



UNIVERSIDAD DE SALAMANCA  
GRADO EN MATEMÁTICAS

# Epidemiología en redes simpliciales

AUTORA

Cecilia Martín Pérez

TUTOR

Daniel Hernández Serrano

Curso 2021-2022





UNIVERSIDAD DE SALAMANCA  
GRADO EN MATEMÁTICAS

# Epidemiología en redes simpliciales

AUTORA

Cecilia Martín Pérez

TUTOR

Daniel Hernández Serrano

Curso 2021-2022



# Índice general

<b>0. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Introducción a las Redes</b>	<b>3</b>
1.1. Redes aleatorias . . . . .	5
1.2. Redes de escala-libre o libres de escala . . . . .	7
<b>2. Epidemiología en redes</b>	<b>10</b>
2.1. Modelo SIS en redes aleatorias . . . . .	12
2.2. Modelo SIS en redes de escala-libre . . . . .	13
<b>3. Complejos simpliciales</b>	<b>14</b>
3.1. Definición de un complejo simplicial . . . . .	14
3.2. Nociones de adyacencia y grado de un $q$ -símplice . . . . .	16
3.3. Adyacencia de orden superior y grado simplicial . . . . .	20
3.3.1. Adyacencia para símlices de distintas dimensiones . . . . .	21
3.3.2. Grado superior generalizado de un símlice . . . . .	26
3.3.3. Grado inferior generalizado de un símlice . . . . .	27
3.3.4. Grado de adyacencia general y grado simplicial . . . . .	29
<b>4. Epidemiología en redes simpliciales</b>	<b>32</b>
4.1. Modelo de Contagio Simplicial (MCS) . . . . .	32
4.2. Runge Kutta de orden 2 para la ecuación diferencial del MCS . . . . .	38
4.3. Contagio simplicial sobre complejos simpliciales del mundo real . . . . .	40
4.4. Contagio simplicial sobre redes sintéticas . . . . .	44
4.4.1. MODELO RSC DE DIMENSIÓN $D$ . . . . .	45
4.4.2. Contagio simplicial sobre redes sintéticas . . . . .	48
<b>5. Conclusiones</b>	<b>50</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>54</b>

# Índice de figuras

1.1.	Los puentes de Königsberg (Imagen extraída de la Wikipedia) . . . . .	3
1.2.	Distribución de Poisson de [4] . . . . .	6
1.3.	Distribución de Poisson (curva verde) y de potencia (curva morada) de [4] . . . . .	8
2.1.	Modelo SI de [4] . . . . .	11
2.2.	Modelo SIS de [4] . . . . .	12
3.1.	Complejo y no complejo simplicial . . . . .	15
3.2.	Adyacencia superior e inferior . . . . .	15
3.3.	Adyacencia general . . . . .	19
3.4.	Diferentes grados . . . . .	21
3.5.	Adyacencias superior e inferior para símlices de dimensiones distintas . . . . .	22
3.6.	Contraejemplos . . . . .	23
3.7.	La NO unicidad del símlice común . . . . .	24
3.8.	Adyacencia general para símlices de dimensiones distintas . . . . .	26
3.9.	Grado superior generalizado de un q-símlice . . . . .	27
3.10.	Grado de adyacencia general . . . . .	29
4.1.	MCS de [16] . . . . .	33
4.2.	Diagrama bidimensional del MCS de orden D=2 (de [16]) . . . . .	37
4.3.	Runge-Kutta de orden 2 para $\lambda_{\Delta} \leq 1$ . . . . .	39
4.4.	Runge-Kutta de orden 2 para $\lambda_{\Delta} > 1$ . . . . .	40
4.5.	Grados medios de aristas y triángulos de los complejos simpliciales “reales” creados en [16] a partir de los datasets (de [16]) . . . . .	42
4.6.	MCS de orden D=2 sobre complejos simpliciales reales donde $\rho^*$ denotaría nuestro $i^*$ (de [16]) . . . . .	43
4.7.	Distribuciones de los datasets con datos reales (de [16]) . . . . .	44
4.8.	MCS de orden D=2 sobre complejos simpliciales reales (de [16]) . . . . .	44
4.9.	SCM de orden D=2 sobre una Red Sintética (de [16]) donde $\rho^*$ es nuestro $i^*$ y $\rho(t)$ es nuestro $i(t)$ . . . . .	49

# Capítulo 0

## Introducción

Hoy en día, estamos rodeados de sistemas y organizaciones muy complicados, y en ocasiones incluso formamos parte de ellos. Por ejemplo, la **sociedad** capta la interacción de miles de personas, y el **transporte terrestre** permite conectar casi todos los lugares del mundo. Estos sistemas se denominan **sistemas complejos**, debido a la dificultad de comprender y predecir su comportamiento, y para cada uno de ellos existe una red que lo representa. En [18], aceptan tres propiedades comunes que caracterizan a un sistema complejo: 1<sup>a</sup>) hay una cierta organización dentro de la irregularidad, 2<sup>a</sup>) sus elementos se comportan de manera diferente de forma individual que como grupo y 3<sup>a</sup>) hay una jerarquía dentro de sus elementos. Estos sistemas suelen modelizarse en matemáticas con **grafos**, donde hay puntos llamados **nodos** o **vértices**, que son las entidades o agentes, y enlaces llamados **aristas**, que unen esos vértices y que representan relaciones entre pares de agentes.

La **Ciencia de las Redes** es un área de investigación interdisciplinaria que surgió a principios del s.XXI y cuyo objetivo es desarrollar enfoques y técnicas, tanto prácticas como teóricas, para entender y comprender las redes (véase [6]). Su origen puede remontarse a la publicación del artículo [8] de Erdős-Rényi en 1959, que revitalizó el interés en las redes y marca el comienzo del estudio de redes aleatorias en la Teoría de Grafos.

El estudio de las redes ha tenido un gran impacto tanto en el ámbito científico como en el social, medido en parte por la gran diversidad y alcance de sus aplicaciones. Así, algunas de las aplicaciones de la Ciencia de las Redes se encuentran en la biología [17], la farmacia [14], la seguridad [2] o la sociología [7]. Como consecuencia de todas estas aplicaciones, hay una gran variedad de estilo de trabajo e intereses entre los científicos de redes.

La epidemiología es una de las aplicaciones más activas de la Ciencia de las redes y su modelización está basada fundamentalmente en la compartimentalización de la sociedad en **susceptibles**, individuos que pueden contraer la enfermedad, e **infectados**, que son los que pueden infectar al resto de la población, y en la suposición de que cualquier persona puede infectar a cualquier otra. Dicha modelización nos permite predecir la propagación e impacto de los distintos patógenos que aparecen (véanse [3, 15]).

Sin embargo, las redes representadas habitualmente por grafos no permiten representar interacciones entre más de dos agentes. Supongamos por ejemplo que 3 autores, A, B y C trabajan de manera conjunta para publicar un libro. Podemos representar esta relación mediante tres puntos unidos formando un triángulo relleno ABC. Ahora bien,

dicha representación en red no diferencia esta situación de cuando esos mismos autores interactúan por parejas y aparecen 3 libros, AB, BC y AC.

Por ello, el estudio de la propagación de las enfermedades a través de la Ciencia de Redes está limitado por la aparición de interacciones en las que forman parte grupos de entidades, que no pueden ser representadas por grafos. Para resolver este problema, el tipo de representación que vamos a utilizar en este trabajo son los complejos simpliciales.

Los **complejos simpliciales** son una estructuras matemáticas que sí nos van a permitir representar las relaciones de orden superior, y distinguirlas de las relaciones de parejas de un sistema complejo. Como veremos en este trabajo, los 0-símplices serán vértices, los 1-símplices corresponderán con aristas, los 2-símplices con triángulos rellenos, etc. Así, en el ejemplo anterior el triángulo relleno ABC es un 2-símplice, mientras que el triángulo sin rellenar son tres 1-símplices formando un triángulo.

El objetivo principal de este trabajo estudiar la propagación de epidemias sobre redes complejas y modelizadas como redes simpliciales, en las que puede haber interacciones de orden superior entre varios agentes. Para ello organizaremos el trabajo de la siguiente manera.

Comenzaremos en el Capítulo 1 haciendo una breve introducción sobre redes, clasificándolas según su distribución de grado en Redes Aleatorias y de escala-libre, y obteniendo sus principales características.

A continuación, en el Capítulo 2, describiremos los modelos compartimentales SI y SIS (Susceptible-Infectado-Susceptible) sobre grafos. Estudiaremos además el comportamiento del modelo SIS distinguiendo si se propaga sobre redes aleatorias o de escala-libre, y utilizando así las propiedades de redes vistas en el primer capítulo.

En el Capítulo 3, daremos definiciones y propiedades básicas de los complejos simpliciales, detallándolas con ejemplos. Además, explicaremos las nociones de adyacencia superior, inferior y generalizada de símplices y el grado de dichos símplices en un complejo, que nos dará una forma de medir la “influencia” de las distintas comunidades en un complejo simplicial. Para introducirse en la teoría de complejos simpliciales se pueden consultar libros como [11, 21].

Por último, describiremos una generalización del modelo SIS sobre complejos simpliciales propuesto en [16] en 2016 llamado **Modelo de Contagio Simplicial** (MCS). Estudiaremos el comportamiento de este modelo a través de la solución de una ecuación diferencial que aproxima dicho modelo. Detallaremos además un algoritmo de creación aleatoria de complejos simpliciales y, finalmente, comentaremos los resultados obtenidos sobre la dinámica del modelo MCS al simularlo sobre complejos simpliciales reales y sintéticos.



# Capítulo 1

## Introducción a las Redes

La **teoría de grafos** es una de las áreas de la Matemática Discreta que se ocupa de resolver problemas mediante representaciones llamadas *grafos* y cuya gran popularidad reside en su variedad de aplicaciones. El origen de esta rama de las matemáticas se remonta a 1735, con la aparición del famoso problema de “Los puentes de Königsberg”. En ese problema se preguntaban si era posible recorrer los siete puentes de la ciudad sin pasar dos veces por ninguno de ellos. A Leonard Euler se le ocurrió representar las cuatro partes terrestres de la ciudad por puntos y las conexiones entre ellas (los puentes) por líneas que unían los puntos. Usando esta representación gráfica de la ciudad, Euler no solo resolvió el problema sino que introdujo además el concepto de grafo ([10]).

