade

$$P(G) = c^{-1} \exp \sum_{A \subseteq G} \alpha_A [A \text{ é uma clique de } D], \quad (3.9)$$

onde c é uma constante de normalização dada por

$$c = \sum_{G: P(G) > 0} \exp \sum_{A \subseteq G} \alpha_A [A \text{ é uma clique de } D], \quad (3.10)$$

e α_A são constantes arbitrárias.

A título de exemplo, vamos considerar o BRG $G(n, p)$. As $m = \binom{n}{2}$ variáveis indicadoras de arestas $X = (X(1), \dots, X(m))$ de $G(n, p)$ são independentes, e assim seu grafo de dependência possui apenas cliques unitários. Logo sua distribuição de probabilidade pode ser escrita como

$$P(X = \mathbf{x}) = c^{-1} \prod_{x_e=1} \exp \alpha_e, \quad (3.11)$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m) \in \{0, 1\}^{\binom{n}{2}}$ é um vetor com $\binom{n}{2}$ coordenadas, representando um grafo com n vértices, e $\alpha_e = \alpha_{\{e\}}$. A constante de normalização é

$$c = \sum_{\mathbf{y} \in \{0,1\}^k} \prod_{e \text{ aresta de } \mathbf{y}} \exp \alpha_e = \prod_{i < j} (1 + \exp \alpha_e). \quad (3.12)$$

Fatorando c de acordo com a presença ou ausência de cada aresta e , a equação (3.11) se torna

$$P(X = \mathbf{x}) = \left[\prod_{e \text{ aresta de } \mathbf{x}} \frac{\exp \alpha_e}{1 + \exp \alpha_e} \right] \bigg/ \left[\prod_{e \text{ não é aresta de } \mathbf{x}} (1 + \exp \alpha_e) \right]. \quad (3.13)$$

(Compare com a equação (3.7).) E assim a probabilidade $p_e \doteq P(X(e) = 1)$ de uma aresta fixada e estar presente é $p_e = \exp \alpha_e / (1 + \exp \alpha_e)$, ou, de outro modo $\alpha_e = \log(p_e / (1 - p_e))$.

3.3 Grafos de Markov

A estrutura de dependência introduzida na seção anterior motivou a definição de outra classe de grafos aleatórios, os *grafos de Markov* [FS86]. Um grafo aleatório é dito *grafo de Markov* se arestas disjuntas são condicionalmente independentes. Em símbolos, denotando por $X_{ab} \doteq [\{a, b\} \in E(G)]$ a variável indicadora da aresta $\{a, b\}$, temos, para quaisquer vértices a, b, c e d *distintos* do grafo de Markov,

$$P(X_{ab} = x_{ab} \text{ e } X_{cd} = x_{cd} \mid \Omega') = P(E(ab) = e_{ab} \mid \Omega') \cdot P(E(cd) = e_{cd} \mid \Omega') \quad (3.14)$$

onde $\Omega' \doteq \{X_e = x_e, e \in E(G) \setminus \{ab, cd\}\}$ e $x_{ab}, x_{cd}, x_e \in \{0, 1\}$. Assim, para grafos de Markov, as cliques do grafo de dependência D correspondem a conjuntos de arestas tais que qualquer par de arestas compartilha um vértice. (Os únicos grafos sem vértices isolados que satisfazem a essa restrição são triângulos e estrelas—veja o lema 3.5.)

Ressaltamos (novamente) que independência não implica independência condicional (ou vice-versa), e os grafos de Markov *não são*, em geral, uma generalização (ou uma subclasse) de BRGs. Por outro lado, eles são uma subclasse de ERGs, conforme veremos a seguir (teoremas 3.6 e 3.7).

Lema 3.5 Seja $G = (V, E)$ um grafo com ao menos uma aresta e sem vértices isolados. Se todo par de arestas $e, f \in E$ de G possui vértice em comum (i.e.: $e \cap f \neq \emptyset$), então G é um triângulo ou uma estrela.

Demonstração. Veja apêndice B. □

No mesmo artigo, Frank e Strauss apresentam fórmulas gerais para a distribuição de grafos de Markov. O resultado a seguir é o caso especial em que grafos isomorfos ocorrem com igual probabilidade.

Teorema 3.6 (Frank–Strauss [FS86]). A distribuição de um grafo de Markov pode ser escrita como

$$P(G) = c^{-1} \exp \left(\tau t + \sum_{k=1}^{n-1} \sigma_k s_k \right), \quad (3.15)$$

onde τ e σ_k são constantes arbitrárias, t e s_k são o número de triângulos e de k -estrelas em G , respectivamente, e c é uma constante de normalização.

Adiante demonstramos a recíproca deste resultado (Teorema 3.7): um grafo aleatório cuja expressão assume a forma da equação (3.15) é um grafo de Markov.

3.4 O modelo aresta-triângulo

A família *aresta-triângulo* de ERGs consiste de distribuições de probabilidade sobre grafos rotulados com n vértices da forma

$$p_{n, \beta_1, \beta_2} = p_{\beta_1, \beta_2}(G) = \exp \left(2\beta_1 e(G) + \frac{6\beta_2}{n} t(G) - n^2 \psi \right), \quad (3.16)$$

onde $\psi = \psi_n(\beta_1, \beta_2)$, e a normalização busca garantir que o limite seja não-trivial para n grande (caso contrário quase todos os grafos são vazios ou completos). Este modelo foi o foco de vários estudos (veja, por exemplo [FS86, HJ99]).

O teorema a seguir completa uma caracterização dos grafos de Markov (teorema 3.6).

Teorema 3.7 Todo grafo aleatório exponencial aresta-triângulo é um grafo de Markov.

Demonstração. Vamos demonstrar que se G é um grafo aleatório com distribuição do modelo aresta-triângulo, então, para quaisquer arestas $e \doteq \{a, b\}$ e $f \doteq \{c, d\}$,

$$P(X_e = x_e, X_f = x_f | \Omega_{ef}) = P(X_e = x_e | \Omega_{ef}) \cdot P(X_f = x_f | \Omega_{ef}), \quad (3.17)$$

onde por conveniência escrevemos “ $X_e = x_e, X_f = x_f$ ” para “ $\{X_e = x_e\} \cap \{X_f = x_f\}$ ”, e $\Omega_{ef} \doteq \bigcap_{g \in \binom{[n]}{2} \setminus \{e,f\}} \{X_g = x_g\}$. Como antes, para qualquer aresta $e' = \{u, v\} \in \binom{[n]}{2}$, temos $x_{e'} \doteq x_{uv} \in \{0, 1\}$, e para qualquer tripla de vértices $\{u, v, w\} \in \binom{[n]}{3}$, temos $x_{uvw} \doteq x_{uv}x_{uw}x_{vw}$. Escrevemos a distribuição de probabilidade de G na forma

$$p(G) \doteq \exp \left(\beta_1 \sum_{\{i,j\} \in \binom{[n]}{2}} X_{ij} + \beta_2 \sum_{\{i,j,k\} \in \binom{[n]}{3}} X_{ijk} - \psi \right),$$

onde $X_{ij} \doteq [ij \in G]$, $X_{ijk} \doteq X_{ij}X_{ik}X_{jk}$, e $\psi = \psi_n$ é a constante de normalização do modelo. Seja $\Omega_e \doteq \{X_e = x_e\}$, e $\Omega_f \doteq \{X_f = x_f\}$. Temos

$$P(X_e = x_e | \Omega_{ef}) \cdot P(X_f = x_f | \Omega_{ef}) \doteq P(\Omega_e | \Omega_{ef}) \cdot P(\Omega_f | \Omega_{ef}) \quad (3.18)$$

$$\doteq \frac{P(\Omega_e \cap \Omega_{ef}) \cdot P(\Omega_f \cap \Omega_{ef})}{(P(\Omega_{ef}))^2}. \quad (3.19)$$

Como $P(\{X_e = x_e, X_f = x_f | \Omega_{ef}\}) = P(\Omega_e \cap \Omega_f \cap \Omega_{ef}) / P(\Omega_{ef})$, basta demonstrar que

$$P(\Omega_e \cap \Omega_{ef}) \cdot P(\Omega_f \cap \Omega_{ef}) = P(\Omega_e \cap \Omega_f \cap \Omega_{ef}) \cdot P(\Omega_{ef}).$$

Observe que $P(\Omega_e \cap \Omega_{ef}) = \sum_{i \in \{0,1\}} P(\{X_e = x_e\} \cap \{X_f = i\} \cap \Omega_{ef})$. Uma vez que $\{0, 1\} = \{x_f, 1 - x_f\} = \{x_e, 1 - x_e\}$, podemos escrever

$$\begin{aligned} P(\Omega_e \cap \Omega_{ef}) &= \sum_{k \in \{x_f, 1-x_f\}} \exp \left(\beta_1 \left(x_e + k + \sum_{ij \neq e,f} x_{ij} \right) \right. \\ &\quad \left. + \beta_2 \left(\sum_{\substack{u,v,w \in [n] \\ ab \notin \{uv, uw, vw\} \\ cd \notin \{uv, uw, vw\}}} x_{uvw} + \sum_{u \neq a,b} x_e x_{ua} x_{ub} + \sum_{v \neq c,d} k x_{vc} x_{vd} \right) - \psi \right). \end{aligned}$$

Vale uma expressão análoga para $P(\Omega_f \cap \Omega_{ef})$:

$$\begin{aligned} P(\Omega_f \cap \Omega_{ef}) &= \sum_{\ell \in \{x_e, 1-x_e\}} \exp \left(\beta_1 \left(\ell + x_f + \sum_{ij \neq e,f} x_{ij} \right) \right. \\ &\quad \left. + \beta_2 \left(\sum_{\substack{u,v,w \in [n] \\ ab \notin \{uv, uw, vw\} \\ cd \notin \{uv, uw, vw\}}} x_{uvw} + \sum_{u \neq a,b} \ell x_{ua} x_{ub} + \sum_{v \neq c,d} x_f x_{vc} x_{vd} \right) - \psi \right). \end{aligned}$$

Podemos fatorar o produto

$$\begin{aligned} P(\Omega_e \cap \Omega_{ef}) \cdot P(\Omega_f \cap \Omega_{ef}) &= \exp \left(\sum_{ij \neq e,f} x_{ij} + \sum_{\substack{u,v,w \in [n] \\ ab \notin \{uv, uw, vw\} \\ cd \notin \{uv, uw, vw\}}} x_{uvw} - \psi \right)^2 \\ &\cdot \left(\sum_{k \in \{x_f, 1-x_f\}} \exp \left(\beta_1 (x_e + k) + \beta_2 \left(\sum_{u \neq a,b} x_e x_{ua} x_{ub} + \sum_{v \neq c,d} k x_{vc} x_{vd} \right) \right) \right) \\ &\cdot \left(\sum_{\ell \in \{x_e, 1-x_e\}} \exp \left(\beta_1 (\ell + x_f) + \beta_2 \left(\sum_{u \neq a,b} \ell x_{ua} x_{ub} + \sum_{v \neq c,d} x_f x_{vc} x_{vd} \right) \right) \right) \quad (3.20) \end{aligned}$$

Observamos agora que para quaisquer constantes C_1, C_2, C_3, C_4 ,

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{k \in \{x_f, 1-x_f\}} \exp(x_e C_1 + k C_2 + x_e C_3 + k C_4) \right) \cdot \left(\sum_{\ell \in \{x_e, 1-x_e\}} \exp(\ell C_1 + x_f C_2 + \ell C_3 + x_f C_4) \right) \\ &= \exp(x_e(C_1 + C_3) + x_f(C_2 + C_4)) \sum_{\substack{k \in \{0,1\} \\ \ell \in \{0,1\}}} \exp(\ell(C_1 + C_3) + k(C_2 + C_4)) \end{aligned}$$

Substituindo em (3.20), obtemos,

$$\begin{aligned} & P(\Omega_e \cap \Omega_{ef}) \cdot P(\Omega_f \cap \Omega_{ef}) \\ &= \exp \left(\sum_{ij \neq e,f} x_{ij} + \sum_{\substack{u,v,w \in [n] \\ ab \notin \{uv, uw, vw\} \\ cd \notin \{uv, uw, vw\}}} x_{uvw} - \psi \right)^2 \\ & \quad \cdot \exp \left(x_e \left(\beta_1 + \beta_2 \sum_{u \neq a,b} x_{ua} x_{ub} \right) + x_f \left(\beta_1 + \beta_2 \sum_{v \neq c,d} x_{vc} x_{vd} \right) \right) \\ & \quad \cdot \sum_{\substack{k \in \{0,1\} \\ \ell \in \{0,1\}}} \exp \left(\ell \left(\beta_1 + \beta_2 \sum_{u \neq a,b} x_{ua} x_{ub} \right) + k \left(\beta_1 + \beta_2 \sum_{v \neq c,d} x_{vc} x_{vd} \right) \right) \\ &= P(\Omega_e \cap \Omega_f \cap \Omega_{ef}) \sum_{\substack{k \in \{0,1\} \\ \ell \in \{0,1\}}} P(\{X_e = \ell\} \cap \{X_f = k\} \cap \Omega_{ef}) \\ &= P(\Omega_e \cap \Omega_f \cap \Omega_{ef}) \sum_{\substack{k \in \{0,1\} \\ \ell \in \{0,1\}}} P(\Omega_{ef} | X_e = \ell, X_f = k) P(X_e = \ell, X_f = k) \\ &= P(\Omega_e \cap \Omega_f \cap \Omega_{ef}) P(\Omega_{ef}). \end{aligned}$$

□

Notamos que, com pequenas alterações na demonstração, podemos generalizar a demonstração do teorema 3.7 para ERGs

$$p'_n(G) \doteq c^{-1} \exp \left(\sum_{\{i,j\} \in \binom{[n]}{2}} \beta_{ij} X_{ij} + \sum_{\{i,j,k\} \in \binom{[n]}{3}} \beta_{ijk} X_{ij} X_{ik} X_{jk} \right),$$

onde β_{ij} e β_{ijk} são constantes que podem depender de n , e c é uma constante de normalização. Essa formulação, ligeiramente mais geral que a versão enunciada abaixo, é a recíproca do teorema apresentado por Frank e Strauss (Teorema 3 em [FS86]).

3.5 Modelo aresta-triângulo e BRGs

Se o parâmetro β_2 do modelo aresta-triângulo é positivo, então podemos determinar a constante de normalização ψ_n em (3.16), quando $\beta_2 \geq 0$ e $n \rightarrow \infty$. O resultado foi obtido por Chatterjee e Diaconis [CD11], usando limites de grafos (veja o capítulo 5):

$$\psi_n(\beta_1, \beta_2) \simeq \sup_{0 \leq u \leq 1} \left(\beta_1 u + \beta_2 u^3 - \frac{1}{2} u \log u - \frac{1}{2} (1-u) \log(1-u) \right). \quad (3.21)$$

Ademais, num certo sentido, o valor u^* que atinge o máximo em (3.21) é tal que $G(n, u^*)$ é “próximo” de $p_{n, \beta_1, \beta_2}(G)$ (veja o capítulo 5).

Capítulo 4

Métodos de Monte Carlo baseados em Cadeias de Markov

Cadeias de Markov e métodos de Monte Carlo são assunto de extensa literatura. A seguir apresentamos alguns aspectos dessa rica teoria. Excelentes introduções ao assunto foram escritas por Brémaud [Bré99], Diaconis [Dia08], e Levin, Peres e Wilmer [LPW09].

4.1 Cadeias de Markov

Seja $\mathcal{X}$ um conjunto finito, e $K(x, y)$ uma matriz com linhas e colunas indexadas por $\mathcal{X}$ tal que $K(x, y) \geq 0$ para todo $x, y \in \mathcal{X}$ e $\sum_{y \in \mathcal{X}} K(x, y) = 1$ para cada $x \in \mathcal{X}$. Isto faz de cada linha de K uma medida de probabilidade e podemos usar K para dirigir um passeio aleatório sobre $\mathcal{X}$: a partir de x , prosseguimos para y com probabilidade $K(x, y)$. Uma *cadeia de Markov* é uma sequência de variáveis aleatórias $\{X_i\}_{i \geq 0}$ cada uma assumindo valores em $\mathcal{X}$, tal que a probabilidade condicional de X_{n+1} dado $X_j = x_j$, onde $x_j \in \mathcal{X}$ e $0 \leq j \leq n$ é

$$P(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_j = x_j, 0 \leq j \leq n) = K(x_n, x_{n+1}). \quad (4.1)$$

Então $P(X_{n+2} = z \mid X_n = x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} K(x, y)K(y, z)$. Em geral, a k -ésima potência de K tem entrada $K^k(x, y) = P(X_{n+k} = y \mid X_n = x)$. Uma distribuição π sobre $\mathcal{X}$ é dita *estacionária* para K se

$$\sum_{x \in \mathcal{X}} \pi(x)K(x, y) = \pi(y), \quad (4.2)$$

isto é, se π é um autovetor de K com autovalor 1. Uma interpretação de (4.2) é “escolha x segundo π e avance um passo de acordo com $K(x, y)$; a probabilidade de estar em y é $\pi(y)$.” O teorema a seguir garante que sob algumas condições naturais de corretude, π é única e potências grande de K convergem para a matriz de posto 1 com todas as linhas iguais a $\pi(x)$.

Teorema 4.1 Seja $\mathcal{X}$ um conjunto finito e $K(x, y)$ uma cadeia de Markov indexada por $\mathcal{X}$. Se existe n^* tal que $K^{n^*}(x, y) > 0$ para todo $n \geq n^*$, então K possui uma

única distribuição estacionária π e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} K^n(x, y) = \pi(y) \quad \text{para cada } x \text{ e } y \text{ em } \mathcal{X}.$$

Uma cadeia de Markov satisfazendo as condições do teorema é dita *ergódica*. O conteúdo probabilístico do teorema é que partindo de qualquer estado inicial x , o n -ésimo passo de uma simulação da cadeia tem probabilidade próxima de $\pi(y)$ de estar em y se n é grande. Uma observação chave é que tipicamente, na aplicação do método que vamos descrever, $|\mathcal{X}|$ é grande; é fácil ir de x a y de acordo com $K(x, y)$; e é difícil amostrar a partir de π diretamente [Dia08].

Como um exemplo, considere o ERG aresta-triângulo. O espaço de estados $\mathcal{X}$ é o conjunto $\mathcal{G}_n$ de todos os $2^{\binom{n}{2}}$ grafos rotulados com n vértices, e a constante de normalização do modelo é

$$e^{-\psi} = \sum_{G \in \mathcal{G}_n} p_\beta(G),$$

que possui um número de termos exponencial em n .

4.2 Métodos de Monte Carlo baseados em Cadeias de Markov

O *Método de Monte Carlo baseado em cadeias de Markov* é uma técnica para obter amostras de uma distribuição π . Ele tem a vantagem de dispensar o cálculo da constante de normalização (e sua aplicação neste estudo requer apenas o cálculo do hamiltoniano de um número limitado de grafos). O método MCMC consiste em simular uma cadeia de Markov que possui p_β como distribuição limite. Para obter uma amostra aproximada de p_β , basta ler o estado do processo após um número adequado de transições.

Seja $\mathcal{X}$ um conjunto finito e $\pi(x)$ uma distribuição de probabilidade sobre $\mathcal{X}$, conhecida a menos de uma constante de normalização. Seja $J(x, y)$ uma matriz de transição de uma cadeia de Markov sobre $\mathcal{X}$ tal que $J(x, y) > 0$ se e somente se $J(y, x) > 0$, e seja $A(x, y) \doteq \pi(y)J(y, x)/\pi(x)J(x, y)$. Note que J não precisa ter relação com π . Chamamos J de *cadeia de proposta*, e A de *razão de aceitação*. O algoritmo *Metropolis–Hastings* transforma J em uma nova matriz de Markov $K(x, y)$ com distribuição estacionária π . A descrição algorítmica da transformação é a seguinte: a partir de x , escolha y com probabilidade $J(x, y)$; se $A(x, y) \geq 1$, passe para o estado y ; caso contrário, lance uma moeda que tenha probabilidade de “cara” $A(x, y)$: caso o resultado do experimento seja “cara”, passe para o estado y e permaneça no estado x caso contrário. Em símbolos,

$$K(x, y) \doteq \begin{cases} J(x, y) & \text{se } x \neq y \text{ e } A(x, y) \geq 1, \\ J(x, y)A(x, y) & \text{se } x \neq y \text{ e } A(x, y) < 1, \\ J(x, y) + \sum_{z: A(x, z) < 1} J(x, z)(1 - A(x, z)) & \text{se } x = y. \end{cases} \quad (4.3)$$

Note que a constante de normalização é cancelada nos cálculos. A razão de aceitação é tal que a cadeia K satisfaz $\pi(x)K(x, y) = \pi(y)K(y, x)$, o que implica que K possui

distribuição estacionária π . De fato,

$$\sum_{x \in \mathcal{X}} \pi(x) K(x, y) = \sum_{x \in \mathcal{X}} \pi(y) K(y, x) = \pi(y) \sum_{x \in \mathcal{X}} K(y, x) = \pi(y),$$

donde K e π satisfazem (4.2). Quando a cadeia de proposta é simétrica (isto é, $J(x, y) = J(y, x)$), o algoritmo da equação (4.3) é chamado *Metropolis*.

Dada uma cadeia de proposta, a questão essencial é determinar a “velocidade” da convergência à distribuição estacionária, isto é, quantos passos da simulação são necessários para que o estado da cadeia tenha distribuição próxima à da distribuição estacionária. Este valor é chamado de *tempo de mistura* da cadeia.

4.3 Tempo de mistura de grafos aleatórios exponenciais

Podemos avaliar a distância entre uma cadeia de Markov $K(x, y)$ e sua distribuição estacionária π usando a *distância variacional total*

$$\|K_x^n - \pi\|_{\text{TV}} \doteq \sup_{A \subseteq \mathcal{X}} |K^n(x, A) - \pi(A)|, \quad (4.4)$$

onde $K^n(x, A) = \sum_{y \in A} K^n(x, y)$ e $\pi(A) = \sum_{y \in A} \pi(y)$. Se $\mathcal{X}$ é finito, temos

$$\|K_x^n - \pi\|_{\text{TV}} = \max_{A \subseteq \mathcal{X}} |K^n(x, A) - \pi(A)| \quad (4.5)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{y \in \mathcal{X}} |K^n(x, y) - \pi(y)|. \quad (4.6)$$

Para demonstrar (4.6), considere o conjunto A^* que atinge o máximo

$$|K^n(x, A^*) - \pi(A^*)| = \max_{A \subseteq \mathcal{X}} |K^n(x, A) - \pi(A)|,$$

e seja $B \doteq \mathcal{X} \setminus A^*$. Temos

$$\begin{aligned} K^n(x, \mathcal{X}) &= K^n(x, A^*) + K^n(x, B) = \pi(A^*) + \pi(B) = \pi(\mathcal{X}) = 1 \\ K^n(x, A^*) - \pi(A^*) &= -(K^n(x, B) - \pi(B)). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Ademais, note que se $a \in A^*$, então o sinal de $K^n(x, a) - \pi(a)$ seja o mesmo de $K^n(x, A^*) - \pi(A^*)$, pois caso contrário, se $A' \doteq A^* \setminus \{a\}$,

$$|K^n(x, A') - \pi(A')| > |K^n(x, A^*) - \pi(A^*)|.$$

O mesmo raciocínio mostra que não existe $b \in B$ tal que o sinal de $K^n(x, b) - \pi(b)$ seja o mesmo que o sinal de $K^n(x, A^*) - \pi(A^*)$, pois caso contrário, se $A' \doteq A^* \cup \{b\}$,

$$|K^n(x, A') - \pi(A')| > |K^n(x, A^*) - \pi(A^*)|.$$

Em ambos os casos, o conjunto A' contradiz a escolha de A^* .

Tudo isso mostra que podemos decidir se um dado elemento $y \in \mathcal{X}$ pertence a A^* (ou a B) conferindo o sinal de $K^n(x, y) - \pi(y)$, o que também implica que

$$\left| \sum_{y \in B} K^n(x, y) - \pi(y) \right| = \sum_{y \in B} |K^n(x, y) - \pi(y)|,$$

e que

$$\left| \sum_{y \in A^*} K^n(x, y) - \pi(y) \right| = \sum_{y \in A^*} |K^n(x, y) - \pi(y)|.$$

Portanto, por (4.7)

$$\begin{aligned} |K^n(x, A^*) - \pi(A^*)| &= |K^n(x, B) - \pi(B)| \\ 2|K^n(x, A^*) - \pi(A^*)| &= |K^n(x, A^*) - \pi(A^*)| + |K^n(x, B) - \pi(B)| \\ 2 \max_{A \subseteq \mathcal{X}} |K^n(x, A) - \pi(A)| &= \sum_{y \in A^*} |K^n(x, y) - \pi(y)| + \sum_{y \in B} |K^n(x, y) - \pi(y)| \\ \max_{A \subseteq \mathcal{X}} |K^n(x, A) - \pi(A)| &= \frac{1}{2} \sum_{y \in \mathcal{X}} |K^n(x, y) - \pi(y)|. \end{aligned}$$

A expressão $\|K_x^n - \pi\|_{\text{TV}}$ assume um valor entre 0 e 1, e estamos interessados no seguinte problema: dados K, π, x e $\epsilon > 0$, quão grande deve ser n para que

$$\|K_x^n - \pi\|_{\text{TV}} < \epsilon. \quad (4.8)$$

O *tempo de mistura* de K é o menor tempo n^* tal que $\max_{x \in \mathcal{X}} \|K_x^{n^*} - \pi\|_{\text{TV}} < e^{-1}$. Outro modo de limitar o tempo de mistura é via *acoplamento de cadeias* [Dia08]. Nessa técnica, dois processos de Markov evoluem simultaneamente, segundo o operador de transições K , até o ponto em que se encontram: a partir de então elas se tornam “acopladas” e prosseguem juntas.

Formalmente, o acoplamento das cadeias X e Y , definidas sobre o espaço de estados $\mathcal{X}$ é um processo $Z_n = (X_n, Y_n)$ sobre o espaço de estados $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$ tal que cada uma das coordenadas é marginalmente distribuída como um processo de Markov K . Isto é, escrevendo $Q((i, j), (i', j')) \doteq \mathbb{P}((X_{n+1}, Y_{n+1}) = (i', j') \mid (X_n, Y_n) = (i, j))$,

$$\sum_{j' \in \mathcal{X}} Q((i, i'), (j, j')) = K(i, j) \quad \text{e} \quad \sum_{j \in \mathcal{X}} Q((i, i'), (j, j')) = K(i', j').$$

A título de exemplo, considere duas cadeias, uma das quais parte de um estado tomado aleatoriamente segundo a distribuição estacionária e outra que parte de um estado fixo. Como a cadeia estacionária mantém-se estacionária em todos os passos, um limitante superior para o tempo de mistura é obtido estimando o número de transições até o acoplamento. O lema a seguir é útil nesse sentido.