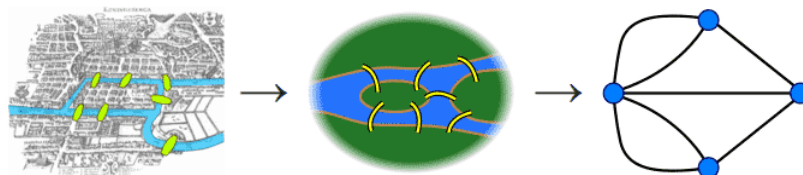


Figura 1.1: Los puentes de Königsberg (Imagen extraída de la Wikipedia)

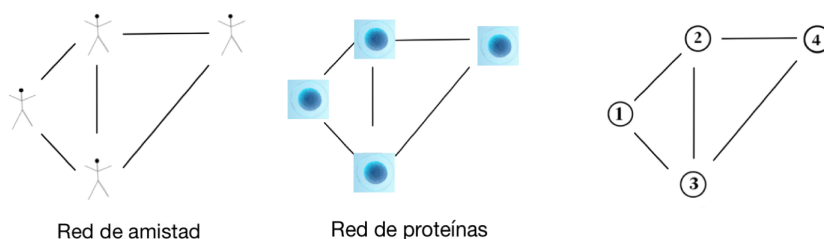
Un **grafo** es un conjunto de puntos llamados nodos o vértices unidos por un conjunto de enlaces llamados aristas. Además, diremos que un grafo es **completo** si todos sus nodos están conectados entre sí. Matemáticamente, un grafo  $G$  es un triple conjunto  $(V(G), A(G), I(G))$  donde  $V(G)$  es un conjunto cuyos elementos se llaman **vértices** o **nodos**,  $A(G)$  es un conjunto cuyos elementos se llaman **aristas** e  $I(G)$  es una **relación** que asocia a cada arista  $a \in A(G)$  dos vértices de  $V(G)$  llamados extremos.

Dado un grafo  $G$ , llamaremos **orden de  $G$**  al número de vértices que tiene dicho grafo y **tamaño de  $G$**  al número de aristas. Las aristas de un grafo pueden estar orientadas. Una arista con orientación recibe el nombre de **arco**. Diremos que un grafo es **dirigido** si sus nodos están unidos por arcos. Si por el contrario las aristas de un grafo no están orientadas se dice que el grafo es **no dirigido**. Un claro ejemplo de un grafo dirigido es la **red de llamadas telefónicas**, en la que un nodo  $A$  se une a  $B$  mediante un arco si  $A$  llama a  $B$ . Por otra parte, la **red de amistad**, en la que dos nodos están unidos por una

arista si mantienen una relación de amistad, o la **red de interacción proteínas**, en la que dos proteínas se conectan si interaccionan entre ellas, son grafos no dirigidos.

Además de distinguir entre grafos dirigidos y no dirigidos, podemos clasificar los grafos bajo otros puntos de vista. Si tenemos en cuenta por ejemplo el número de enlaces que hay entre dos nodos cualesquiera de un grafo, los **grafos simples** son aquellos en los que cada par de vértices está unido a lo sumo por una arista (grafo no orientado) o por dos arcos (grafo orientado). En caso contrario el grafo se denomina **compuesto** ([4, 12, 13, 19]).

En numerosas ocasiones, como le ocurrió a Euler en el problema de “Los puentes de Königsberg”, utilizar grafos nos puede facilitar la comprensión y resolución de problemas actuales. Además, la representación de redes a través de grafos nos ofrece un **lenguaje común** para estudiar sistemas muy diferentes. Así, dos sistemas distintos pueden tener la misma representación en un grafo. Es el caso de la red de amistad y la red de interacción de proteínas que observamos en la siguiente figura.



Los índices o medidas de centralidad son una herramienta importante para estudiar las propiedades estructurales de una red. En [9] se define un índice de centralidad como “una cuantificación numérica de la *importancia* de un nodo en términos de su posición, estructural o dinámica, en una red”. Dado un grafo, uno de los índices de centralidad más relevantes es el **grado** de un vértice, que es el número de aristas incidentes con él. Así pues, el grado de un vértice en un grafo nos dará información sobre la *importancia* de dicho nodo en ese grafo. En el caso de los grafos dirigidos distinguimos entre dos tipos de grados de un nodo: el **grado de salida**, que es el número de arcos que salen de dicho nodo, y el **grado de llegada**, que es el número de nodos que tienen ese nodo como destino.

Tengamos en cuenta por ejemplo la red social Instagram y consideremos un grafo en el que los nodos son los distintos usuarios de esa red. Así, un usuario A estará unido con otro usuario B mediante una arista si A sigue a B. Tendremos por lo tanto un grafo dirigido que representará la *Red de Instagram*. Algunos de los usuarios en Instagram cuentan con un número muy elevado de seguidores (su grado de llegada es muy elevado), son los llamados “Influencers”. Por ejemplo, en Febrero de 2022, la persona más seguida en Instagram era el futbolista portugués Cristiano Ronaldo, que contaba con más de 407 millones de seguidores.

Es claro que en el grafo definido antes, el grado de los nodos “influencers” será más elevado que el resto de los usuarios y serán “más influyentes” en la *Red de Instagram*, pues al contar más seguidores que la media podrán llegar a más gente.

Ligado a la noción de grado, aparece la noción de adyacencia, que nos va a permitir establecer una relación entre dos vértices. Así, diremos que dos vértices son adyacentes si ambos están contenidos en una misma arista.

Es evidente que en una misma red pueden coexistir nodos con distinto grado. Denotaremos por  $\langle k \rangle$  al **grado promedio de una red** y llamaremos **centro** o **influencer** de una red a un nodo con un grado muy elevado. Al igual que con el grado, en el caso de los grafos dirigidos tendremos dos valores promedios de una red: el **grado promedio de salida**  $\langle k_s \rangle$  y el **grado promedio de entrada**  $\langle k_e \rangle$ . Además, un parámetro fundamental de las redes es la **distribución de grado**  $p_k$ , que nos da la probabilidad de que un nodo elegido al azar tenga grado  $k$ . Para grafos dirigidos  $p_{k_e}$  es la **distribución de grado de entrada** y  $p_{k_s}$  es la **distribución de grado de salida**. Esta distribución de grado nos permitirá calcular muchas propiedades y conocer la topología de la red, así como clasificarla o dilucidar patrones de comportamiento.

## 1.1. Redes aleatorias

A finales de los años 50 del siglo pasado, Erdős y Rényi publicaron un artículo ([8]) con el que revitalizaron el uso de los grafos y sentaron muchas de las bases de la teoría moderna de grafos. Una de sus mayores aportaciones fue la **Teoría de redes aleatorias**, fruto de considerar y analizar las propiedades del modelo más simple de una red, el **grafo aleatorio**. Este grafo fue una primera modelización de redes en la cuál consideraron  $N$  nodos donde cada par de nodos tenían la misma probabilidad de estar conectados[22, 26].

Así pues, para generar sintéticamente una red aleatoria de  $N$  nodos y probabilidad de contacto uniforme  $p$ , denotada por  $G(N, p)$ , siguieron el siguiente algoritmo [4]:

1. Comenzamos con  $N$  nodos aislados.
2. Seleccionamos un par de nodos y generamos un número aleatorio entre 0 y 1. Si dicho número es menor que  $p$ , conectamos el par de nodos. En otro caso, los dejamos desconectados.
3. Volvemos al paso (2) hasta haber recorrido los  $\binom{N}{2}$  pares de nodos de la red aleatoria que estamos creando.

Como hemos dicho, una de las caracterizaciones de una red es su distribución de grado. Si consideramos un vértice  $v$  cualquiera en un grafo aleatorio  $G(N, p)$ , sabemos que podría estar conectado a cada uno de los  $N - 1$  vértices restantes con probabilidad  $p$ , luego la probabilidad de que se conecte con  $k$  nodos de los  $N - 1$  posibles (es decir, la probabilidad de que dicho nodo tenga grado  $k$ ) vendrá dada por la **distribución binomial de parámetros  $N - 1$  y  $p$** , cuya función de distribución es:

$$p_k = \binom{N - 1}{k} p^k (1 - p)^{(N-1)-k} \quad (1.1)$$

Dado un nodo cualquiera fijo y  $k$  nodos, la probabilidad de que se conecte con todos esos  $k$  nodos es  $p^k$ , que se multiplica por la probabilidad de que no se conecte con ninguno de los  $(N - 1) - k$  nodos restantes,  $(1 - p)^{(N-1)-k}$ . Teniendo en cuenta todas las maneras de tomar los  $N - 1$  nodos de  $k$  en  $k$  nos aparece el factor  $\binom{N-1}{k}$ . Obtenemos por tanto la probabilidad de que un nodo cualquiera tenga grado  $k$  multiplicando los tres factores.

Para  $N$  lo suficientemente grande, por ejemplo  $N \gg \langle k \rangle$ , la distribución de grado binomial dada por (1.1) se puede aproximar por una distribución de Poisson de parámetro  $\lambda = \langle k \rangle$  cuya función de probabilidad es:

$$p_k = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!} \quad (1.2)$$

y la gráfica correspondiente a dicha función es la siguiente:

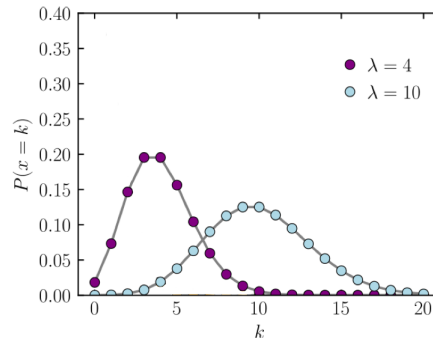


Figura 1.2: Distribución de Poisson de [4]

Esta distribución de Poisson, aunque es solo una aproximación, es la utilizada para estudiar las propiedades de las redes aleatorias, debido a su sencillez analítica. Por ello, a partir de ahora, como en [4], **asumiremos que las redes aleatorias tienen una distribución de grado de Poisson.**

Analizando la gráfica 1.2 y la función de distribución (1.2), obtenemos una serie de **propiedades de las redes aleatorias:**

1. En la Figura 1.2 observamos que la distribución de Poisson tiene la forma de la campana de Gauss. Por tanto, es simétrica respecto al valor promedio  $\langle k \rangle$ , valor en el cuál tiene un máximo. Así, es claro que en una red aleatoria el grado de la mayoría de nodos se encuentra cerca de  $\langle k \rangle$ . Esto implica que hay muy pocos nodos con un grado muy alto. Podemos concluir entonces que en una red aleatoria apenas hay centros y  $\langle k \rangle$  es un valor representativo. Se podría decir entonces que  $\langle k \rangle$  representa una especie de escala para el grado de los nodos.
2. Cuanto más alto sea el valor de  $p$  más densa será la red aleatoria. Eso hará que el grado promedio de la red  $\langle k \rangle$  aumente y por tanto el pico de la gráfica se desplace hacia la derecha.
3. El ancho de la distribución nos representa la **desviación típica**, que es una medida que cuantifica la variación o dispersión de un conjunto de datos numéricos. Así, que la forma de la campana sea muy ancha nos indica que hay una gran dispersión en los datos, mientras que si es estrecha sabremos que no hay una gran diferencia entre los valores de los distintos datos. Este ancho de la distribución depende también de los valores de  $p$  y  $\langle k \rangle$ . Cuanto más densa sea la red más ancha será la gráfica, pues  $\langle k \rangle$  se desplazará hacia la derecha y sabemos que la campana de Gauss es simétrica. Por tanto, hay más valores posibles para  $k$  y las diferencias entre los grados de los distintos nodos de la red son mayores.