Lema 4.2 (Lema do tempo de mistura). Para uma cadeia de Markov K , suponha que existem duas cópias acopladas, Y e Z , tais que cada uma tenha distribuição marginal X e

$$\max_{y, z} \mathbb{P}(Y_t \neq Z_t \mid Y_0 = y, Z_0 = z) \leq (2e)^{-1}.$$

Então o tempo de mistura de X é limitado superiormente por t .

Isto é, se a probabilidade de “não-acoplamento” no “instante” t é suficientemente baixa, então t é um limita (superiormente) para o tempo de mistura (veja [LPW09]).

Mencionamos aqui os resultados de Bhamidi, Bresler e Sly [BBS11], sobre o tempo de mistura de ERGs da equação (4.9). Seus resultados valem para esquemas de proposta de transições, chamados *dinâmicas locais*, no qual a cadeia de proposta só permite transições entre grafos que difiram quanto à presença ou ausência de não

mais que $o(n)$ arestas. Se permitimos a alteração de no máximo uma aresta por vez, temos uma *dinâmica de Glauber*.

Estes autores estudam (a subclasse de) ERGs expressos por

$$p_{n,\beta}(X) = \exp \left(\sum_{i=1}^k \beta_i \frac{\text{dens}(G_i, X)}{n^{e(G_i)-2}} - \psi_n(\beta) \right), \quad (4.9)$$

onde G_i são grafos com $e(G_i)$ arestas cada, para $i = 1, \dots, k$, e $\text{dens}(G_i, X)$ é o número de cópias rotuladas de G_i em X (isto é o número de injeções $V(G_i) \rightarrow [n]$ que preservam arestas do conjunto de vértices de G_i a vértices distintos de X).

Bhamidi, Bresler e Sly caracterizaram o comportamento de dinâmicas locais: se $\beta_2, \dots, \beta_k$ são positivos (i.e., $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k) \in \mathbb{R} \times (\mathbb{R}_+)^{k-1}$), então para n suficientemente grande,

- ou o modelo é essencialmente o mesmo que um BRG, e o tempo de mistura da cadeia de Markov é $n^2 \log n$;
- ou a cadeia de Markov leva um tempo exponencial de passos para misturar.

Capítulo 5

Limites de Grafos

A comparação entre grafos aleatórios binomiais e exponenciais feita por Chatterjee e Diaconis [CD11] emprega a teoria de limites de grafos, desenvolvida em uma série de artigos por L. Lovász, V.T. Sós, B. Szegedy, C. Borgs, J. Chayes, K. Vesztergombi, A. Schriver e M. Freedman (veja [BCL⁺06, BCL⁺08, BCL⁺, LS06]). Nesses estudos, grafos com muitos vértices são comparados usando contagens de subgrafos. Nesta seção apresentamos algumas das ideias envolvidas na comparação dos modelos, embora a apresentação esteja longe de ser exaustiva.

Um *homomorfismo de grafos* é uma função $f: V(G) \rightarrow V(H)$ entre o conjunto de vértices dos grafos G, H que preserva arestas: $ij \in E(G) \implies f(i)f(j) \in E(H)$. Para quaisquer grafos G, H , denotamos por $|\text{hom}(H, G)|$ o número de homomorfismos de H em G (isto é, o número de funções $V(H) \rightarrow V(G)$ entre os conjuntos de vértices de H e de G tais que todo par de vértices adjacentes em H é levado a um par de vértices adjacentes em G). Ademais, definimos a *densidade de homomorfismos*

$$\text{dens}(H, G) \doteq \frac{|\text{hom}(H, G)|}{|V(G)|^{|V(H)|}} \quad (5.1)$$

que é a probabilidade de uma função $V(H) \rightarrow V(G)$ escolhida uniformemente ao acaso ser um homomorfismo.

Seja $\{G_n\}_{n \geq 1}$ uma sequência de grafos tal que o número de vértices de G_n tende a infinito quando $n \rightarrow \infty$. Suponha que os grafos G_n se tornam mais similares à medida que n aumenta, no sentido de que $\text{dens}(H, G_n)$ tende a um limite $\text{dens}(H)$ para todo grafo H . Um dos resultados do trabalho de Lovász e colaboradores é a identificação de um objeto limite para tais sequências.

O *grafo limite* da sequência, ou *graphon*, é um objeto a partir do qual os valores de $\text{dens}(H)$ podem ser obtidos. Além disso, é um fato que todo graphon (veja definição abaixo) é limite de alguma sequência de grafos [LS06].

Os objetos-limite são funções $h \in \mathcal{W}$, onde $\mathcal{W}$ é o espaço de todas as funções mensuráveis de $[0, 1]^2$ em $[0, 1]$ que satisfazem $h(x, y) = h(y, x)$, para todo x, y .

O graphon determina todos os limites de densidades de subgrafos: seja H um grafo com conjunto de vértices $V(H) = [k]$ e

$$\text{dens}(H, h) = \int_{[0, 1]^k} \prod_{\{i, j\} \in E(H)} h(x_i, x_j) dx_1 \dots dx_k. \quad (5.2)$$

Dizemos que uma sequência de grafos $\{G_n\}_{n \geq 1}$ converge para h se para todo grafo H

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{dens}(H, G_n) = \text{dens}(H, h). \quad (5.3)$$

Para um grafo fixo G , definimos

$$f^G(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{se } ([nx], [ny]) \text{ é uma aresta de } G, \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.4)$$

Segue que o limite da sequência constante $G, G, \dots$ é f^G , isto é $\text{dens}(H, f^G) = \text{dens}(H, G)$ para todo grafo H .

Ademais, existe uma métrica no espaço dos graphons (definida pela chamada *distância de corte*) com a seguinte propriedade: graphons h_1 e h_2 próximos têm valores $\text{dens}(F, h_1)$ e $\text{dens}(F, h_2)$ semelhantes, para qualquer grafo fixo F . Uma discussão mais completa do assunto escapa ao escopo deste trabalho, e referimos o leitor interessado aos artigos supracitados, e ao recente livro de Lovász [Lov12].

Considere duas sequências de grafos $\{F_k\}_{k \geq 1}$ e $\{G_\ell\}_{\ell \geq 1}$, obtidas, respectivamente, segundo algum modelo BRG, e algum modelo ERG, com $|V(F_i)| = |V(G_i)| = i$. Ademais, seja α (resp. β) o modelo BRG (resp. ERG) usado para gerar a sequência $\{F_k\}_{k \geq 1}$ (resp. $\{G_\ell\}_{\ell \geq 1}$). Suponhamos que as sequências tenham limites f e g , respectivamente. Note que f e g são variáveis aleatórias.

Podemos comparar os modelos observando a distância esperada entre f e g . Dizemos que dois modelos de grafos aleatórios α e β são *próximos*, ou *similares* se a distância de corte $d(G_\alpha, G_\beta)$, entre os respectivos graphons é arbitrariamente pequena quase-certamente. Isto é, em símbolos, para todo $\varepsilon > 0$,

$$\mathbb{P}(d(G_\alpha, G_\beta) < \varepsilon) = 1. \quad (5.5)$$

Estendendo resultados de Bhamidi, Bresler e Sly, Chatterjee e Diaconis [CD11], observaram que muitos modelos ERG são próximos de algum BRG. No caso particular do modelo aresta triângulo com $\beta_2 > 0$, Chatterjee e Diaconis determinaram o parâmetro $u^* = u^*(\beta_1, \beta_2)$ (equação (3.21)) tal que $G(n, u^*)$ está próximo do modelo aresta triângulo com n vértices e parâmetros β_1, β_2 (equação (3.16)).

Capítulo 6

Experimentos computacionais

A proximidade entre modelos BRG e ERG (no sentido do capítulo 5) tem natureza assintótica, sendo definida em termos da convergência das densidades de homomorfismos em sequências infinitas de grafos. Isso significa que esperamos encontrar densidades de homomorfismos semelhantes $\text{dens}(H, F) \approx \text{dens}(H, G)$, para grafos F, G com número de vértices n suficientemente grande; distribuídos respectivamente segundo o modelo aresta-triângulo (equação (3.16)) e o “correspondente” BRG (equação (3.1)), com $p = u^*$ que maximiza (3.21)); onde H é qualquer grafo com número de vértices $|V(H)| \ll n$.

Nesta seção descrevemos um estudo exploratório do comportamento de $\text{dens}(K_i, G)$, para $i = 2, 3$ e para G amostrado segundo as distribuições dos modelos ERG aresta-triângulo e BRG. Note que $\text{dens}(K_i, G) = i! \cdot |\{K_i \subseteq G\}|$ é proporcional ao número de subgrafos K_i de G . Assim, podemos medir a densidade de homomorfismos por meio de uma simples contagem do número de cópias de K_i nos grafos amostrados.

Gostaríamos de observar a diferença entre as densidades de homomorfismos de grafos provenientes do modelo aresta-triângulo e $G(n, u^*)$. Contudo, o tamanho dos grafos que podemos amostrar é limitado na medida em que o tempo de mistura do algoritmo de Metropolis–Hastings pode ser exponencial no número de vértices do modelo. Extensiva simulação usando computadores, reportadas por Mark Handcock e David Hunter, indica que $n = 20$ vértices bastam para que a aproximação de $\psi_n(\beta_1, \beta_2)$ da equação (3.21) seja observada [CD11], sugerindo que o comportamento assintótico está presente para grafos ao alcance de simulações.

Nossas simulações empregaram o pacote `ergm` de ferramentas estatísticas para análise de redes [HHB⁺13, HHB⁺08] (veja seção 6.1). Usamos essas implementações para amostrar ERG e BRG assintoticamente similares. Apresentamos uma definição precisa dessa similaridade na seção 5.

Empregamos a seguinte heurística para decidir o número de passos a executar na simulação: para modelos com n vértices, amostramos o estado da cadeia de Markov a cada $n^2 \approx 2\binom{n}{2}$ passos. Isto pois dois grafos diferem em no máximo $\binom{n}{2}$ arestas, e, em particular, os grafos $([n], E)$ e $([n], \binom{[n]}{2} \setminus E)$ diferem em *exatamente* $\binom{n}{2}$ arestas. Relacionamos o tamanho do espaço de estados e o número de transições entre amostras na tabela 6.1.

Tabela 6.1: Crescimento de $\binom{n}{2}$ em função de n . A ordem de x é $10^{\lfloor \log_{10} x \rfloor}$.

n	$\binom{n}{2}$	ordem de $\binom{n}{2}$	ordem de $2^{\binom{n}{2}}$
5	10	10^1	10^3
10	45	10^1	10^{13}
15	105	10^2	10^{31}
20	190	10^2	10^{57}
25	300	10^2	10^{90}
30	435	10^2	10^{130}
35	595	10^2	10^{179}
40	780	10^2	10^{234}
45	990	10^2	10^{298}
50	1 225	10^3	10^{368}
100	4 950	10^3	10^{1490}

6.1 Software para simulação

O pacote `ergm` para o ambiente R [HHB⁺08] fornece — entre outras ferramentas — uma implementação do algoritmo Metropolis–Hastings para simulação de ERGs via MCMC (veja seção 4.2). O pacote permite configurar parâmetros importantes da simulação, como os termos a considerar no modelo (por exemplo: número de arestas, estrelas, triângulos, etc.); seus respectivos coeficientes (o vetor β da equação (3.3)); o número de passos descartados inicialmente (“burn-in”: número de passos a tomar na simulação antes que a primeira amostra seja tomada); e o número de passos entre amostras. O pacote é extensível e é possível criar novos termos e estratégias de proposição de transições para o simulador.

6.2 Experimentos

Como discutido anteriormente, a cada parametrização do modelo aresta-triângulo, corresponde um único $u^* = u_{\beta_1, \beta_2}^*$ que atinge o máximo na equação (3.21). Este valor é tal que BRG $G(n, u^*)$ é assintoticamente próximo (no sentido da seção 5) do modelo aresta-triângulo p_{n, β_1, β_2} (veja seção 5 e figura 6.1).

Amostramos 100 grafos do modelo aresta-triângulo p_{n, β_1, β_2} para todo par

$$(\beta_1, \beta_2), \quad \text{para} \quad \beta_1, \beta_2 \in \{0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1\}, \quad \text{e}$$

com números de vértices $n = 5, 10, 15, \dots, 50$ e 100. Para cada escolha destes parâmetros (n, β_1, β_2) , também amostramos 100 BRGs $G(n, u^*)$. A Tabela A.3 contém os valores correspondentes de u^* . O algoritmo de Metropolis–Hastings foi configurado para n^2 passos antes da primeira amostragem, e n^2 passos entre a tomada de amostras. Lembramos que o tamanho do espaço de estados da cadeia simulada é da ordem de 2^{n^2} (veja a Tabela 6.1).