4. Fijándonos en (1.2), es claro que la distribución de grados de las redes aleatorias **no depende del tamaño de la red  $N$** , sino que depende únicamente del grado promedio  $\langle k \rangle$ .

**Observación 1.1.1.** Dado un grafo aleatorio  $G(N, p)$ , es interesante tener en cuenta el caso en el que  $p = 1$ . En dicho caso, **obtendremos un grafo completo**, pues cada par de nodos se conectará con probabilidad 1 (suceso seguro). Además, todos los nodos tendrán el mismo grado  $k = N - 1$  y por tanto  $\langle k \rangle = k$ .

## 1.2. Redes de escala-libre o libres de escala

Viendo las conclusiones de la sección anterior, podemos preguntarnos cuáles de ellos se verifican en efecto en las redes reales. ¿Aproxima la distribución de Poisson de manera correcta la distribución de grados de las redes reales? ¿Son precisos los resultados que obtenemos en el modelo de red aleatoria Erdős-Rényi? Durante décadas se asumió que todos los sistemas complejos del mundo real como la célula, la sociedad o internet eran redes aleatorias. Sin embargo, durante la primera década del s.XXI numerosas investigaciones demostraron que muchas de las redes reales, independientemente de su antigüedad, naturaleza o función, tienen estructuras similares y distintas a las redes aleatorias [5].

La primera señal de que las redes reales podrían tener propiedades de red no aleatorias fue a principios del s.XXI cuando descubrieron que la red dirigida y aparentemente aleatoria WWW (World Wide Web), en la que los nodos son documentos y los enlaces URL's, seguía una distribución de potencia  $p_k = k^{-\gamma}$  (véase [1]). Dicha distribución no coincidía con la distribución de Poisson precedida por el Modelo clásico de redes aleatorias. Más tarde, al estudiar las distribuciones de otras redes reales como las redes de actores unidos por películas y artículos científicos unidos por citaciones (detallado en [23]), detectaron que la WWW no era la única red real con esta propiedad. Muchas de las redes reales que nos rodean siguen una distribución de grado de potencia. Así, diremos que una red es de **escala-libre** si su distribución de grado sigue una distribución de potencia (véase [4]).

Para ver las principales **diferencias entre las redes de escala-libre y las redes aleatorias**, compararemos según los valores de  $k$  las distribuciones de Poisson y de potencia para  $\gamma = 2,1$ , representadas en la Figura 1.3:

1. Para  **$k$  pequeño** observamos que la distribución de potencia está por encima de la de Poisson. Esto nos indica que las redes de escala-libre, al contrario que las redes aleatorias, tienen una gran número de nodos con grado pequeño.
2. Para  **$k$  cercano a  $\langle k \rangle$** , la distribución de Poisson supera a la de potencia. En las redes de escala-libre no hay tantos nodos con grado cercano a  $\langle k \rangle$  como en las redes aleatorias y por tanto  $\langle k \rangle$  no es representativo. De ahí que estas redes se denominen redes libres de escala, pues  $\langle k \rangle$  no representa una escala en el grado de los nodos como en el caso de las redes aleatorias.
3. Para un **valor de  $k$  muy alto**, fijándonos en la gráfica de los ejes logarítmicos, observamos que la distribución de potencias supera a la distribución de Poisson en gran medida. Esto nos informa de que es mucho más probable encontrar un centro o influencer en una red de escala-libre que en una red aleatoria.

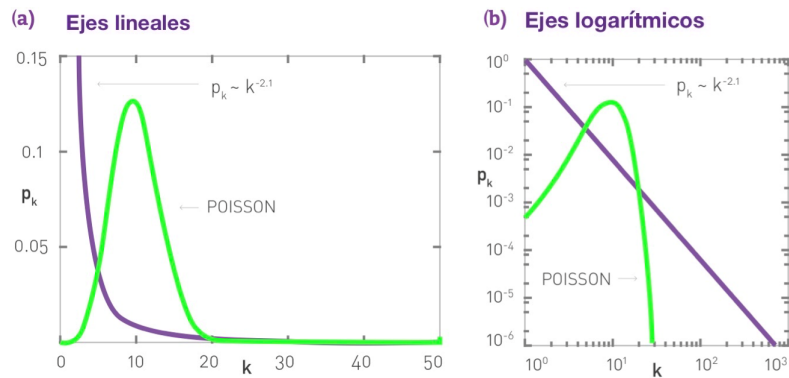


Figura 1.3: Distribución de Poisson (curva verde) y de potencia (curva morada) de [4]

En [4] hacen además una comparación entre las redes reales y las predicciones de las redes aleatorias, utilizando en este caso los datos de redes reales muy distintas como la Red de Internet, la Red de colaboraciones científicas o la Red de interacciones de proteínas entre otras. En esta comparación se obtienen dos diferencias características:

1. **Mientras que en una red aleatoria apenas hay centros, en una red de escala-libre son bastante habituales.** En la primera propiedad de las redes aleatorias habíamos llegado a la conclusión de que en una red aleatoria no hay centros. Sin embargo, esto no es lo que ocurre en la realidad. Por ejemplo, con el modelo de red aleatoria para la red de Internet se obtiene que el grado máximo esperado es 20, mientras que en los datos reales hay routers cuyo grado es próximo a  $10^3$ . Observamos que esta característica concuerda con la comparación de distribuciones de antes para un valor de  $k$  alto.
2. **La diferencia de grados en las redes reales es mayor que la esperada en una red aleatoria.** Esta diferencia viene dada por la **desviación típica**, que es una medida que cuantifica la variación o dispersión de un conjunto de datos numéricos. Por ejemplo, en la Red de Internet, mientras que el modelo de redes aleatorias espera que  $\sigma_k = 2,52$ , gracias a los datos reales sabemos que  $\sigma_{internet} = 14,14$ .

Gracias a la comparación con los datos empíricos y el estudio de las distribuciones de distintas redes reales, hoy en día la **propiedad de escala-libre de las redes reales** se ha establecido indudablemente. Sin embargo, dada la gran diversidad de redes reales que hay, resulta curioso que gran parte de ellas converjan a una estructura similar. Por otra parte, sabemos que los centros son la principal diferencia entre las redes aleatorias y las de libre-escala. Ahora, ¿por qué la teoría de grafos aleatorios de Erdős-Rényi no consigue crear dichos centros? Para resolver estas cuestiones veremos a continuación qué propiedades son las responsables de la aparición de la propiedad de escala-libre.

En 1999 se descubrieron dos suposiciones del modelo de redes aleatorias que no se cumplen en las redes reales y que juegan un papel muy importante en la forma de la distribución de grado de las redes reales:

- **Crecimiento:** el modelo de redes aleatorias asume que hay un número fijo de nodos, mientras que en las redes reales el número de nodos varía continuamente. Por

ejemplo, en la red de citas, cada vez que se publica un nuevo artículo aparece un nuevo nodo, de manera que el tamaño de la red está en continuo crecimiento. Si consideramos por otra parte la red de Facebook, en la que los nodos son los usuarios, es claro que diariamente habrá miles de personas que se creen una nueva cuenta y aparezcan nuevos nodos, y también habrá muchas personas que se borren su cuenta, y los nodos usuarios de esas personas desaparecerán.

- **Enlace preferencial:** el modelo de las redes aleatorias asume que los nodos interactúan entre sí de manera aleatoria. Sin embargo, lo que ocurre en las redes reales es que los nuevos nodos tienden a vincularse con los nodos más conectados. Por ejemplo, cuanto más citado es un artículo más “popular” se vuelve y con ello más gente lo leerá y lo citará en artículos posteriores.

El detectar estas dos propiedades llevó a la aparición de un modelo que genera redes de escala-libre considerando tanto el crecimiento como el apego preferencial: el **modelo Barábasi-Albert** (véase [4]).

Como en el caso del modelo del grafo aleatorio de Erdős-Rényi, veamos cuál es el algoritmo de este modelo:

1. Comenzamos con  $m_0$  nodos aislados.
2. En cada paso añadimos un nuevo modelo con  $m$  ( $\leq m_0$ ) enlaces (que conectan el nuevo nodo con el resto de nodos de la red). De esta manera tienen en cuenta el crecimiento.

Además, para considerar el enlace preferencial tienen en cuenta que la probabilidad de unir el nuevo nodo añadido con cualquier otro nodo  $i$  con grado  $k_i$  es

$$\Pi(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j}$$

# Capítulo 2

## Epidemiología en redes

Hoy en día hay una gran diversidad de procesos de difusión en redes: **biológicos** (enfermedades infecciosas, de transmisión sexual, etc), **digitales** (virus informáticos o en móviles), **sociales** (rumores, memes, comportamientos, etc). Todos estos procesos, aunque cuentan con distintos agentes de propagación, se difunden en distintos tipos de redes y siguen diferentes mecanismos de transmisión, comparten unos **patrones comunes** que “nos permitirán describirlos utilizando el mismo marco teórico y de modelado basado en redes” [4].

En este capítulo vamos a ver distintos modelos matemáticos a través de los cuales estudiaremos la **propagación de enfermedades infecciosas en redes**. Gracias a dichos modelos podremos estimar en cada momento la proporción de la población que está infectada. Esta información sobre la dinámica de transmisión de enfermedades infecciosas será de gran ayuda para la toma de decisiones de la salud pública, pues determina cómo debemos administrar curas o vacunas disponibles.

Empezaremos por describir brevemente los **modelos compartimentales SI y SIS**, en los que dividimos la población en dos grupos o estados: los **susceptibles**, que son los individuos que pueden contraer la enfermedad; y los **infectados**, que son aquellos que pueden contagiar la enfermedad.