Para quantificar a proximidade das amostras obtidas, escolhemos o número de arestas e de triângulos, assim como a correlação entre arestas adjacentes ou

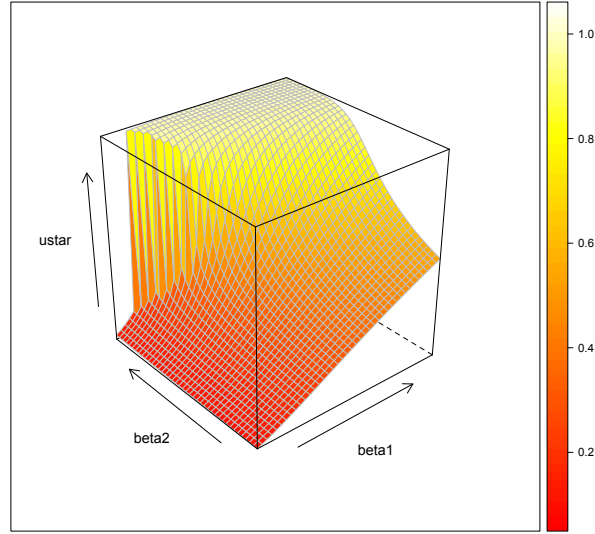


Figura 6.1: Gráfico de u^* em função de β_1 e β_2 , para $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1]$. Veja seção 3.4, equação (3.21) e a tabela A.3.

independentes. As contagens normalizadas de triângulos $(\# \text{ triângulos})/\binom{n}{3}$ foram usadas para comparar amostras de grafos com números distintos de vértices.

As tabelas A.1 e A.2 resumem algumas das estatísticas calculadas a partir das amostras. Calculamos médias e desvios amostrais do número de triângulos e de arestas das amostras.

6.3 Comparação

Considere os modelos aresta-triângulo de parâmetros $\beta_1 = 0.2$, $\beta_2 = 0.2$. Segundo a tabela A.3, encontramos o valor u^* que atinge o máximo na equação (3.21) ($u^* = 0.743$), e o valor de seu cubo ($u^{*3} = 0.4106$). Esses valores estão muito próximos da densidade de arestas e de triângulos amostradas usando o modelo aresta-triângulo (veja tabela 6.2). Esse fenômeno se repete para a maior parte das parametrizações simuladas, e sugere a existência de uma similaridade entre as densidades de homomorfismos.

Tabela 6.2: Alguns valores amostrados: densidade de arestas $\bar{e}/\binom{n}{2}$ e de triângulos $\bar{t}/\binom{n}{3}$ dos modelos (BRG e ERG aresta-triângulo, e seus parâmetros.

n	β_1	β_2	u^*	u^{*3}	BRG		ERG	
					$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$	$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$
20	0.2	0.2	0.743	0.4106	0.7447	0.4133	0.7330	0.3990
25	0.2	0.2	0.743	0.4106	0.7427	0.4100	0.7303	0.3956
30	0.2	0.2	0.743	0.4106	0.7402	0.4057	0.7260	0.3867
100	0.2	0.2	0.743	0.4106	0.7430	0.4102	0.7352	0.3993
20	0.8	0.4	0.980	0.942	0.9805	0.9439	0.9726	0.9237
25	0.8	0.4	0.980	0.942	0.9807	0.9435	0.9707	0.9191
30	0.8	0.4	0.980	0.942	0.9811	0.9441	0.9722	0.9227
100	0.8	0.4	0.980	0.942	0.8020	0.9419	0.9729	0.9252

Capítulo 7

Discussão e comentários finais

Estudamos alguns resultados conhecidos sobre grafos aleatórios binomiais e exponenciais, e executamos algumas simulações de ambos. O estudo foi exploratório, e a escolha das parametrizações a simular foi motivada por semelhanças entre densidades de subgrafos dos modelos [BBS11, CD11].

Numa outra direção, seria interessante investigar parametrizações de ERGs que diferem de BRGs [AR13, BHLN13]. Por exemplo, sabe-se que amostras do modelo aresta-triângulo com parâmetro β_2 suficiente negativo (isto é, que “penalizam” triângulos) possuem menos ciclos de comprimento ímpar do que seria esperado de um BRG com a mesma densidade de arestas [CD11]. Isso sugere um experimento em que medimos quão “bipartidos” são os grafos amostrados: isso pode ser feito, por exemplo, calculando-se o número máximo de arestas de um subgrafo bipartido, o corte máximo do grafo (veja Figura 7.1). Este número pode ser comparado ao tamanho esperado de um corte máximo de um BRG com a mesma densidade de arestas $p = e(G)/\binom{|V(G)|}{2}$ (assintoticamente $n^2 p/4$). Todavia, calcular o tamanho exato do corte máximo de um grafo é um problema computacionalmente complexo (NP-completo), que requer estimativas mais elaborados do que as que fizemos. (Observamos que, em geral, existe uma constante c positiva tal que todo grafo com $2m^2$ arestas possui um subgrafo bipartido com ao menos $m^2 + m/2 + c\sqrt{m}$ arestas; e que um grafo livre de triângulos com $e > 1$ arestas contém um subgrafo bipartido com pelo menos $e/2 + c'e^{4/5}$, para alguma constante c' positiva [Alo96].)

Por fim, indicamos dois tópicos importantes, associadas à amostragem em geral, que requerem mais atenção do que pudemos dedicar neste estudo. Trata-se de avaliar a qualidade das amostras (quão próxima a cadeia está da distribuição estacionária), e de como comparar as densidades de triângulos.

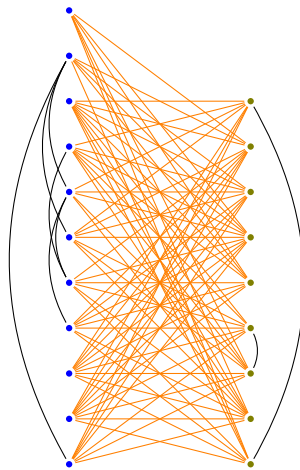


Figura 7.1: Grafo gerado pelo modelo aresta-triângulo com parâmetros $n = 20$, $\beta_1 = 100$, e $\beta_2 = -200$. As 77 arestas ligando vértices à “direita” e à “esquerda” formam o maior corte do grafo.

Referências Bibliográficas

- [AB99] Reka Albert and Albert-László. Barabási. Emergence of Scaling in Random Networks. *Science*, 286:509–512, 10 1999.
- [AB02] Reka Albert and Albert-László. Barabási. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of Modern Physics*, 74:47–97, 01 2002.
- [Alo96] Noga Alon. Bipartite Subgraphs. *Combinatorica*, 16:301–311, 1996.
- [AR13] David Aristoff and Charles Radin. Emergent structures in large networks. *Journal of Applied Probability*, 50(3):883–888, 2013.
- [BBS11] Shankar Bhamidi, Guy Bresler, and Allan Sly. Mixing time of exponential random graphs. *Ann. Appl. Stat.*, 21(6):2146–2170, 2011.
- [BCL⁺] Christian Borgs, Jennifer T. Chayes, László Lovász, Vera T. Sós, and Katalin Vesztergombi. Convergent Sequences of Dense Graphs II. Multiway Cuts and Statistical Physics.
- [BCL⁺06] Christian Borgs, Jennifer T. Chayes, László Lovász, Vera T. Sós, and Katalin Vesztergombi. Counting graph homomorphisms. In Martin Klazar, Jan Kratochvíl, Martin Loeb, Jiří Matoušek, Pavel Valtr, and Robin Thomas, editors, *Topics in Discrete Mathematics*, volume 26 of *Algorithms and Combinatorics*, pages 315–371. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [BCL⁺08] Christian Borgs, Jennifer T. Chayes, László Lovász, Vera T. Sós, and Katalin Vesztergombi. Convergent sequences of dense graphs I: Subgraph frequencies, metric properties and testing. *Advances in Mathematics*, 219:1801–1851, 2008.
- [Bes74] Julian Besag. Spatial Interaction and the Statistical Analysis of Lattice Systems. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 36(2):192–236, 1974.
- [BHLN13] Shankar Bhamidi, Jan Hannig, Chia Ying Lee, and James Nolen. The importance sampling technique for understanding rare events in Erdős–Rényi random graphs. *ArXiv e-prints*, 02 2013.
- [Bol98] Béla Bollobás. *Modern graph theory*, volume 184 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1998.

- [Bol01] Béla Bollobás. *Random Graphs*. Cambridge University Press, 2001.
- [Bré99] Pierre Brémaud. *Markov Chains: Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation, and Queues*. Texts in Applied Mathematics. Springer, 1999.
- [CD11] Sourav Chatterjee and Persi Diaconis. Estimating and Understanding Exponential Random Graph Models. *ArXiv e-prints*, 08 2011.
- [CDS10] Sourav Chatterjee, Persi Diaconis, and Allan Sly. Random graphs with a given degree sequence. *ArXiv e-prints*, 05 2010.
- [Dia08] Persi Diaconis. The Markov chain Monte Carlo revolution. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 46(2):179–205, 11 2008.
- [Die10] Reinhard Diestel. Graph Theory. 173:451, 2010.
- [ER60] Paul Erdős and Alfréd Rényi. On the evolution of random graphs. *Publ. Math. Inst. Hungary. Acad. Sci.*, 5:17–61, 1960.
- [FS86] Ove Frank and David Strauss. Markov Graphs. *Journal of the American Statistical Association*, 81(395):832–842, 1986.
- [Gri] Geoffrey Grimmett. Probability on graphs. Lecture Notes on Stochastic Processes on Graphs and Lattices. Statistical Laboratory, University of Cambridge.
- [HHB⁺08] David R. Hunter, Mark S. Handcock, Carter T. Butts, Steven M. Goodreau, Morris, and Martina. ergm: A package to fit, simulate and diagnose exponential-family models for networks. *Journal of Statistical Software*, 24(3), 2008.
- [HHB⁺13] Mark S. Handcock, David R. Hunter, Carter T. Butts, Steven M. Goodreau, Pavel N. Krivitsky, and Martina Morris. *ergm: Fit, Simulate and Diagnose Exponential-Family Models for Networks*. The Statnet Project (<http://www.statnet.org>), 2013. R package version 3.1-0.
- [HJ99] Olle Häggström and Johan Jonasson. Phase transition in the random triangle model. *Journal of Applied Probability*, 36(4):1101–1115, 1999.
- [HL81] Paul W. Holland and Samuel Leinhardt. An Exponential Family of Probability Distributions for Directed Graphs. *Journal of The American Statistical Association*, 76:33–50, 1981.
- [JŁR00] Svante Janson, Tomasz Łuczak, and Andrzej Ruciński. *Random graphs*. Wiley-Interscience series in discrete mathematics and optimization. John Wiley, 2000.
- [Lov12] L. Lovász. *Large Networks and Graph Limits*. American Mathematical Society colloquium publications. American Mathematical Society, 2012.

- [LPW09] David A. Levin, Yuval Peres, and Elizabeth L. Wilmer. *Markov Chains and Mixing Times*. American Mathematical Society, 2009.
- [LS06] László Lovász and Balázs Szegedy. Limits of dense graph sequences. *J. Combin. Theory Ser. B*, pages 933–957, 2006.
- [SPRH06] Tom A. B. Snijders, Philippa E. Pattison, Garry L. Robins, and Mark S. Handcock. New specifications for exponential random graph models. *Sociological Methodology*, 36(1):99–153, 2006.
- [vdH09] Remco van der Hofstad. Random graphs and complex networks. Available at <http://www.win.tue.nl/~rhofstad/NotesRGCN.pdf>, 2009. Notas de aula.
- [WS98] Duncan J. Watts and Steven H. Strogatz. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. *Nature*, 393(6684):440–442, 06 1998.

Apêndice A

Tabelas dos experimentos computacionais

As tabelas A.1 e A.2 contêm uma seleção de nossos resultados. A tabela A.3 contém alguns pontos da função $(\beta_1, \beta_2) \mapsto u^*$ entre os parâmetros do modelo aresta-triângulo e o BRG equivalente.

Tabela A.1: Sumário de estatísticas de ERG aresta-triângulo. As colunas representam o número de vértices n , os parâmetros β_1 e β_2 do modelo (veja equação (3.16)), e, para vértices $v_1, \dots, v_4$ aleatória e uniformemente escolhidos (e fixados), a correlação e covariância encontrados entre os pares de arestas e_{12}, e_{13} e e_{12}, e_{34} .

n	β_1	β_2	$\bar{e}$	s_e	$\bar{t}$	s_t	$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$	Corr e_{12}, e_{13}	Corr e_{12}, e_{34}
20	0	0	0.9559e2	0.706e1	0.1449e3	0.347e2	0.5031	0.1271	0.196	-0.817e-2
20	0	0.2	0.1121e3	0.936e1	0.241e3	0.592e2	0.59	0.2114	-0.241e-1	0.578e-1
20	0	0.4	0.1477e3	0.111e2	0.5512e3	0.11e3	0.7774	0.4835	-0.116	0.714e-1
20	0	0.6	0.1788e3	0.95e1	0.9575e3	0.11e3	0.9411	0.8399	-0.602e-1	0.316
20	0	0.8	0.1852e3	0.101e2	0.1065e4	0.119e3	0.9747	0.9342	-0.292e-1	-0.144e-1
20	0	1	0.1878e3	0.914e1	0.1108e4	0.107e3	0.9884	0.9719	NaN	NaN
20	0.2	0	0.1149e3	0.626e1	0.2533e3	0.43e2	0.6047	0.2222	-0.107	0.179
20	0.2	0.2	0.1393e3	0.795e1	0.4543e3	0.713e2	0.7332	0.3985	-0.118	-0.561e-1
20	0.2	0.4	0.169e3	0.922e1	0.81e3	0.113e3	0.8895	0.7105	-0.111	-0.116
20	0.2	0.6	0.182e3	0.914e1	0.1009e4	0.109e3	0.9579	0.8851	-0.292e-1	-0.292e-1
20	0.2	0.8	0.1871e3	0.882e1	0.1094e4	0.105e3	0.9847	0.9596	NaN	-0.101e-1
20	0.2	1	0.1884e3	0.807e1	0.1117e4	0.988e2	0.9916	0.9798	NaN	NaN
20	0.4	0	0.1308e3	0.821e1	0.3719e3	0.706e2	0.6884	0.3262	0.131	0.202e-1
20	0.4	0.2	0.1536e3	0.849e1	0.6081e3	0.954e2	0.8084	0.5334	0.356e-1	-0.114
20	0.4	0.4	0.1757e3	0.799e1	0.9073e3	0.1e3	0.9247	0.7959	-0.807e-1	-0.111
20	0.4	0.6	0.1853e3	0.839e1	0.1063e4	0.104e3	0.9753	0.9325	-0.251e-1	-0.251e-1
20	0.4	0.8	0.1878e3	0.772e1	0.1106e4	0.969e2	0.9884	0.9702	NaN	NaN
20	0.4	1	0.1886e3	0.68e1	0.1119e4	0.89e2	0.9926	0.9816	NaN	NaN
20	0.6	0	0.1439e3	0.801e1	0.4975e3	0.764e2	0.7574	0.4364	-0.139	0.836e-1
20	0.6	0.2	0.1674e3	0.82e1	0.7852e3	0.943e2	0.8811	0.6888	-0.117	0.309
20	0.6	0.4	0.181e3	0.848e1	0.991e3	0.104e3	0.9526	0.8693	-0.629e-1	0.158
20	0.6	0.6	0.1864e3	0.788e1	0.1081e4	0.988e2	0.9811	0.9482	0.492	-0.101e-1
20	0.6	0.8	0.1878e3	0.851e1	0.1106e4	0.107e3	0.9884	0.9702	NaN	NaN
20	0.6	1	0.1885e3	0.833e1	0.1119e4	0.102e3	0.9921	0.9816	NaN	NaN
20	0.8	0	0.157e3	0.772e1	0.6445e3	0.814e2	0.8263	0.5654	-0.278e-2	0.116
20	0.8	0.2	0.1744e3	0.87e1	0.8883e3	0.105e3	0.9179	0.7792	0.	-0.765e-1
20	0.8	0.4	0.1848e3	0.777e1	0.1053e4	0.997e2	0.9726	0.9237	0.366	-0.101e-1
20	0.8	0.6	0.1871e3	0.679e1	0.1092e4	0.904e2	0.9847	0.9579	-0.205e-1	NaN
20	0.8	0.8	0.1885e3	0.804e1	0.1118e4	0.1e3	0.9921	0.9807	0.438	-0.144e-1
20	0.8	1	0.1889e3	0.644e1	0.1124e4	0.87e2	0.9942	0.986	NaN	NaN
20	1	0	0.1664e3	0.63e1	0.7679e3	0.761e2	0.8758	0.6736	-0.157	0.112e-2
20	1	0.2	0.1799e3	0.719e1	0.9714e3	0.937e2	0.9468	0.8521	0.202	-0.177e-1
20	1	0.4	0.1855e3	0.686e1	0.1065e4	0.942e2	0.9763	0.9342	0.313	NaN
20	1	0.6	0.1878e3	0.75e1	0.1105e4	0.993e2	0.9884	0.9693	NaN	0.221
20	1	0.8	0.1885e3	0.786e1	0.1118e4	0.989e2	0.9921	0.9807	NaN	NaN
20	1	1	0.1886e3	0.926e1	0.1121e4	0.11e3	0.9926	0.9833	NaN	0.571

Tabela A.1: (continuação)

n	β_1	β_2	$\bar{e}$	s_e	$\bar{t}$	s_t	$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$	Corr e_{12}, e_{13}	Corr e_{12}, e_{34}
25	0	0	0.1507e3	0.842e1	0.2904e3	0.503e2	0.5023	0.1263	0.705e-1	-0.14
25	0	0.2	0.1786e3	0.101e2	0.4959e3	0.808e2	0.5953	0.2156	-0.311e-1	-0.121e-1
25	0	0.4	0.2396e3	0.138e2	0.1192e4	0.17e3	0.7987	0.5183	-0.123	-0.554e-1
25	0	0.6	0.2828e3	0.159e2	0.1943e4	0.227e3	0.9427	0.8448	0.219	-0.292e-1
25	0	0.8	0.294e3	0.159e2	0.2181e4	0.229e3	0.98	0.9483	NaN	NaN
25	0	1	0.2963e3	0.138e2	0.2229e4	0.214e3	0.9877	0.9691	NaN	NaN
25	0.2	0	0.1775e3	0.101e2	0.4777e3	0.8e2	0.5917	0.2077	0.107	0.225
25	0.2	0.2	0.2192e3	0.12e2	0.9099e3	0.139e3	0.7307	0.3956	0.126	0.212
25	0.2	0.4	0.2652e3	0.148e2	0.1607e4	0.222e3	0.884	0.6987	0.711e-1	-0.109
25	0.2	0.6	0.2903e3	0.142e2	0.2097e4	0.218e3	0.9677	0.9117	NaN	-0.177e-1
25	0.2	0.8	0.2948e3	0.15e2	0.2197e4	0.221e3	0.9827	0.9552	0.579	-0.328e-1
25	0.2	1	0.2969e3	0.14e2	0.2243e4	0.215e3	0.9897	0.9752	0.438	NaN
25	0.4	0	0.2051e3	0.953e1	0.7363e3	0.948e2	0.6837	0.3201	0.122	0.34e-1
25	0.4	0.2	0.2457e3	0.112e2	0.1275e4	0.149e3	0.819	0.5543	0.311	-0.663e-1
25	0.4	0.4	0.2783e3	0.122e2	0.1847e4	0.185e3	0.9277	0.803	0.113	0.565
25	0.4	0.6	0.2918e3	0.134e2	0.2129e4	0.207e3	0.9727	0.9257	NaN	-0.328e-1
25	0.4	0.8	0.2962e3	0.137e2	0.2226e4	0.209e3	0.9873	0.9678	NaN	0.1e1
25	0.4	1	0.2978e3	0.12e2	0.226e4	0.189e3	0.9927	0.9826	NaN	NaN
25	0.6	0	0.2293e3	0.981e1	0.103e4	0.117e3	0.7643	0.4478	0.4e-1	-0.176
25	0.6	0.2	0.2645e3	0.11e2	0.1583e4	0.163e3	0.8817	0.6883	-0.721e-1	-0.58e-1
25	0.6	0.4	0.2867e3	0.123e2	0.2018e4	0.191e3	0.9557	0.8774	0.144	-0.417e-1
25	0.6	0.6	0.2939e3	0.143e2	0.2176e4	0.219e3	0.9797	0.9461	-0.251e-1	0.49
25	0.6	0.8	0.2971e3	0.122e2	0.2245e4	0.195e3	0.9903	0.9761	NaN	NaN
25	0.6	1	0.2978e3	0.112e2	0.2259e4	0.187e3	0.9927	0.9822	NaN	NaN
25	0.8	0	0.2493e3	0.103e2	0.1324e4	0.146e3	0.831	0.5757	0.199	-0.299e-1
25	0.8	0.2	0.2763e3	0.114e2	0.1804e4	0.182e3	0.921	0.7843	-0.444e-1	0.328
25	0.8	0.4	0.2912e3	0.124e2	0.2114e4	0.196e3	0.9707	0.9191	0.163	-0.444e-1
25	0.8	0.6	0.2957e3	0.132e2	0.2215e4	0.208e3	0.9857	0.963	NaN	NaN
25	0.8	0.8	0.2973e3	0.131e2	0.225e4	0.205e3	0.991	0.9783	NaN	NaN
25	0.8	1	0.2981e3	0.116e2	0.2265e4	0.19e3	0.9937	0.9848	NaN	NaN
25	1	0	0.264e3	0.97e1	0.1572e4	0.145e3	0.88	0.6835	0.209e-1	0.112e-2
25	1	0.2	0.2841e3	0.111e2	0.1961e4	0.178e3	0.947	0.8526	0.158	-0.1
25	1	0.4	0.2938e3	0.11e2	0.2168e4	0.179e3	0.9793	0.9426	-0.292e-1	0.421
25	1	0.6	0.2966e3	0.114e2	0.2232e4	0.186e3	0.9887	0.9704	NaN	NaN
25	1	0.8	0.2977e3	0.112e2	0.2256e4	0.188e3	0.9923	0.9809	NaN	NaN
25	1	1	0.298e3	0.127e2	0.2265e4	0.203e3	0.9933	0.9848	NaN	NaN
30	0	0	0.2174e3	0.106e2	0.5087e3	0.737e2	0.4998	0.1253	0.101	-0.202e-1
30	0	0.2	0.2595e3	0.137e2	0.8801e3	0.132e3	0.5966	0.2168	-0.141	0.688e-1
30	0	0.4	0.354e3	0.191e2	0.2224e4	0.289e3	0.8138	0.5478	-0.103	-0.533e-1
30	0	0.6	0.41e3	0.236e2	0.3431e4	0.388e3	0.9425	0.8451	-0.526e-1	0.438
30	0	0.8	0.4263e3	0.193e2	0.3843e4	0.361e3	0.98	0.9466	-0.101e-1	-0.101e-1
30	0	1	0.4299e3	0.212e2	0.3943e4	0.395e3	0.9883	0.9712	NaN	NaN
30	0.2	0	0.26e3	0.114e2	0.8672e3	0.113e3	0.5977	0.2136	0.402e-1	0.135
30	0.2	0.2	0.3158e3	0.136e2	0.157e4	0.192e3	0.726	0.3867	0.144e-1	0.523e-1
30	0.2	0.4	0.3888e3	0.184e2	0.2921e4	0.318e3	0.8938	0.7195	-0.58e-1	-0.887e-1
30	0.2	0.6	0.4198e3	0.217e2	0.3673e4	0.389e3	0.9651	0.9047	-0.144e-1	-0.204e-1
30	0.2	0.8	0.4282e3	0.224e2	0.3899e4	0.398e3	0.9844	0.9603	0.571	0.1e1
30	0.2	1	0.431e3	0.197e2	0.3971e4	0.369e3	0.9908	0.9781	NaN	NaN
30	0.4	0	0.3009e3	0.105e2	0.1344e4	0.13e3	0.6917	0.331	-0.212	0.794e-1
30	0.4	0.2	0.3578e3	0.163e2	0.2275e4	0.26e3	0.8225	0.5603	0.249	-0.192
30	0.4	0.4	0.4073e3	0.176e2	0.3352e4	0.316e3	0.9363	0.8256	0.116e-1	-0.795e-1
30	0.4	0.6	0.4244e3	0.199e2	0.3792e4	0.37e3	0.9756	0.934	-0.204e-1	-0.204e-1
30	0.4	0.8	0.4296e3	0.184e2	0.393e4	0.357e3	0.9876	0.968	-0.292e-1	NaN
30	0.4	1	0.4312e3	0.198e2	0.3976e4	0.37e3	0.9913	0.9793	NaN	0.335
30	0.6	0	0.3332e3	0.131e2	0.1826e4	0.197e3	0.766	0.4498	0.236e-2	-0.441e-1
30	0.6	0.2	0.3848e3	0.151e2	0.2825e4	0.272e3	0.8846	0.6958	-0.127e-1	0.454e-2
30	0.6	0.4	0.4158e3	0.175e2	0.3563e4	0.332e3	0.9559	0.8776	NaN	NaN
30	0.6	0.6	0.4277e3	0.197e2	0.388e4	0.368e3	0.9832	0.9557	NaN	NaN
30	0.6	0.8	0.4306e3	0.189e2	0.3957e4	0.362e3	0.9899	0.9746	NaN	NaN
30	0.6	1	0.4318e3	0.184e2	0.3989e4	0.355e3	0.9926	0.9825	NaN	NaN
30	0.8	0	0.36e3	0.141e2	0.231e4	0.219e3	0.8276	0.569	-0.772e-1	-0.1
30	0.8	0.2	0.4003e3	0.161e2	0.3179e4	0.3e3	0.9202	0.783	0.116e-1	0.765e-1
30	0.8	0.4	0.4229e3	0.166e2	0.3746e4	0.322e3	0.9722	0.9227	-0.359e-1	NaN
30	0.8	0.6	0.4293e3	0.186e2	0.3923e4	0.358e3	0.9869	0.9663	-0.144e-1	-0.144e-1
30	0.8	0.8	0.4316e3	0.179e2	0.3983e4	0.344e3	0.9922	0.981	0.492	0.492
30	0.8	1	0.4322e3	0.167e2	0.3998e4	0.334e3	0.9936	0.9847	NaN	NaN
30	1	0	0.3809e3	0.127e2	0.273e4	0.223e3	0.8756	0.6724	0.148	0.264
30	1	0.2	0.4122e3	0.161e2	0.3469e4	0.3e3	0.9476	0.8544	-0.101e-1	-0.276e-1
30	1	0.4	0.4263e3	0.147e2	0.3834e4	0.302e3	0.98	0.9443	-0.101e-1	NaN
30	1	0.6	0.4303e3	0.173e2	0.3948e4	0.336e3	0.9892	0.9724	0.521	0.394