Consideremos una población de  $N$  individuos y denotemos por  $S(t)$  al número de susceptibles a tiempo  $t$  y por  $I(t)$  al número de infectados a tiempo  $t$ . Sea  $\beta$  la **tasa de infección** o **tasa de transmisión de la enfermedad**; por ejemplo, la probabilidad de que un infectado le transmita la enfermedad a un susceptible con el que está en contacto.

### MODELO SUSCEPTIBLE-INFECTADO (SI)

En este modelo supondremos que una vez que un susceptible se infecta, permanece en este grupo para siempre (apartado (a) de la Figura 2.1). La probabilidad de que un infectado se encuentre con un susceptible en una unidad de tiempo es  $S(t)/N$ . Como  $\beta$  es la **tasa de infección**, la probabilidad de que lo contagie será  $\beta S(t)/N$ . Teniendo en cuenta que hay  $I(t)$  infectados a tiempo  $t$ , la variación de infectados respecto del tiempo será:

$$\frac{dI(t)}{dt} = \beta \frac{S(t)}{N} I(t) \quad (2.1)$$

Debemos tener en cuenta además que el tamaño de la población es un número constante  $N$ . Así, es claro que siempre se cumple  $S + I = N$ . Denotando por  $s(t) = \frac{S(t)}{N}$ ,  $i(t) = \frac{I(t)}{N}$ ,



quitando la  $t$  para simplificar y teniendo en cuenta que  $i + s = 1$  tenemos:

$$\frac{di}{dt} = \beta i s = \beta i (1 - i) \quad (2.2)$$

Podemos obtener los puntos de equilibrio estudiando los puntos donde se anula la derivada. Así, tendremos la ecuación:

$$\frac{di}{dt} = \beta i (1 - i) = 0 \longrightarrow \begin{cases} i = 0 \text{ y } s = 1 \\ i = 1 \text{ y } s = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

Obtenemos dos puntos de equilibrio:  $E_1 = (0, 1)$  y  $E_2 = (1, 0)$ . Estos puntos representan los estados de **libre de infección** y **endémico** respectivamente. Así pues, en este modelo cuando aparece un patógeno la fracción inicial de nodos infectados  $i_0$  crece de manera que finalmente toda la población es infectada y llegamos al **punto de equilibrio endémico**  $E_2$  (apartado (b) de la Figura 2.1).

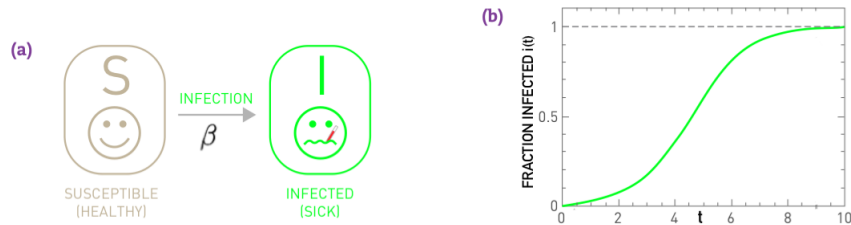


Figura 2.1: Modelo SI de [4]

## MODELO SUSCEPTIBLE-INFECTADO-SUSCEPTIBLE (SIS)

En muchas enfermedades cuando los individuos infectados se recuperan vuelven a ser susceptibles. A esto se le llama **proceso de recuperación**, y se tiene en cuenta en este modelo SIS (apartado (a) Figura 2.2). Sea  $\mu$  la **tasa de recuperación**, que es la tasa por unidad de tiempo a la que los organismos se recuperan. Así, en una unidad de tiempo se recuperarán  $\mu I(t)$  infectados y por lo tanto en este modelo la variación de infectados con respecto al tiempo es:

$$\frac{di}{dt} = \beta i (1 - i) - \mu i \quad (2.4)$$

Ahora, los puntos de equilibrio son:

$$\frac{di}{dt} = i (\beta(1 - i) - \mu) = 0 \longrightarrow \begin{cases} i = 0 \text{ y } s = 1 \\ i = 1 - \frac{\mu}{\beta} \text{ y } s = \frac{\mu}{\beta} \end{cases} \quad (2.5)$$

El **número reproductivo básico** se define por  $R_0 = \frac{\beta}{\mu}$ , que determinará el estado al que converge la epidemia. Así, este modelo tiene dos posibles resultados:

1. Si  $R_0 \leq 1$ , la tasa de recuperación es mayor que la tasa de infección ( $\beta \leq \mu$ ). Esto significa que en una unidad de tiempo el número de individuos que se recuperan supera el número de individuos que se infectan. Así, el número de infectados decrecerá

hasta que finalmente no hay nadie infectado. Concluimos por tanto que si  $\beta \leq \mu$  las trayectorias convergen a  $E_0 = (0, 1)$ . Cuando esto ocurre la epidemia tiende al **estado libre de enfermedad**.

- Si por el contrario  $R_0 > 1$ , tenemos que  $\beta > \mu$  y las trayectorias convergen a  $E_1 = (1 - \frac{\mu}{\beta}, \frac{\mu}{\beta})$ . En este caso, en general no acaba toda la población infectada, sino que  $i$  alcanza un valor constante  $i(\infty) < 1$ . Cuando esto ocurre se dice que hay un **estado endémico** (apartado (b) Figura 2.2).



Figura 2.2: Modelo SIS de [4]

Hasta aquí, hemos supuesto que todos los individuos de la población están en contacto todos; es decir, que la topología de contactos es un grafo completo. No obstante, como hemos visto en el Capítulo 0, las redes reales no siempre son grafos completos. En la siguiente sección describiremos de nuevo el modelo SIS distinguiendo el tipo de red sobre la que se propaga la enfermedad.

## 2.1. Modelo SIS en redes aleatorias

Como antes, dividiremos la población en infectados y susceptibles. Además, en este caso vamos a sumir la **hipótesis de mezcla homogénea**.

**Hipótesis de mezcla homogénea.** *Esta hipótesis asume que cada individuo tiene la misma probabilidad de encontrarse con un infectado. Esta hipótesis nos elimina la necesidad de conocer de manera precisa la topología de contactos, sustituyéndola por la suposición de que cualquiera puede infectar a otra persona [4].*

Además, supondremos que cada individuo tiene exactamente  $\langle k \rangle$  contactos. Es decir, impondremos que aunque tengamos nodos con 1 contacto y otros con 20, cada uno de ellos tendrá exactamente  $\langle k \rangle$  contactos (recordemos que en las redes aleatorias la gran mayoría de nodos tienen grado  $\langle k \rangle$ , luego  $\langle k \rangle$  es un valor representativo).

Utilizando la misma notación que el “modelo tradicional”, la variación de infectados con respecto al tiempo es:

$$\frac{di}{dt} = \beta \langle k \rangle i(1 - i) - \mu i \quad (2.6)$$

Calculando los puntos donde se anula la derivada obtenemos dos puntos de equilibrio:  $E_0 = (0, 1)$  y  $E_1 = (1 - \frac{\mu}{\beta \langle k \rangle}, \frac{\mu}{\beta \langle k \rangle})$  y las trayectorias de la fracción de infectados y de la fracción de susceptibles convergen a uno u a otro punto dependiendo de los valores de

la  $\beta$  y la  $\mu$ . Así, haciendo un razonamiento análogo al de antes definimos el parámetro  $\lambda = \beta \langle k \rangle / \mu$  y distinguimos dos casos:

1. Si  $\lambda \leq 1$ , sabemos que  $\beta \langle k \rangle \leq \mu$ , las trayectorias convergerán a  $E_0$  y tendremos un estado libre de enfermedad.
2. Si  $\lambda > 1$ ,  $\beta \langle k \rangle > \mu$  las trayectorias convergerán a  $E_1$  y tendremos un estado endémico.

Observamos que si  $\langle k \rangle = 1$ , el parámetro  $\lambda$  coincide con el número reproductivo básico  $R_0$ .

## 2.2. Modelo SIS en redes de escala-libre

En las redes aleatorias, gracias a la hipótesis de mezcla homogénea no necesitábamos conocer la forma exacta de la topología de contactos. Suponíamos que todos podían estar en contacto con todos y que cada uno de ellos tenía  $\langle k \rangle$  contactos. Sin embargo, en muchas de las redes reales esto no es así y la probabilidad de que un individuo se encuentre con un infectado puede depender del número de infectados con los que esté en contacto dicho individuo. Además, como vimos en el Capítulo 0, muchas de las redes reales son de escala-libre, luego  $\langle k \rangle$  no es un valor representativo para la caracterización de la topología de contactos. Por ello, en el caso de las redes de escala-libre **tendremos que distinguir el grado de cada nodo**, apareciéndonos así tantas ecuaciones diferenciales como nodos tenga la red.

Para reducir el número de ecuaciones, utilizaremos la “aproximación del grado de bloques”, que asume que **nodos con el mismo grado son equivalentes estadísticamente**. De esta manera, nos saldrán tantas ecuaciones como grados haya en la red.

Denotaremos por  $I_k$  al número de infectados de grado  $k$ ,  $N_k$  al número de nodos de grado  $k$ , por  $i_k = I_k/N_k$  la fracción de nodos infectados con grado  $k$  y por  $\beta$  la tasa de infección. Además tendremos en cuenta una función de densidad  $\theta_k$  que representará la fracción de individuos infectados que son vecinos de un nodo con grado  $k$ . La variación de infectados con respecto al tiempo para los nodos de grado  $k$  será en este caso:

$$\frac{di_k}{dt} = \beta(1 - i_k)k\theta_k - \mu i_k \quad (2.7)$$

**Observación 2.2.1.** Con la hipótesis de mezcla homogénea poníamos directamente  $i$  en vez de la función de densidad  $\Theta$ . Gracias a  $\Theta$  sí que tenemos en cuenta el hecho de que la probabilidad de que un individuo se encuentre con un infectado depende de la fracción de infectados con los que esté en contacto dicho individuo.

En esta ocasión, el estudio del equilibrio se escapa del objetivo de este trabajo, pero puede encontrarse detallado en el Capítulo 10 de [4].

# Capítulo 3

## Complejos simpliciales

### 3.1. Definición de un complejo simplicial

En esta sección, vamos a ver una generalización de redes, los **complejos simpliciales**, que son una opción más acertada para representar los sistemas complejos que se originan en el mundo real. Esto se debe a que, a diferencia de los grafos, los complejos simpliciales permiten representar interacciones entre más de dos agentes, de manera que podremos estudiar las colaboraciones en grupo.

Durante todo el capítulo seguiremos principalmente [24].