Tabela A.1: (continuação)

n	β_1	β_2	$\bar{e}$	s_e	$\bar{t}$	s_t	$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$	Corr e_{12}, e_{13}	Corr e_{12}, e_{34}
30	1	0.8	0.432e3	0.164e2	0.3992e4	0.333e3	0.9931	0.9833	NaN	NaN
30	1	1	0.4325e3	0.165e2	0.4005e4	0.328e3	0.9943	0.9865	NaN	NaN
100	0	0	0.2463e4	0.501e2	0.1993e5	0.115e4	0.4976	0.1233	0.6e-1	0.796e-1
100	0	0.2	0.299e4	0.816e2	0.3587e5	0.249e4	0.604	0.2218	0.929e-1	0.114
100	0	0.4	0.4119e4	0.2e3	0.9396e5	0.976e4	0.8321	0.5811	0.625e-1	-0.145
100	0	0.6	0.4717e4	0.265e3	0.1411e6	0.157e5	0.9529	0.8726	-0.292e-1	0.492
100	0	0.8	0.4859e4	0.258e3	0.154e6	0.161e5	0.9816	0.9524	NaN	-0.101e-1
100	0	1	0.4899e4	0.242e3	0.1577e6	0.155e5	0.9897	0.9753	NaN	NaN
100	0.2	0	0.296e4	0.634e2	0.346e5	0.197e4	0.598	0.214	0.543e-1	-0.276
100	0.2	0.2	0.3639e4	0.122e3	0.6457e5	0.511e4	0.7352	0.3993	-0.134	-0.442e-1
100	0.2	0.4	0.4483e4	0.217e3	0.1209e6	0.123e5	0.9057	0.7477	-0.602e-1	-0.87e-1
100	0.2	0.6	0.48e4	0.239e3	0.1484e6	0.151e5	0.9697	0.9177	0.398	0.202
100	0.2	0.8	0.4884e4	0.228e3	0.1562e6	0.148e5	0.9867	0.966	NaN	NaN
100	0.2	1	0.4906e4	0.229e3	0.1583e6	0.149e5	0.9911	0.979	0.438	0.1e1
100	0.4	0	0.3403e4	0.843e2	0.5261e5	0.323e4	0.6875	0.3254	-0.18e-1	0.989e-1
100	0.4	0.2	0.4102e4	0.153e3	0.9245e5	0.764e4	0.8287	0.5717	0.108	-0.292e-1
100	0.4	0.4	0.4657e4	0.218e3	0.1355e6	0.132e5	0.9408	0.838	-0.516e-1	-0.516e-1
100	0.4	0.6	0.4841e4	0.221e3	0.1521e6	0.144e5	0.978	0.9406	0.335	NaN
100	0.4	0.8	0.4896e4	0.217e3	0.1573e6	0.145e5	0.9891	0.9728	NaN	-0.177e-1
100	0.4	1	0.4911e4	0.215e3	0.1587e6	0.143e5	0.9921	0.9814	-0.101e-1	0.1e1
100	0.6	0	0.3792e4	0.114e3	0.729e5	0.519e4	0.7661	0.4508	-0.783e-1	0.316e-1
100	0.6	0.2	0.4404e4	0.171e3	0.1144e6	0.973e4	0.8897	0.7075	-0.586e-1	-0.403e-1
100	0.6	0.4	0.4758e4	0.207e3	0.1444e6	0.132e5	0.9612	0.893	-0.328e-1	-0.292e-1
100	0.6	0.6	0.487e4	0.214e3	0.1547e6	0.142e5	0.9838	0.9567	NaN	-0.144e-1
100	0.6	0.8	0.4905e4	0.207e3	0.158e6	0.14e5	0.9909	0.9771	NaN	0.704
100	0.6	1	0.4915e4	0.208e3	0.1591e6	0.141e5	0.9929	0.9839	NaN	NaN
100	0.8	0	0.4104e4	0.138e3	0.9244e5	0.696e4	0.8291	0.5717	0.108	0.327e-1
100	0.8	0.2	0.4585e4	0.178e3	0.129e6	0.109e5	0.9263	0.7978	NaN	-0.127
100	0.8	0.4	0.4816e4	0.201e3	0.1496e6	0.133e5	0.9729	0.9252	NaN	NaN
100	0.8	0.6	0.4889e4	0.198e3	0.1564e6	0.136e5	0.9877	0.9672	NaN	NaN
100	0.8	0.8	0.4911e4	0.204e3	0.1586e6	0.139e5	0.9921	0.9808	NaN	NaN
100	0.8	1	0.4916e4	0.208e3	0.1592e6	0.141e5	0.9931	0.9845	NaN	NaN
100	1	0	0.4338e4	0.144e3	0.1092e6	0.825e4	0.8764	0.6753	0.425e-2	-0.888e-1
100	1	0.2	0.47e4	0.189e3	0.139e6	0.12e5	0.9495	0.8596	-0.276e-1	NaN
100	1	0.4	0.485e4	0.201e3	0.1528e6	0.134e5	0.9798	0.945	-0.144e-1	-0.144e-1
100	1	0.6	0.4902e4	0.199e3	0.1577e6	0.135e5	0.9903	0.9753	NaN	NaN
100	1	0.8	0.4915e4	0.198e3	0.1589e6	0.136e5	0.9929	0.9827	0.704	0.492
100	1	1	0.4919e4	0.199e3	0.1593e6	0.137e5	0.9937	0.9852	NaN	NaN

Tabela A.2: Sumário de estatísticas de BRGs $G(n, u^*)$. As colunas apresentam o número de vértices n , os parâmetros β_1 e β_2 do modelo (veja equação (3.16)), valor de u^* correspondente (veja equação (3.21) e tabela A.3), e, para vértices $v_1, \dots, v_4$ aleatória e uniformemente escolhidos (e fixados), a correlação e covariância encontrados entre os pares de arestas e_{12}, e_{13} e e_{12}, e_{34} .

n	β_1	β_2	$\bar{e}$	s_e	$\bar{t}$	s_t	$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$	Corr e_{12}, e_{13}	Corr e_{12}, e_{34}
20	0	0	0.9506e2	0.704e1	0.1431e3	0.325e2	0.5003	0.1255	0.9e-1	0.259e-1
20	0	0.2	0.1148e3	0.635e1	0.2525e3	0.42e2	0.6042	0.2215	-0.403e-1	-0.157
20	0	0.4	0.1612e3	0.519e1	0.6969e3	0.656e2	0.8484	0.6113	0.673e-1	0.123
20	0	0.6	0.1833e3	0.251e1	0.1023e4	0.423e2	0.9647	0.8974	-0.421e-1	-0.602e-1
20	0	0.8	0.1883e3	0.12e1	0.111e4	0.214e2	0.9911	0.9737	NaN	-0.101e-1
20	0	1	0.1895e3	0.658	0.113e4	0.119e2	0.9974	0.9912	NaN	-0.144e-1
20	0.2	0	0.1139e3	0.682e1	0.2456e3	0.446e2	0.5995	0.2154	-0.83e-1	0.785e-2
20	0.2	0.2	0.1415e3	0.581e1	0.4712e3	0.584e2	0.7447	0.4133	-0.882e-1	-0.229e-1
20	0.2	0.4	0.174e3	0.363e1	0.8759e3	0.552e2	0.9158	0.7683	-0.983e-1	-0.104
20	0.2	0.6	0.1859e3	0.208e1	0.1067e4	0.359e2	0.9784	0.936	-0.328e-1	-0.328e-1
20	0.2	0.8	0.1889e3	0.103e1	0.1121e4	0.182e2	0.9942	0.9833	NaN	NaN
20	0.2	1	0.1898e3	0.495	0.1136e4	0.887e1	0.9989	0.9965	NaN	NaN
20	0.4	0	0.1315e3	0.666e1	0.3789e3	0.579e2	0.6921	0.3324	-0.265e-1	-0.139
20	0.4	0.2	0.1593e3	0.48e1	0.6721e3	0.614e2	0.8384	0.5896	-0.169	-0.156
20	0.4	0.4	0.1812e3	0.31e1	0.989e3	0.51e2	0.9537	0.8675	0.295	-0.144e-1
20	0.4	0.6	0.1876e3	0.165e1	0.1097e4	0.291e2	0.9874	0.9623	-0.144e-1	NaN
20	0.4	0.8	0.1893e3	0.763	0.1127e4	0.137e2	0.9963	0.9886	NaN	NaN
20	0.4	1	0.1898e3	0.426	0.1136e4	0.768e1	0.9989	0.9965	NaN	NaN
20	0.6	0	0.1452e3	0.617e1	0.5106e3	0.653e2	0.7642	0.4479	0.263e-1	0.456e-1

Tabela A.2: (continuação)

n	β_1	β_2	$\bar{e}$	s_e	$\bar{t}$	s_t	$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$	Corr e_{12}, e_{13}	Corr e_{12}, e_{34}
20	0.6	0.2	0.1707e3	0.419e1	0.826e3	0.617e2	0.8984	0.7246	0.745e-1	0.576e-1
20	0.6	0.4	0.1844e3	0.233e1	0.1043e4	0.396e2	0.9705	0.9149	-0.251e-1	-0.177e-1
20	0.6	0.6	0.1885e3	0.107e1	0.1113e4	0.19e2	0.9921	0.9763	-0.101e-1	NaN
20	0.6	0.8	0.1895e3	0.672	0.1132e4	0.12e2	0.9974	0.993	NaN	NaN
20	0.6	1	0.1898e3	0.44	0.1136e4	0.792e1	0.9989	0.9965	NaN	NaN
20	0.8	0	0.1576e3	0.624e1	0.6508e3	0.788e2	0.8295	0.5709	0.297e-1	-0.356e-1
20	0.8	0.2	0.1772e3	0.385e1	0.9244e3	0.594e2	0.9326	0.8109	-0.361e-1	-0.58e-1
20	0.8	0.4	0.1863e3	0.197e1	0.1076e4	0.339e2	0.9805	0.9439	NaN	-0.309e-1
20	0.8	0.6	0.1886e3	0.121e1	0.1114e4	0.214e2	0.9926	0.9772	-0.204e-1	NaN
20	0.8	0.8	0.1897e3	0.51	0.1135e4	0.911e1	0.9984	0.9956	NaN	NaN
20	0.8	1	0.1897e3	0.485	0.1135e4	0.872e1	0.9984	0.9956	NaN	NaN
20	1	0	0.1676e3	0.382e1	0.7817e3	0.536e2	0.8821	0.6857	-0.205e-1	-0.101
20	1	0.2	0.1815e3	0.302e1	0.9931e3	0.492e2	0.9553	0.8711	-0.328e-1	-0.468e-1
20	1	0.4	0.1875e3	0.159e1	0.1097e4	0.277e2	0.9868	0.9623	-0.292e-1	-0.292e-1
20	1	0.6	0.1892e3	0.844	0.1126e4	0.151e2	0.9958	0.9877	NaN	NaN
20	1	0.8	0.1899e3	0.349	0.1137e4	0.628e1	0.9995	0.9974	NaN	NaN
20	1	1	0.1898e3	0.426	0.1136e4	0.768e1	0.9989	0.9965	NaN	NaN
25	0	0	0.1481e3	0.852e1	0.2761e3	0.465e2	0.4937	0.12	-0.147	0.618e-1
25	0	0.2	0.1825e3	0.772e1	0.5189e3	0.664e2	0.6083	0.2256	-0.103	-0.413e-1
25	0	0.4	0.2538e3	0.605e1	0.1393e4	0.995e2	0.846	0.6057	0.141e-1	-0.147
25	0	0.6	0.2898e3	0.334e1	0.2073e4	0.718e2	0.966	0.9013	-0.417e-1	-0.292e-1
25	0	0.8	0.2974e3	0.16e1	0.2241e4	0.361e2	0.9913	0.9743	-0.101e-1	-0.101e-1
25	0	1	0.2993e3	0.856	0.2284e4	0.197e2	0.9977	0.993	NaN	NaN
25	0.2	0	0.1801e3	0.821e1	0.4968e3	0.691e2	0.6003	0.216	-0.299e-1	-0.16
25	0.2	0.2	0.2228e3	0.791e1	0.9429e3	0.986e2	0.7427	0.41	-0.231	-0.737e-1
25	0.2	0.4	0.2756e3	0.46e1	0.1783e4	0.902e2	0.9187	0.7752	0.313	-0.482e-1
25	0.2	0.6	0.2934e3	0.248e1	0.2151e4	0.549e2	0.978	0.9352	-0.144e-1	-0.101e-1
25	0.2	0.8	0.2985e3	0.132e1	0.2265e4	0.3e2	0.995	0.9848	NaN	NaN
25	0.2	1	0.2995e3	0.703	0.2288e4	0.161e2	0.9983	0.9948	NaN	NaN
25	0.4	0	0.2065e3	0.827e1	0.7509e3	0.904e2	0.6883	0.3265	-0.112	0.334e-1
25	0.4	0.2	0.2507e3	0.602e1	0.1343e4	0.976e2	0.8357	0.5839	0.694e-1	-0.512e-1
25	0.4	0.4	0.2859e3	0.32e1	0.199e4	0.674e2	0.953	0.8652	-0.602e-1	0.219
25	0.4	0.6	0.2958e3	0.199e1	0.2205e4	0.442e2	0.986	0.9587	-0.144e-1	-0.204e-1
25	0.4	0.8	0.2988e3	0.11e1	0.2272e4	0.25e2	0.996	0.9878	NaN	NaN
25	0.4	1	0.2996e3	0.565	0.2291e4	0.13e2	0.9987	0.9961	NaN	NaN
25	0.6	0	0.231e3	0.652e1	0.105e4	0.899e2	0.77	0.4565	0.541e-1	0.117e-1
25	0.6	0.2	0.2697e3	0.534e1	0.1671e4	0.995e2	0.899	0.7265	-0.863e-1	0.188
25	0.6	0.4	0.2909e3	0.34e1	0.2097e4	0.727e2	0.9697	0.9117	NaN	NaN
25	0.6	0.6	0.2977e3	0.155e1	0.2247e4	0.351e2	0.9923	0.977	NaN	NaN
25	0.6	0.8	0.2993e3	0.902	0.2284e4	0.207e2	0.9977	0.993	NaN	NaN
25	0.6	1	0.2997e3	0.482	0.2293e4	0.111e2	0.999	0.997	NaN	NaN
25	0.8	0	0.2506e3	0.573e1	0.134e4	0.935e2	0.8353	0.5826	0.78e-2	-0.266e-1
25	0.8	0.2	0.2795e3	0.353e1	0.186e4	0.697e2	0.9317	0.8087	-0.753e-1	0.193e-1
25	0.8	0.4	0.2942e3	0.232e1	0.217e4	0.511e2	0.9807	0.9435	-0.144e-1	-0.177e-1
25	0.8	0.6	0.2987e3	0.103e1	0.227e4	0.233e2	0.9957	0.987	NaN	NaN
25	0.8	0.8	0.2994e3	0.761	0.2286e4	0.174e2	0.998	0.9939	NaN	NaN
25	0.8	1	0.2997e3	0.541	0.2293e4	0.124e2	0.999	0.997	NaN	NaN
25	1	0	0.2649e3	0.622e1	0.1584e4	0.112e3	0.883	0.6887	0.119	0.458e-1
25	1	0.2	0.2869e3	0.394e1	0.2012e4	0.826e2	0.9563	0.8748	0.163	0.163
25	1	0.4	0.296e3	0.179e1	0.221e4	0.4e2	0.9867	0.9609	-0.177e-1	-0.251e-1
25	1	0.6	0.2989e3	0.986	0.2275e4	0.225e2	0.9963	0.9891	NaN	NaN
25	1	0.8	0.2996e3	0.618	0.2291e4	0.142e2	0.9987	0.9961	NaN	NaN
25	1	1	0.2996e3	0.586	0.2291e4	0.135e2	0.9987	0.9961	NaN	NaN
30	0	0	0.2178e3	0.101e2	0.5118e3	0.734e2	0.5007	0.1261	-0.821e-1	0.14
30	0	0.2	0.2644e3	0.11e2	0.9119e3	0.116e3	0.6078	0.2246	0.115	0.114
30	0	0.4	0.3704e3	0.709e1	0.2507e4	0.146e3	0.8515	0.6175	-0.169	0.425e-2
30	0	0.6	0.4205e3	0.361e1	0.3667e4	0.949e2	0.9667	0.9032	0.117	-0.56e-1
30	0	0.8	0.431e3	0.201e1	0.395e4	0.555e2	0.9908	0.9729	-0.144e-1	-0.144e-1
30	0	1	0.4338e3	0.114e1	0.4027e4	0.316e2	0.9972	0.9919	NaN	NaN
30	0.2	0	0.2602e3	0.12e2	0.8713e3	0.125e3	0.5982	0.2146	-0.264e-1	0.729e-1
30	0.2	0.2	0.322e3	0.989e1	0.1647e4	0.152e3	0.7402	0.4057	0.252e-1	-0.279e-1
30	0.2	0.4	0.4e3	0.58e1	0.3156e4	0.137e3	0.9195	0.7773	0.	-0.107e-1
30	0.2	0.6	0.4256e3	0.292e1	0.3802e4	0.783e2	0.9784	0.9365	-0.309e-1	-0.177e-1
30	0.2	0.8	0.4324e3	0.154e1	0.3988e4	0.426e2	0.994	0.9823	NaN	NaN
30	0.2	1	0.4342e3	0.907	0.4037e4	0.254e2	0.9982	0.9943	NaN	NaN
30	0.4	0	0.3023e3	0.103e2	0.1363e4	0.144e3	0.6949	0.3357	0.369e-1	-0.4e-1
30	0.4	0.2	0.3653e3	0.716e1	0.2405e4	0.142e3	0.8398	0.5924	0.639e-1	0.106
30	0.4	0.4	0.4131e3	0.424e1	0.3478e4	0.108e3	0.9497	0.8567	-0.745e-1	-0.602e-1
30	0.4	0.6	0.4293e3	0.228e1	0.3901e4	0.622e2	0.9869	0.9608	NaN	NaN

Tabela A.2: (continuação)

n	β_1	β_2	$\bar{e}$	s_e	$\bar{t}$	s_t	$\bar{e}/\binom{n}{2}$	$\bar{t}/\binom{n}{3}$	Corr e_{12}, e_{13}	Corr e_{12}, e_{34}
30	0.4	0.8	0.4333e3	0.132e1	0.4014e4	0.368e2	0.9961	0.9887	-0.101e-1	NaN
30	0.4	1	0.4346e3	0.589	0.4048e4	0.165e2	0.9991	0.997	NaN	NaN
30	0.6	0	0.3343e3	0.828e1	0.1841e4	0.14e3	0.7685	0.4534	-0.367e-1	-0.15
30	0.6	0.2	0.3905e3	0.715e1	0.2939e4	0.162e3	0.8977	0.7239	-0.765e-1	-0.677e-1
30	0.6	0.4	0.4215e3	0.387e1	0.3693e4	0.101e3	0.969	0.9096	-0.468e-1	-0.468e-1
30	0.6	0.6	0.4314e3	0.197e1	0.3959e4	0.542e2	0.9917	0.9751	NaN	NaN
30	0.6	0.8	0.4339e3	0.971	0.403e4	0.27e2	0.9975	0.9926	NaN	NaN
30	0.6	1	0.4346e3	0.624	0.4048e4	0.174e2	0.9991	0.997	NaN	NaN
30	0.8	0	0.3614e3	0.848e1	0.2327e4	0.166e3	0.8308	0.5732	0.385e-1	-0.115
30	0.8	0.2	0.4051e3	0.497e1	0.3279e4	0.121e3	0.9313	0.8076	-0.516e-1	-0.56e-1
30	0.8	0.4	0.4268e3	0.275e1	0.3833e4	0.745e2	0.9811	0.9441	NaN	NaN
30	0.8	0.6	0.4327e3	0.14e1	0.3997e4	0.388e2	0.9947	0.9845	NaN	NaN
30	0.8	0.8	0.4342e3	0.899	0.4038e4	0.25e2	0.9982	0.9946	NaN	NaN
30	0.8	1	0.4345e3	0.797	0.4045e4	0.22e2	0.9989	0.9963	NaN	NaN
30	1	0	0.3828e3	0.824e1	0.2767e4	0.18e3	0.88	0.6815	-0.136	-0.512e-1
30	1	0.2	0.4167e3	0.427e1	0.3568e4	0.11e3	0.9579	0.8788	0.164	-0.745e-1
30	1	0.4	0.4289e3	0.258e1	0.3892e4	0.7e2	0.986	0.9586	NaN	-0.177e-1
30	1	0.6	0.4332e3	0.144e1	0.4009e4	0.4e2	0.9959	0.9874	NaN	NaN
30	1	0.8	0.4345e3	0.674	0.4046e4	0.188e2	0.9989	0.9966	NaN	NaN
30	1	1	0.4346e3	0.584	0.4049e4	0.163e2	0.9991	0.9973	NaN	NaN
100	0	0	0.2474e4	0.415e2	0.2019e5	0.104e4	0.4998	0.1249	0.771e-1	-0.355e-1
100	0	0.2	0.302e4	0.3e2	0.3672e5	0.113e4	0.6101	0.2271	0.137	-0.456e-1
100	0	0.4	0.4206e4	0.237e2	0.9918e5	0.168e4	0.8497	0.6134	-0.791e-1	0.625e-1
100	0	0.6	0.4786e4	0.116e2	0.1462e6	0.106e4	0.9669	0.9041	-0.177e-1	-0.309e-1
100	0	0.8	0.4906e4	0.638e1	0.1574e6	0.615e3	0.9911	0.9734	NaN	NaN
100	0	1	0.4937e4	0.351e1	0.1604e6	0.342e3	0.9974	0.992	NaN	NaN
100	0.2	0	0.2965e4	0.32e2	0.3476e5	0.113e4	0.599	0.215	0.434e-1	0.138
100	0.2	0.2	0.3678e4	0.245e2	0.6633e5	0.134e4	0.743	0.4102	-0.915e-1	0.102
100	0.2	0.4	0.4551e4	0.197e2	0.1257e6	0.163e4	0.9194	0.7774	-0.983e-1	0.361e-1
100	0.2	0.6	0.4846e4	0.109e2	0.1517e6	0.103e4	0.979	0.9382	-0.309e-1	-0.251e-1
100	0.2	0.8	0.4921e4	0.507e1	0.1589e6	0.491e3	0.9941	0.9827	NaN	NaN
100	0.2	1	0.4941e4	0.303e1	0.1609e6	0.295e3	0.9982	0.9951	NaN	NaN
100	0.4	0	0.3412e4	0.342e2	0.5297e5	0.161e4	0.6893	0.3276	-0.23	-0.591e-1
100	0.4	0.2	0.4146e4	0.258e2	0.95e5	0.178e4	0.8376	0.5875	-0.143	-0.163e-1
100	0.4	0.4	0.4707e4	0.152e2	0.139e6	0.135e4	0.9509	0.8596	-0.204e-1	-0.421e-1
100	0.4	0.6	0.4885e4	0.835e1	0.1554e6	0.797e3	0.9869	0.961	NaN	NaN
100	0.4	0.8	0.4931e4	0.467e1	0.1598e6	0.454e3	0.9962	0.9882	NaN	NaN
100	0.4	1	0.4944e4	0.252e1	0.1611e6	0.247e3	0.9988	0.9963	NaN	NaN
100	0.6	0	0.3807e4	0.271e2	0.7354e5	0.158e4	0.7691	0.4548	-0.367e-1	0.195
100	0.6	0.2	0.4442e4	0.203e2	0.1169e6	0.161e4	0.8974	0.7229	-0.343e-1	-0.721e-1
100	0.6	0.4	0.4797e4	0.124e2	0.1472e6	0.114e4	0.9691	0.9103	-0.144e-1	-0.144e-1
100	0.6	0.6	0.4907e4	0.615e1	0.1575e6	0.592e3	0.9913	0.974	-0.144e-1	-0.144e-1
100	0.6	0.8	0.4938e4	0.351e1	0.1605e6	0.342e3	0.9976	0.9926	NaN	NaN
100	0.6	1	0.4945e4	0.194e1	0.1612e6	0.19e3	0.999	0.9969	NaN	NaN
100	0.8	0	0.4119e4	0.239e2	0.9317e5	0.163e4	0.8321	0.5762	0.316e-1	0.15
100	0.8	0.2	0.4624e4	0.174e2	0.1318e6	0.149e4	0.9341	0.8151	0.144	-0.56e-1
100	0.8	0.4	0.4852e4	0.102e2	0.1523e6	0.961e3	0.9802	0.9419	NaN	NaN
100	0.8	0.6	0.4921e4	0.498e1	0.1589e6	0.482e3	0.9941	0.9827	NaN	NaN
100	0.8	0.8	0.4941e4	0.316e1	0.1609e6	0.308e3	0.9982	0.9951	NaN	NaN
100	0.8	1	0.4945e4	0.225e1	0.1612e6	0.22e3	0.999	0.9969	NaN	NaN
100	1	0	0.4359e4	0.239e2	0.1104e6	0.181e4	0.8806	0.6827	-0.964e-1	0.476
100	1	0.2	0.4736e4	0.148e2	0.1416e6	0.132e4	0.9568	0.8757	-0.204e-1	-0.204e-1
100	1	0.4	0.4887e4	0.818e1	0.1556e6	0.781e3	0.9873	0.9623	NaN	NaN
100	1	0.6	0.4932e4	0.398e1	0.1599e6	0.387e3	0.9964	0.9889	NaN	NaN
100	1	0.8	0.4945e4	0.251e1	0.1612e6	0.246e3	0.999	0.9969	NaN	NaN
100	1	1	0.4945e4	0.226e1	0.1612e6	0.221e3	0.999	0.9969	NaN	NaN

Tabela A.3: Alguns valores numéricos para a relação entre u^* e os parâmetros β_1 e β_2 na equação (3.21). Note que u^* é a densidade de arestas esperada de $G(n, u^*)$, e $(u^*)^3$ é o valor esperado de sua densidade de triângulos. Veja a figura 6.1 para um gráfico de $u^* = u(\beta_1, \beta_2)$.