**Definición 3.1.** Un **q-símplice**  $\sigma^{(q)}$  es un conjunto de puntos distintos  $\{v_0, v_1, \dots, v_q\}$ . Una **p-cara** de un q-símplice  $\sigma^{(q)}$  ( $p < q$ ) es un p-símplice formado por un subconjunto no vacío  $\{v_{i_0}, v_{i_1}, \dots, v_{i_p}\}$  de  $\{v_0, v_1, \dots, v_q\}$ .

Los puntos  $v_0, v_1, \dots, v_q$  se denominan **vértices** de  $\sigma$  y llamaremos **dimensión** de  $\sigma$  a  $q$ .

**Definición 3.2.** Un **complejo simplicial (finito)** es una colección (finita)  $\mathbf{K}$  de símlices en  $\mathbb{R}^n$  satisfaciendo las siguientes propiedades:

- (1) Si  $\sigma \in \mathbf{K}$  ( $\sigma$  es un símplex de  $\mathbf{K}$ ) y  $\tau$  es una cara de  $\sigma$ , entonces  $\tau \in \mathbf{K}$ .
- (2) Cualquier intersección no vacía de dos símlices cualesquiera de  $\mathbf{K}$  es una cara de cada uno de ellos.

**Definición 3.3.** Se define la **dimensión de  $\mathbf{K}$**  como la máxima dimensión de todos los símlices de  $\mathbf{K}$ .

**Definición 3.4.** Llamaremos **faceta** de  $\mathbf{K}$  a un símplex de  $\mathbf{K}$  que no es cara de ningún otro símplex de  $\mathbf{K}$ .

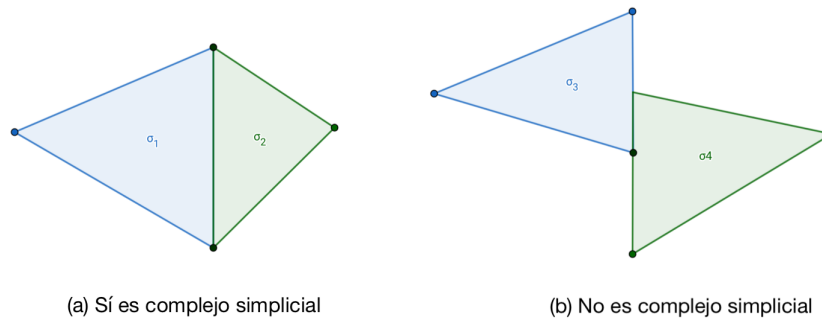


Figura 3.1: Complejo y no complejo simplicial

A partir de aquí  $K$  será siempre un complejo simplicial.

**Definición 3.5.** Denotaremos  $C_q(K)$  al conjunto de  $q$ -símplices de  $K$ ,  
 $C_q(K) = \{q\text{-símplices de } K\}$

**Ejemplo 1.** Si tomamos  $q = 0, 1, 2$  respectivamente tendremos los conjuntos  
 $C_0(K) = \{\text{Vértices de } K\}$ ,  $C_1(K) = \{\text{Aristas de } K\}$ ,  $C_2(K) = \{\text{Triángulos de } K\}$ .

Fijándonos en la definición de complejo simplicial, es claro que si  $\dim K = n$ , se verifica que  $K = \bigcup_{q=0}^n C_q(K)$ .

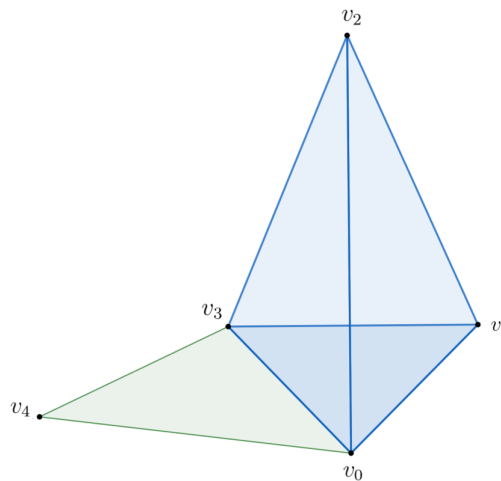


Figura 3.2: Adyacencia superior e inferior

**Ejemplo 2.** En la figura 3.2 tenemos un complejo simplicial  $K$ . Observamos que dicho complejo simplicial tiene dimensión 3, pues el símplice de  $K$  de mayor dimensión es un tetraedro. Además, en  $K$  hay dos facetas (símplices que no son caras de ningún otro símplice): el 2-símplice (triángulo)  $\{v_0, v_3, v_4\}$  y el 3-símplice (tetraedro)  $\{v_0, v_1, v_2, v_3\}$ . Teniendo en cuenta la definición 3.5 y que  $\dim K = 3$ , definimos los siguientes conjuntos:

$$C_0(K) = \{\text{Vértices de } K\} = \{v_0, v_1, v_2, v_3, v_4\}$$

$$C_1(K) = \{\text{Aristas de } K\} = \{\{v_0, v_1\}, \{v_0, v_2\}, \{v_0, v_3\}, \{v_0, v_4\}, \\ \{v_1, v_2\}, \{v_1, v_3\}, \{v_2, v_3\}, \{v_3, v_4\}\} \quad (3.1)$$

$$C_2(K) = \{\text{Triángulos de } K\} = \{\{v_0, v_3, v_4\}, \{v_0, v_1, v_3\}, \{v_0, v_1, v_2\}, \{v_0, v_2, v_3\}, \\ \{v_0, v_2, v_3\}, \{v_1, v_2, v_3\}\} \quad (3.2)$$

$$C_3(K) = \{\text{Tetraedros de } K\} = \{\{v_0, v_1, v_2, v_3\}\}$$

y concluimos que  $K = C_0(K) \cup C_1(K) \cup C_2(K) \cup C_3(K)$ .

## 3.2. Nociones de adyacencia y grado de un $q$ -símplice

En la introducción de redes del Capítulo 1 definimos el grado de un vértice como el número de aristas incidentes con él. Vimos como ese grado nos podía dar información de la “importancia” de dicho nodo en la red, siendo los centros o influencers de la red nodos con grados muy elevados. Además, definimos la noción de adyacencia, que nos permite relacionar dos vértices dentro de una misma red.

En esta sección, queremos extender los conceptos de adyacencia y grado al caso simplicial. Sabemos que dos vértices son adyacentes cuando están ambos contenidos en una misma arista. Pero, dado un complejo simplicial, ¿cuándo podríamos decir que dos aristas son adyacentes? Diremos que dos aristas son adyacentes si ambas están contenidas en el mismo triángulo. Sin embargo, existe otra relación entre dos aristas, que se dará cuando estas compartan un vértice. Aparecen por tanto nuevas nociones de adyacencia tanto superior como inferior que definiremos formalmente a continuación.

Vamos a empezar comparando dos símplexes de igual dimensión  $q$  y permitiendo adyacencias entre ambos únicamente en caras de dimensión uno más,  $q + 1$ , o uno menos,  $q - 1$  (que es el caso tratado por ejemplo en [11]).

Sea  $q > 0$  un entero, y  $\sigma_1, \sigma_2$  dos  $q$ -símplexes distintos de  $K$ .

**Definición 3.6.** Se dice que  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son **adyacentes por arriba**,  $\sigma_1 \sim_U \sigma_2$ , si existe un  $(q+1)$ -símplice que contiene ambos  $q$ -símplexes como  $q$ -caras. Dicho  $(q+1)$ -símplice se denomina **símplice superior común**.

**Lema 3.2.1. (Unicidad del símplice superior común)** Si  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son adyacentes por arriba, el  $(q + 1)$ -símplice que contiene a ambos  $q$ -símplexes como caras es único.

*Demostración.* Supongamos que existen dos  $(q + 1)$ -símplexes  $\tau_1$  y  $\tau_2$  de  $K$  que contienen a ambos  $q$ -símplexes como caras y veamos que coinciden. Entonces se verifica que  $\sigma_1 \cup \sigma_2 \subseteq \tau_1$  y  $\sigma_1 \cup \sigma_2 \subseteq \tau_2$ . Es claro por tanto que  $\sigma_1 \cup \sigma_2 \subseteq \tau_1 \cap \tau_2$ .

Teniendo en cuenta además la definición de complejo simplicial, sabemos que  $\tau_1 \cap \tau_2$  es una cara de  $\tau_1$  y de  $\tau_2$  ( $\tau_1 \cap \tau_2$  es una intersección no vacía).

$\tau_1$  es un  $(q + 1)$ -símplice de  $K$  (tiene  $q+2$  puntos),  $\sigma_1, \sigma_2$  son dos  $q$ -símplexes **distintos** (tienen  $q+1$  puntos) y ya sabemos que  $\sigma_1 \cup \sigma_2 \subseteq \tau_1$ , luego es claro que  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  tendrán  $q$  puntos iguales y se diferenciarán en un solo punto. De ahí que la única “cara” de  $\tau_1$  que contiene ambos  $q$ -símplexes será el propio  $\tau_1$ , con lo que  $\tau_1 = \tau_1 \cap \tau_2$  (pues sabíamos que  $\sigma_1 \cup \sigma_2 \subseteq \tau_1 \cap \tau_2$ ).

Como  $\tau_1 \cap \tau_2$  es cara de  $\tau_2$ ,  $\tau_1 = \tau_1 \cap \tau_2$  es cara de  $\tau_2$ , y como  $\tau_1$  y  $\tau_2$  son los dos  $(q + 1)$ -símplices, por dimensiones concluimos que  $\tau_1 = \tau_2$ . □

**Definición 3.7.** Se dice que  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son **adyacentes por abajo**,  $\sigma_1 \sim_L \sigma_2$ , si tienen una  $(q-1)$ -cara en común a la que llamaremos **símplice inferior común**.

**Lema 3.2.2. (Unicidad del símplice inferior común)** Si  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son adyacentes por abajo, su símplice inferior común es la intersección de dichos  $q$ -símplices, y como consecuencia, es único.

*Demostración.* Sea  $\eta$  un símplice inferior común de  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$ , es decir, un  $(q - 1)$ -símplice de  $K$  ( $q \neq 0$ ) que es cara de  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$ .

- $\eta \subseteq \sigma_1$  y  $\eta \subseteq \sigma_2 \implies \eta \subseteq \sigma_1 \cap \sigma_2$
- Por otra parte, como  $\sigma_1, \sigma_2 \in K$ , por la definición de complejo simplicial sabemos que  $\sigma_1 \cap \sigma_2$  es cara de  $\sigma_1$ . Por tanto, habrá al menos una cara  $\sigma_1$  que contenga a  $\eta$  ( $\eta \subseteq \sigma_1 \cap \sigma_2 \subseteq \sigma_1$ ). Análogamente  $\sigma_1 \cap \sigma_2$  es cara de  $\sigma_2$ .