β_1	β_2	u^*	$(u^*)^3$
0.0	0.0	0.5	0.125
0.0	0.2	0.610	0.2267
0.0	0.4	0.850	0.6138
0.0	0.6	0.967	0.903
0.0	0.8	0.991	0.9736
0.0	1.0	0.997	0.9923
0.2	0.0	0.599	0.2146
0.2	0.2	0.743	0.4106
0.2	0.4	0.919	0.7756
0.2	0.6	0.979	0.9389
0.2	0.8	0.994	0.9827
0.2	1.0	0.998	0.9949
0.4	0.0	0.690	0.3285
0.4	0.2	0.838	0.5882
0.4	0.4	0.951	0.8609
0.4	0.6	0.987	0.9606
0.4	0.8	0.996	0.9886
0.4	1.0	0.999	0.9966
0.6	0.0	0.768	0.4539
0.6	0.2	0.897	0.722
0.6	0.4	0.969	0.911
0.6	0.6	0.991	0.9741
0.6	0.8	0.997	0.9924
0.6	1.0	0.999	0.9968
0.8	0.0	0.832	0.576
0.8	0.2	0.934	0.8142
0.8	0.4	0.980	0.942
0.8	0.6	0.994	0.9829
0.8	0.8	0.998	0.9949
0.8	1.0	0.999	0.9968
1.0	0.0	0.881	0.6833
1.0	0.2	0.957	0.8761
1.0	0.4	0.987	0.9618
1.0	0.6	0.996	0.9887
1.0	0.8	0.999	0.9967
1.0	1.0	0.999	0.9968

Apêndice B

Demonstrações

Afirmção 2.3. Seja $\mathcal{G}_n$ o conjunto dos grafos com n vértices. Vale

$$\frac{1}{|\mathcal{G}_n|} \sum_{G \in \mathcal{G}_n} \text{agrup}(G) = \frac{1}{2}.$$

Demonstração. Sem perda de generalidade, consideramos que os grafos em $\mathcal{G}_n$ têm conjunto de vértices $[n] \doteq \{1, 2, \dots, n\}$. Note que $|\mathcal{G}_n| = 2^{\binom{n}{2}}$.

Para cada $v \in [n]$, cada subconjunto $A \subseteq V \setminus \{v\}$ e cada $B \subseteq \binom{A}{2}$, definimos a família $\mathcal{F}(v, A, B)$ de grafos $G(V, E)$ tais que os vizinhos de v em G sejam exatamente os vértices em A , e as arestas entre vértices de A sejam exatamente as arestas em B .

Note que para todo grafo $G \in \mathcal{F}(v, A, B)$, temos

$$\text{agrup}(v) = |B| \binom{|A|}{2}^{-1}.$$

Assim, podemos deixar explícita a contribuição de cada vértice no somatório do cálculo da média

$$\begin{aligned} \sum_{G \in \mathcal{G}_n} \text{agrup}(G) &= \sum_{G \in \mathcal{G}_n} \sum_{v \in [n]} e_v \binom{d(v)}{2}^{-1} \\ &= \sum_{v \in [n]} \sum_{G \in \mathcal{G}_n} e_v \binom{d(v)}{2}^{-1} \\ &= \sum_{v \in [n]} \sum_{A \subseteq [n] \setminus \{v\}} \sum_{\substack{G \in \mathcal{G}_n \\ N(v)=A}} e_v \binom{|A|}{2}^{-1} \\ &= \sum_{v \in [n]} \sum_{A \subseteq [n] \setminus \{v\}} \sum_{B \subseteq \binom{A}{2}} \sum_{\substack{G=(V,E) \in \mathcal{G}_n \\ N(v)=A \\ E \cap \binom{A}{2} = B}} |B| \binom{|A|}{2}^{-1} \\ &= \sum_{v \in [n]} \sum_{A \subseteq [n] \setminus \{v\}} \sum_{B \subseteq \binom{A}{2}} |B| \binom{|A|}{2}^{-1} |\mathcal{F}(v, A, B)| \end{aligned}$$

Ademais, observamos que $|\mathcal{F}(v, A, B)| = |\mathcal{F}(v, A, C)|$, para todo $C \subseteq \binom{A}{2}$. Em

particular, podemos tomar $C = \binom{A}{2} \setminus B$. Se fixamos v e A como no somatório acima,

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{v, A \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} \frac{|B|}{\binom{|A|}{2}} |\mathcal{F}(v, A, B)| \\
&= \frac{1}{2} \cdot 2 \sum_{\substack{v, A \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} \frac{|B|}{\binom{|A|}{2}} |\mathcal{F}(v, A, B)| \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\substack{v, A \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} \left(\frac{|B|}{\binom{|A|}{2}} |\mathcal{F}(v, A, B)| + \frac{\binom{|A|}{2} - |B|}{\binom{|A|}{2}} |\mathcal{F}(v, A, \binom{A}{2} \setminus B)| \right) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\substack{v, A \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} \left(\frac{|B|}{\binom{|A|}{2}} |\mathcal{F}(v, A, B)| + \frac{\binom{|A|}{2} - |B|}{\binom{|A|}{2}} |\mathcal{F}(v, A, B)| \right) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\substack{v, A \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} |\mathcal{F}(v, A, B)|
\end{aligned}$$

Para prosseguir, usamos dois resultados auxiliares.

Afirmção B.1 Seja $v \in [n]$, e sejam $A, A' \subseteq [n] \setminus \{v\}$, e $B, B' \subset \binom{A}{2}$. Se $C = \mathcal{F}(v, A, B) \cap \mathcal{F}(v, A', B')$, então ou $C = \mathcal{F}(v, A, B)$ ou $C = \emptyset$.

(Demonstração da Afirmção B.1.) Observe que para todo grafo $G \in \mathcal{G}_n$, e $v \in [n]$, existe uma única escolha de $C \subseteq [n] \setminus \{v\}$ e de $D \subseteq \binom{C}{2}$ tal que $G \in \mathcal{F}(v, C, D)$. Sendo assim, se G é um grafo em ambos os conjuntos, então $A = A'$ e $B = B'$, isto é, os conjuntos são idênticos. $\diamond$

Afirmção B.2 Seja $v \in [n]$. Temos

$$\bigcup_{\substack{A \subseteq [n] \setminus \{v\} \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} \mathcal{F}(v, A, B) = \mathcal{G}_n \quad \text{e ainda} \quad \sum_{\substack{A \subseteq [n] \setminus \{v\} \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} |\mathcal{F}(v, A, B)| = |\mathcal{G}_n|.$$

(Demonstração da Afirmção B.2.) Todo grafo na união é elemento de $\mathcal{G}_n$, pois todos têm n vértices. Por outro lado, todo grafo $G = (V, E) \in \mathcal{G}_n$ está em $\mathcal{F}(v, A, B)$ da união, tomando $A = N(v)$ e $B = E \cap \binom{A}{2}$. Assim, os dois conjuntos são iguais. A igualdade entre somas é corolário da afirmação B.1, pois $\mathcal{F}(v, A, B)$ definem uma partição de $\mathcal{G}_n$. $\diamond$

Ora, temos então que, fixado v ,

$$\sum_{\substack{A \subseteq [n] \setminus \{v\} \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} |\mathcal{F}(v, A, B)| = \left| \bigcup_{\substack{A \subseteq [n] \setminus \{v\} \\ B \subseteq \binom{A}{2}}} \mathcal{F}(v, A, B) \right| = |\mathcal{G}_n| = 2^{\binom{n}{2}}.$$

E concluimos que

$$\begin{aligned}
 |\mathcal{G}_n|^{-1} \sum_{G \in \mathcal{G}_n} \text{agrup}(G) &= 2^{-\binom{n}{2}} \sum_{G \in \mathcal{G}_n} \text{agrup}(G) = \\
 &= \frac{1}{n 2^{\binom{n}{2}}} \sum_{v \in [n]} \sum_{A \subseteq [n] \setminus \{v\}} \sum_{B \subseteq \binom{A}{2}} |B| \binom{|A|}{2}^{-1} |\mathcal{F}(v, A, B)| \\
 &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{n 2^{\binom{n}{2}}} \sum_{v \in [n]} \sum_{A \subseteq [n] \setminus \{v\}} \sum_{B \subseteq \binom{A}{2}} |\mathcal{F}(v, A, B)| \\
 &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{n 2^{\binom{n}{2}}} \sum_{v \in [n]} 2^{\binom{n}{2}} \\
 &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{n 2^{\binom{n}{2}}} \cdot n 2^{\binom{n}{2}} \\
 &= \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

□

Lema 3.5. Seja $G = (V, E)$ um grafo com ao menos uma aresta e sem vértices isolados. Se todo par de arestas $e, f \in E$ de G possui vértice em comum (i.e.: $e \cap f \neq \emptyset$), então G é um triângulo ou uma estrela.

Demonstração. Como G não possui vértice isolado, se $|E| \leq 2$ então G é uma estrela. Supomos no restante da demonstração que G contém ao menos três arestas distintas.

Note que se G contém um triângulo com vértices $\{a, b, c\} \in V$, então G é *um triângulo*. Isso pois toda aresta $\{d, e\} \in E$ é adjacente (i.e., possui extremo comum) a cada uma das arestas do triângulo, e isso só é possível se $|\{d, e\} \cap \{a, b, c\}| > 1$; donde $\{d, e\}$ é uma das arestas $\{a, b\}, \{a, c\}$, ou $\{b, c\}$.

Por outro lado, se não existe triângulo em G , então a interseção entre três arestas distintas contém exatamente um vértice: isto pois uma aresta $\{a, b\}$ não pode interceptar duas outras $\{c, d\}, \{d, e\}$ em vértices diferentes (isto geraria um triângulo), donde $\{a, b\} \cap \{c, d\} = \{a, b\} \cap \{d, e\} = d$. Ora, isso implica que o vértice $v \in V$ na interseção entre arestas distintas é único: pois se (e_1, e_2, e_3) e (e_2, e_3, e_4) são triplas de arestas distintas ($e_i \in E, e \in \{1, 2, 3, 4\}$), então

$$v = e_1 \cap e_2 \cap e_3 = e_2 \cap e_3 = e_2 \cap e_3 \cap e_4.$$

E, como v está em toda aresta, G é uma estrela. □

Afirmção 3.2. Seja $G \sim G(n, p)$. Vale $\mathbb{E}(\text{agrup}(G)) = p$.

Demonstração. Por linearidade da esperança, temos

$$\mathbb{E}(\text{agrup}(G)) = n^{-1} \sum_{v \in [n]} \mathbb{E}(\text{agrup}(v)).$$

Seja $E = E(G)$ o conjunto das arestas de G , e $E_v = E \cap \binom{N(v)}{2}$ o conjunto de arestas entre vizinhos de $v \in V$, com $e_v \doteq |E_v|$. Escrevendo $a \doteq |A|$, $b \doteq |B|$, e $q = 1 - p$,

temos, para todo $v \in [n]$,

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}(\text{agrup}(v)) &= \sum_{A \subseteq [n]-v} \sum_{B \subseteq \binom{A}{2}} \frac{b}{\binom{a}{2}} \cdot \mathbb{P}(N(v) = A \wedge E_v = B) \\
 &= \sum_{A \subseteq [n]-v} \sum_{b=0}^{\binom{a}{2}} \binom{\binom{a}{2}}{b} \frac{b}{\binom{a}{2}} \cdot \mathbb{P}(N(v) = A \wedge e_v = b) \\
 &= \sum_{A \subseteq [n]-v} \sum_{b=0}^{\binom{a}{2}} \binom{\binom{a}{2}}{b} \frac{b}{\binom{a}{2}} \cdot p^a q^{n-1-a} p^b q^{\binom{a}{2}-b}
 \end{aligned}$$

Fixado $v \in [n]$, o número de grafos $G = (V, E)$ tais que $|N(v)| = a$ e $|E \cap \binom{N(v)}{2}| = b$ é $\binom{n-1}{a} \binom{\binom{a}{2}}{b}$. Sendo assim,

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}(\text{agrup}(v)) &= \sum_{A \subseteq [n]-v} \sum_{B \subseteq \binom{A}{2}} \frac{b}{\binom{a}{2}} \cdot \mathbb{P}(N(v) = A \wedge E_v = B) \\
 &= \sum_{a=0}^{n-1} \sum_{b=0}^{\binom{a}{2}} \binom{n-1}{a} \binom{\binom{a}{2}}{b} \frac{b}{\binom{a}{2}} \cdot \mathbb{P}(N(v) = A \wedge E_v = B) \\
 &= \sum_{a=0}^{n-1} \sum_{b=0}^{\binom{a}{2}} \binom{n-1}{a} \binom{\binom{a}{2}}{b} \frac{b}{\binom{a}{2}} p^a q^{n-1-a} p^b q^{\binom{a}{2}-b} \\
 &= \sum_{a=0}^{n-1} \binom{n-1}{a} \left(\frac{a}{2} \right)^{-1} p^a q^{n-1-a} \binom{a}{2} p(p+q)^{\binom{a}{2}-1} \\
 &= p(p+q)^{n-1} \\
 &= p
 \end{aligned}$$

□

Onde usamos o fato de que $\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} k x^k y^{n-k} = n x (x+y)^{n-1}$.

Demonstração. Basta calcular a derivada (em x) de ambos os lados da fórmula do binômio de newton.

$$\begin{aligned}
 (x+y)^n &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k y^{n-k} \iff \\
 n(x+y)^{n-1} &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} k x^{k-1} y^{n-k} \iff \\
 n x (x+y)^{n-1} &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} k x^k y^{n-k}
 \end{aligned}$$

□