Como  $\eta$  es un  $(q - 1)$ -símplice ( $q$  puntos),  $\sigma_1$  es un  $q$ -símplice ( $q+1$  puntos) y  $\eta \subseteq \sigma_1$ , habrá exactamente dos “caras” de  $\sigma_1$  que contengan a  $\eta$ , que serán  $\sigma_1$  y  $\eta$ . (Esto es claro ya que  $\sigma^{(1)}$  tiene  $\binom{q+1}{q} = q + 1$   $(q-1)$ -caras y son todas distintas. Así, la única  $(q-1)$ -cara de  $\sigma^{(1)}$  que contiene a  $\eta$  es ella misma).

De momento sabemos que  $\eta \subseteq \sigma_1 \cap \sigma_2 \subseteq \sigma_1$  y que las dos únicas caras de  $\sigma_1$  que contienen a  $\eta$  son  $\sigma_1$  y  $\eta$ .

Si  $\sigma_1 \cap \sigma_2 = \sigma_1$ , como  $\sigma_1 \cap \sigma_2$  es cara de  $\sigma_2$  y como ambos son  $q$ -símplices, por dimensiones,  $\sigma_1 = \sigma_2$ , lo que contradice que  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son símplices distintos, y por tanto podemos concluir que  $\sigma_1 \cap \sigma_2 = \eta$ , y que por tanto  $\eta$  es único. □

**Corolario 3.2.0.1.** Dos  $q$ -símplices distintos  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son adyacentes por abajo  $\iff \sigma_1 \cap \sigma_2$  es un  $(q - 1)$ -símplice de  $K$ .

Y utilizando este corolario vamos a poder demostrar la siguiente proposición:

**Proposición 3.2.1.** Si dos  $q$ -símplices distintos  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son adyacentes por arriba, son también adyacentes por abajo.

*Demostración.* Si  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son adyacentes por arriba, sabemos que existe un  $(q+1)$ -símplice  $\tau$  del que  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son  $q$ -caras. Se verifica entonces que  $\sigma_1 \cup \sigma_2 \subseteq \tau$  y como  $\tau$  es un  $(q + 1)$ -símplice, y  $\sigma_1, \sigma_2$  son dos  $q$ -símplices distintos,  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  compartirán exactamente  $q$  vértice. Por tanto,  $\sigma_1 \cap \sigma_2$  será un  $(q - 1)$ -símplice de  $K$  y aplicando el corolario anterior hemos acabado. □

**Ejemplo 3.** Estudiemos la adyacencia de los diferentes símplices del complejo simplicial  $K$  de la Figura 3.2:

- Los 2-símplices (triángulos)  $\{v_0, v_1, v_3\}$  y  $\{v_0, v_1, v_2\}$  son adyacentes por arriba ya que  $\{v_0, v_1, v_2, v_3\}$  es un  $(2+1)$ -símplice (tetraedro) que contiene ambos 2-símplices como caras.

- Observamos además que  $\{v_0, v_1, v_3\}$  y  $\{v_0, v_1, v_2\}$  tienen una cara común, la arista  $\{v_0, v_1\}$ , luego además de ser adyacentes por arriba, son adyacentes por abajo (recordemos que la adyacencia superior implica la inferior, Proposición 3.2.1).
- Por otra parte,  $\{v_0, v_1, v_3\}$  y  $\{v_0, v_3, v_4\}$  son adyacentes por abajo, pues el 1-símplice  $\{v_0, v_3\}$  es una 1-cara común de ambos. Sin embargo no son adyacentes por arriba, pues no existe ningún 3-símplice de  $K$  que los contenga como caras. Es un claro ejemplo de que la adyacencia inferior no implica la superior.

**Definición 3.8.** El **grado superior** de un  $q$ -símplice  $\sigma^{(q)}$  en  $K$  es el número de  $(q+1)$ -símplices en  $K$  del que  $\sigma^{(q)}$  es una  $q$ -cara. Se denota por  $deg_U(\sigma^{(q)})$ .

**Definición 3.9.** El **grado inferior** de un  $q$ -símplice  $\sigma^{(q)}$  en  $K$  es el número de  $(q-1)$ -símplices en  $K$  que están contenidos en  $\sigma^{(q)}$ . Se denota por  $deg_L(\sigma^{(q)})$  y siempre va a ser  $\binom{q+1}{q} = q + 1$ , pues es el número de  $(q-1)$ -caras de  $\sigma^{(q)}$ .

**Definición 3.10.** El **grado** de un  $q$ -símplice  $\sigma^{(q)}$  es la suma de su grado superior y su grado inferior:

$$deg(\sigma^{(q)}) := deg_L(\sigma^{(q)}) + deg_U(\sigma^{(q)}) = (q + 1) + deg_U(\sigma^{(q)}) \quad (3.3)$$

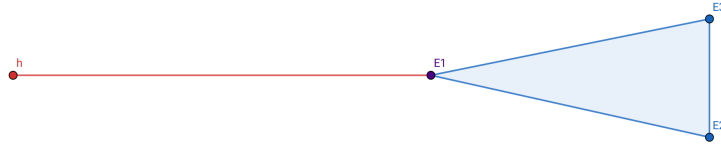
**Ejemplo 4.** Fijándonos de nuevo en la figura 3.2 y teniendo en cuenta la arista  $\sigma^{(1)} = \{v_0, v_3\}$  de  $K$ , veamos qué valores toman los diferentes grados de  $\sigma^{(1)}$  que acabamos de definir.

1. El **grado superior** de  $\sigma^{(1)}$  es el número de 2-símplices (triángulos) del que  $\sigma^{(1)}$  es una cara. Es claro que  $\sigma^{(1)}$  es cara de  $\{v_0, v_3, v_4\}$ ,  $\{v_0, v_1, v_3\}$  y  $\{v_0, v_2, v_3\}$ , luego  $deg_U(\sigma^{(1)}) = 3$ .
2. El **grado inferior** de  $\sigma^{(1)}$  es el número de 0-símplices (vértices) que están contenidos en  $\sigma^{(1)}$ , luego  $deg_L(\sigma^{(1)}) = \binom{1+1}{1} = 2$  (son  $v_0$  y  $v_3$ ).
3. El **grado de**  $\sigma^{(1)}$  es la suma de su grado superior y el inferior, luego:

$$deg(\sigma^{(1)}) = deg_L(\sigma^{(1)}) + deg_U(\sigma^{(1)}) = 2 + 3 = 5 \quad (3.4)$$

Hemos visto antes en el Ejemplo 2 que los triángulos  $\{v_0, v_1, v_3\}$  y  $\{v_0, v_3, v_4\}$  son adyacentes por abajo pero no lo son por arriba. Un ejemplo de una situación parecida es el siguiente: consideremos un complejo simplicial en el que los nodos son autores y dos o más autores están relacionados entre sí si han colaborado de manera conjunta en alguna publicación. Por ejemplo, si dos autores han escrito una obra juntos, sus nodos correspondientes estarán unidos por una arista. Análogamente, si tres autores escriben una obra de manera colaborativa, formarán un triángulo. Este complejo simplicial representa la denominada “Red de autorías”. Supongamos por ejemplo tres autores E1, E2 y E3 que escriben un libro de forma colaborativa y que además E1 publica otra obra con un autor “h”. Si queremos representar esta situación en un complejo simplicial, tendremos un 2-símplice formado por los nodos E1, E2 y E3, y por otra parte el nodo E1 estará unido mediante una arista con el nodo h.





Si nos fijamos en las aristas  $\{E1, E2\}$  y  $\{h, E1\}$ , observamos que ambas comparten el autor  $E1$ , pero no están las dos contenidas en un mismo triángulo, pues solo  $\{E1, E2\}$  está contenida en el triángulo  $\{E1, E2, E3\}$ .  $\{E1, E2\}$  y  $\{h, E1\}$  son adyacentes por abajo pero no lo son por arriba.

A partir de las dos definiciones de adyacencia entre dos  $q$ -símplices  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  de un complejo simplicial  $K$ , y motivados por el estudio de redes de interacción de proteínas, Ernesto Estrada y Grant J. Ross introducen en [9] la noción de adyacencia general, que nos va a permitir representar esta relación entre símplices de igual dimensión y que pueden compararse en caras de dimensión una más o una menos.

**Definición 3.11.** Dos  $q$ -símplices  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  de un complejo simplicial  $K$  se dice que son **adyacentes** si son adyacentes por abajo pero no lo son por arriba.

$$\sigma_1 \sim_A \sigma_2 \iff \sigma_1 \sim_L \sigma_2 \text{ y } \sigma_1 \not\sim_U \sigma_2 \quad (3.5)$$

**Ejemplo 5.** Para ver gráficamente esta adyacencia general que acabamos de definir, nos fijamos en la Figura 3.3, en la que tenemos dos ejemplos de  $q$ -símplices adyacentes:

1. Caso  $q = 1$ : en la figura de la izquierda,  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son dos aristas (1-símplices) adyacentes por abajo, pues comparten un vértice (0-símplice), pero no están ambas contenidas en un mismo triángulo (2-símplice). Por lo tanto,  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son adyacentes,  $\sigma_1 \sim_A \sigma_2$ .
2. Caso  $q = 2$ : en la figura de la derecha  $\sigma_3$  y  $\sigma_4$  son dos triángulos que comparten la arista intersección, por lo que son adyacentes por abajo. Sin embargo, no existe ningún tetraedro que los contenga a los dos, por lo que no son adyacentes por arriba. Concluimos entonces que  $\sigma_3 \sim_A \sigma_4$ .

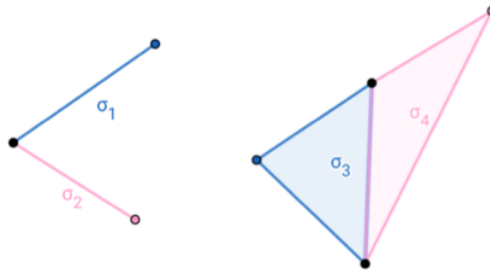


Figura 3.3: Adyacencia general

### 3.3. Adyacencia de orden superior y grado simplicial

La noción de adyacencia superior que acabamos de ver, se puede generalizar en el siguiente sentido. Por ejemplo, un vértice (caso  $q = 0$ ), además de estar contenido en una arista puede ser incidente a un triángulo. Esta idea de "**grado de vértice con respecto a triángulos**" (véase [20]), es el número de triángulos conectados a un vértice. Veámoslo de otra forma utilizando la terminología de [24].

Dado un complejo simplicial  $K$  y un 0-símplice de  $K$ ,  $v$ , definiremos el "**grado de  $v$  con respecto a triángulos**" como:

$$deg_U^{(2,2)}(v) = \#\{2\text{-símplices a los que pertenece } v\} \quad (3.6)$$

Si ahora en vez de tener en cuenta los triángulos a los que  $v$  es incidente tenemos en cuenta los  $h$ -símplices definiremos el "**grado de vértice con respecto a  $h$ -símplices**" como:

$$deg_U^{(h,h)}(v) = \#\{h\text{-símplices a los que pertenece } v\} \quad (3.7)$$

y tomando un  $q$ -símplice de  $K$  en vez de tomar  $q = 0$  el "**grado de un  $q$ -símplice  $\sigma^{(q)}$  con respecto a  $(q + h)$ -símplices**" será

$$deg_U^{(h,q+h)}(\sigma^{(q)}) = \#\{(q+h)\text{-símplices a los que pertenece } \sigma^{(q)}\} \quad (3.8)$$

Igualmente podemos definir el **grado de facetas**:

**Definición 3.12.** Definiremos el **grado de facetas** de un  $q$ -símplice como el número de facetas que contienen a dicho  $q$ -símplice.

$$grado\ facetas(\sigma^{(q)}) = \#\{facetas\ a\ las\ que\ pertenece\ \sigma^{(q)}\} \quad (3.9)$$

**Ejemplo 6.** En la Figura 3.4 tenemos tres complejos simpliciales. Vamos a estudiar los diferentes grados que acabamos de definir:

1. En la figura (a) tenemos un tetraedro en el que está señalado un 0-símplice  $v$ . Por una parte, es claro que  $deg_U^{(1,1)}(v) = deg(v) = 3$ , pues es el número de aristas a las que pertenece  $v$ . Por otra parte, el **grado de  $v$  con respecto a triángulos** es el número de triángulos con los que  $v$  es incidente;  $v$  es incidente con tres de las cuatro 2-caras (triángulos) del tetraedro, luego  $deg_U^{(2,2)}(v) = 3$ . Por último,  $v$  pertenece a la única faceta que hay en la figura, el tetraedro, con lo que  $grado\ facetas(v) = 1$ .
2. En la figura (b) tenemos un complejo simplicial con dos facetas, que son los dos tetraedros (3-símplices) que comparten el vértice (0-símplice) llamado  $v$ . De nuevo  $deg_U^{(1,1)}(v) = deg(v) = 3 + 3 = 6$ . El **grado de  $v$  con respecto a 3-símplices** en el complejo simplicial de la figura es el número de tetraedros a los que  $v$  pertenece, es decir,  $deg_U^{(3,3)}(v) = 2$ . Este grado coincide con el **grado de facetas** de  $v$ , ya que las dos facetas del complejo simplicial son tetraedros,  $grado\ facetas(v) = 2$ . Por último, el grado de  $v$  con respecto a 2-símplices (triángulos) es  $deg_U^{(2,2)}(v) = 3 + 3 = 6$ .
3. Para finalizar el ejemplo, la figura (c) es un complejo simplicial cuyas facetas son dos tetraedros (3-símplices) que comparten una arista a la que hemos llamado  $\sigma$ . Así, el **grado del 1-símplice  $\sigma$  con respecto a 3-símplices** será  $deg_U^{(2,3)}(\sigma) = 2$ , y coincide con el **grado de facetas** de  $\sigma$ .

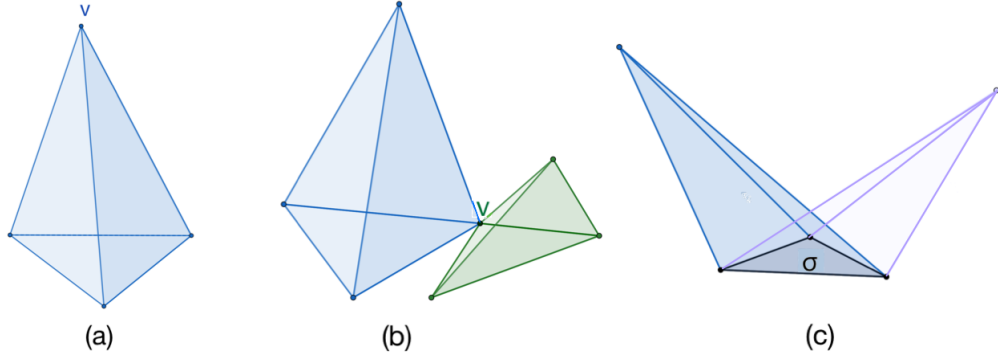


Figura 3.4: Diferentes grados

**Proposición 3.3.1.** Si  $\sigma^{(q')}$  es una faceta tal que  $\sigma^{(q)} \subset \sigma^{(q')} \implies deg_U^{(h, q+h)}(\sigma^{(q)}) = \binom{q'-q}{h} \forall h \leq q' - q$ .

*Demostración.* Por definición, sabemos que  $deg_U^{(h, q+h)}(\sigma^{(q)})$  es el número de  $(q+h)$ -símplices en los que está contenido  $\sigma^{(q)}$ .

Sea  $\tau^{(q+h)}$  un  $(q+h)$ -símplice que contiene a  $\sigma^{(q)}$ .  $\tau^{(q+h)}$  tiene  $q+h+1$  puntos, y es claro que  $q+1$  de esos puntos son los propios puntos de  $\sigma^{(q)}$ , luego solo nos quedarían por determinar los  $h$  puntos restantes.

Supongamos que la faceta del complejo simplicial es un  $q'$ -símplice. Como la faceta tiene  $q'+1$  puntos, tendremos que calcular las combinaciones de  $(q'+1) - (q+1) = q' - q$  de  $h$  en  $h$  elementos. Es decir, calculamos las posibles muestras de  $h$  elementos distintos que se pueden extraer de un conjunto de  $q' - q$  puntos. Esto equivale a calcular  $\binom{q'-q}{h}$  y hemos acabado la demostración.  $\square$

Veamos ahora una noción de adyacencia superior generalizada que nos va a permitir comparar símplices de la misma dimensión, pero el símplice que los contiene no tiene por qué ser solo de dimensión uno más.

**Definición 3.13.** Dos  $q$ -símplices  $\sigma_1, \sigma_2$  de un complejo simplicial  $K$  son  **$(q+h)$ -superior adyacentes** si existe un  $(q+h)$ -símplice  $\tau^{(q+h)}$  que contiene a ambos  $q$ -símplices como caras.

$$\sigma_1 \sim_{U_{q+h}} \sigma_2 \iff \exists \tau^{(q+h)} : \sigma_1, \sigma_2 \subseteq \tau^{(q+h)} \quad (3.10)$$

Hasta ahora, todas las comparaciones que hemos visto han sido entre símplices de igual dimensión. Para poder comparar símplices de dimensiones diferentes, en la siguiente sección vamos a definir y estudiar nuevas nociones de adyacencia (superior, inferior y general) para símplices y los diferentes grados simpliciales que de ellas se derivan. Estas nuevas nociones se introducen en [24] y permiten comparar símplices de distinta dimensión tanto superior como inferiormente y en caras de dimensión  $p$  arbitrarias.

### 3.3.1. Adyacencia para símplices de distintas dimensiones

Sean  $\sigma^{(q)}$  un  $q$ -símplice y  $\sigma^{(q')}$  un  $q'$ -símplice de un complejo simplicial  $K$  ( $q \neq q'$ ).

**Definición 3.14.** Diremos que  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  son **p-superior adyacentes** si existe un p-símplice  $\tau^{(p)}$  que contiene ambos símlices  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  como caras:

$$\sigma^{(q)} \sim_{U_p} \sigma^{(q')} \iff \exists \tau^{(p)} : \sigma^{(q)} \subseteq \tau^{(p)} \text{ y } \sigma^{(q')} \subseteq \tau^{(p)} \quad (3.11)$$

Diremos que  $\sigma^{(q)}$  un q-símplice y  $\sigma^{(q')}$  son **estrictamente p-superior adyacentes, p\*-superior adyacentes**, si  $\sigma^{(q)} \sim_{U_p} \sigma^{(q')}$  y  $\sigma^{(q)} \not\sim_{U_{p+1}} \sigma^{(q')}$ ; es decir, si son p-superior adyacentes pero no son (p+1)-superior adyacentes. Por tanto, si dos símlices son estrictamente p-superior adyacentes existirá un p-símplice que contenga a ambos símlices, pero no habrá un símplice de dimensión mayor que p que los contenga.

**Definición 3.15.** Diremos que  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  son **p-inferior adyacentes** si existe un p-símplice  $\tau^{(p)}$  que es una cara común de  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$ :

$$\sigma^{(q)} \sim_{L_p} \sigma^{(q')} \iff \exists \tau^{(p)} : \tau^{(p)} \subseteq \sigma^{(q)} \text{ y } \tau^{(p)} \subseteq \sigma^{(q')} \quad (3.12)$$

Es claro que si  $\sigma^{(q)} \sim_{L_p} \sigma^{(q')}$ , entonces  $\sigma^{(q)} \sim_{L_{p'}} \sigma^{(q')} \forall 0 \leq p' \leq p$ . Diremos que  $\sigma^{(q)}$  un q-símplice y  $\sigma^{(q')}$  son **estrictamente p-inferior adyacentes, p\*-inferior adyacentes**, si  $\sigma^{(q)} \sim_{L_p} \sigma^{(q')}$  y  $\sigma^{(q)} \not\sim_{L_{p+1}} \sigma^{(q')}$ ; es decir, si son p-inferior adyacentes pero no son (p+1)-inferior adyacentes. Si dos símlices son p\*-inferior adyacentes, el símplice de mayor dimensión contenido en ambos será de dimensión p.

**Observación 3.3.1.** 1. Si  $q = q'$  y  $p = q+1$  (resp.  $p=q-1$ ), se recuperan las definiciones 3.6 y 3.7.

2. Si  $q = q'$  y  $p = q + h$  la Definición 3.14 recupera la Definición 3.13.

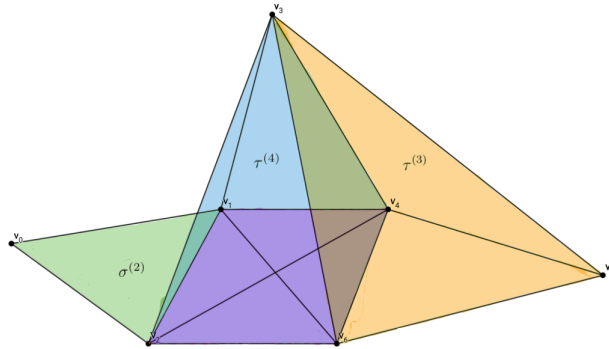


Figura 3.5: Adyacencias superior e inferior para símlices de dimensiones distintas

**Ejemplo 7.** Fijándonos en el complejo simplicial de la Figura 3.5, vamos a comparar  $\tau^{(4)}$  con las otras dos facetas del complejo simplicial.

1. Comparando  $\tau^{(4)}$  con  $\sigma^{(2)}$  observamos que comparten la arista  $\{v_1, v_2\}$  y también comparten los 0-símlices  $v_1$  y  $v_2$ . Concluimos entonces que  $\tau^{(4)} \sim_{L_1} \sigma^{(2)}$  y  $\tau^{(4)} \sim_{L_0} \sigma^{(2)}$ . Sin embargo, no existe ningún p-símplice de manera que contenga a ambos q-símlices como caras, luego  $\tau^{(4)} \not\sim_{U_p} \sigma^{(2)}$  para ningún p.

2. Análogamente, si comparamos  $\tau^{(4)}$  y  $\tau^{(3)}$ , observamos que comparten un 2-símplice  $\{v_3, v_4, v_6\}$ , los tres 1-símplices que forman dicho triángulo y los tres 0-símplices  $v_2, v_3, v_4$ . Podemos decir entonces que  $\tau^{(4)} \sim_{L_0} \tau^{(3)}$ ,  $\tau^{(4)} \sim_{L_1} \tau^{(3)}$  y  $\tau^{(4)} \sim_{L_2} \tau^{(3)}$ , y como no existe ningún 3-símplice que sea cara de ambos,  $\tau^{(4)}$  y  $\tau^{(3)}$  son 2\*-inferior adyacentes. De nuevo, no existe ningún p-símplice de manera que contenga a  $\tau^{(4)}$  y  $\tau^{(3)}$  como caras, luego  $\tau^{(4)} \not\sim_{U_p} \tau^{(3)}$  para ningún p.

Sabemos por la Proposición 3.2.1 que cuando comparamos símplices de la misma dimensión en una dimensión más o una menos la adyacencia superior implica la adyacencia inferior. Sin embargo, esto no ocurre al comparar en caras de dimensión p arbitrarias ni al comparar símplices de distintas dimensiones. Para demostrarlo, basta con ver un contraejemplo para cada caso:

**Para símplices de distinta dimensión:** en (a) observamos que el vértice  $v$  y la arista  $\sigma$  están ambos contenidos en el mismo 2-símplice (triángulo), por lo que  $v \sim_{U_2} \sigma$ . Sin embargo,  $v \not\sim_{L_0} \sigma$ , pues no comparten ningún vértice. Vemos por tanto que la adyacencia 2-superior no implica la adyacencia 0-inferior.

**Para símplices con la misma dimensión en caras de dimensión arbitrarias:** en (b) observamos un tetraedro en el que hemos señalado dos aristas  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$ . Como ambas están contenidas en el tetraedro, es claro que  $\sigma_1 \sim_{U_3} \sigma_2$ . En cambio,  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  no comparten ningún vértice, con lo que concluimos que  $\sigma_1 \not\sim_{L_0} \sigma_2$ . La adyacencia 3-superior no implica la adyacencia 0-inferior.

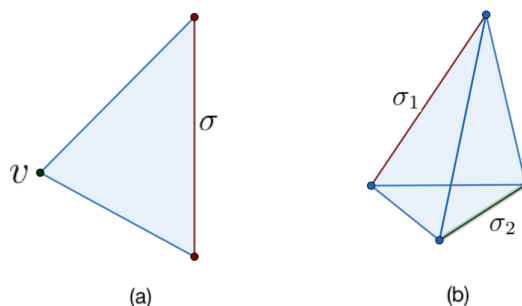


Figura 3.6: Contraejemplos

Aunque, en general, ya no es cierto que la p-adyacencia superior implica la p'-adyacencia inferior, sí se verifican algunas propiedades que vamos a demostrar a continuación.

**Lema 3.3.1.** Si  $h \geq 0$  y  $\sigma^{(q)} \sim_{U_{q+h}} \sigma^{(q+h)}$ , entonces  $\sigma^{(q)}$  es cara de  $\sigma^{(q+h)}$  y por tanto  $\sigma^{(q)} \sim_{L_q} \sigma^{(q+h)}$ .

*Demostración.* Supongamos que  $\sigma^{(q)} \sim_{U_{q+h}} \sigma^{(q+h)}$ . Sabemos entonces que existe un  $(q+h)$ -símplice  $\tau^{(q+h)}$  que contiene ambos símplices como caras,  $\sigma^{(q)} \subseteq \tau^{(q+h)}$  y  $\sigma^{(q+h)} \subseteq \tau^{(q+h)}$ . Por dimensiones, es claro que  $\sigma^{(q+h)} = \tau^{(q+h)}$ , con lo que concluimos que  $\sigma^{(q)}$  es cara de  $\sigma^{(q+h)}$ , pues  $\sigma^{(q)} \subseteq \sigma^{(q+h)}$ .  $\sigma^{(q)}$  es por tanto un q-símplice contenido tanto en  $\sigma^{(q)}$  (es él mismo) como en  $\sigma^{(q+h)}$ , luego  $\sigma^{(q)} \sim_{L_q} \sigma^{(q+h)}$  y hemos acabado la demostración.  $\square$

**Lema 3.3.2.** Si  $\sigma^{(q)} \sim_{U_{q+h}} \sigma^{(q')}$  con  $q \geq q' \geq h$ , entonces  $\sigma^{(q)} \sim_{L_{q'-h}} \sigma^{(q')}$ .

*Demostración.* Supongamos que  $\sigma^{(q)} \sim_{U_{q+h}} \sigma^{(q')}$ . Existirá un  $(q+h)$ -símplice  $\tau^{(q+h)}$  de manera que  $\sigma^{(q)} \subseteq \tau^{(q+h)}$  y  $\sigma^{(q')} \subseteq \tau^{(q+h)}$ . Así,  $\sigma^{(q)} \cup \sigma^{(q')} \subseteq \tau^{(q+h)}$ .

Como  $\sigma^{(q)} \cup \sigma^{(q')} \subseteq \tau^{(q+h)}$  y  $q' \geq h$ ,  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  tendrán que compartir un determinado número de puntos.  $\sigma^{(q)} \cup \sigma^{(q')}$  será entonces un símplexe formado por  $q + q' + 2 - \#\{\text{puntos comunes a } \sigma^{(q)} \text{ y } \sigma^{(q')}\} = n$  puntos; es decir, un  $(n-1)$ -símplice. Denotemos  $\tau^{(n-1)} = \sigma^{(q)} \cup \sigma^{(q')}$ .

Como  $\tau^{(n-1)} = \sigma^{(q)} \cup \sigma^{(q')} \subseteq \tau^{(q+h)}$ ,  $\tau^{(q+h)}$  tendrá  $n + C$  puntos, siendo  $C \geq 0$ , con lo que tenemos:

$$q + h + 1 = n + C = q + q' + 2 - \#\{\text{puntos comunes a } \sigma^{(q)} \text{ y } \sigma^{(q')}\} + C \quad (3.13)$$

Despejando, obtenemos que  $q' - h + 1 + C = \#\{\text{puntos comunes a } \sigma^{(q)} \text{ y } \sigma^{(q')}\}$ . Es claro por tanto que el conjunto de puntos comunes a ambos símplexes tiene al menos  $q' - h + 1$  puntos, luego  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  comparten al menos  $q' - h + 1$  puntos  $\implies \exists \tau^{(q'-h)} : \tau^{(q'-h)} \subseteq \sigma^{(q)}$  y  $\tau^{(q'-h)} \subseteq \sigma^{(q')}$ . Concluimos por tanto que  $\sigma^{(q)} \sim_{L_{q'-h}} \sigma^{(q')}$ .  $\square$

Hay una segunda característica que demostramos al comparar símplexes de la misma dimensión y que **no se cumple cuando comparamos símplexes de distintas dimensiones**: la unicidad del símplexe inferior (resp. superior) común (Lemas 3.2, 3.2). Un contraejemplo claro es el que vemos en la figura (3.7): se trata de un complejo simplicial con dos triángulos en el que los dos vértices señalados son 2-superior adyacentes,  $v \sim_{U_2} v'$ , pues existe un 2-símplexe (triángulo) que contiene ambos vértices. Sin embargo, **este triángulo no es único**, aquí hay dos triángulos a los que  $v$  y  $v'$  pertenecen.

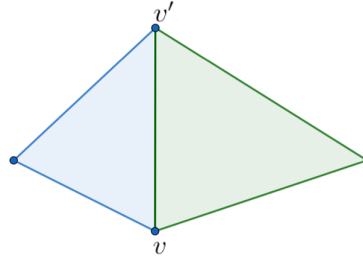


Figura 3.7: La NO unicidad del símplexe común

**Observación 3.3.2.** Otro aspecto interesante del complejo simplicial (b) de la figura 3.6 es que las dos aristas no están contenidas en un mismo triángulo, por lo que no son 2-superior adyacentes, pero **sí que son 3-superior adyacentes**, al estar ambas contenidas en el mismo tetraedro.

Vamos ahora a generalizar la adyacencia de la Definición 3.11 para símplexes de distinta dimensión y permitiendo compararlos en caras de dimensión arbitraria.

Dado que en un complejo simplicial puede ocurrir que dos símplexes no sean  $p'$ -superior adyacentes y sin embargo sí que sean  $(p'+1)$ -superior adyacentes (Observación 3.3.2), una vez sepamos que dos símplexes son adyacentes inferiormente, nos interesa saber para qué valores de  $\bar{p}$  podemos asegurar que no van a ser  $\bar{p}$ -superior adyacentes.

**Proposición 3.3.2.** *Supongamos que  $\sigma^{(q)} \sim_{L_{p^*}} \sigma^{(q')}$ ,  $p \geq 0$  y  $p' = q + q' - p$ . Si  $\sigma^{(q)} \approx_{U_{p'}} \sigma^{(q')}$ , entonces  $\sigma^{(q)} \approx_{U_{p'+h}} \sigma^{(q')} \forall h \geq 1$ .*

*Demostración.* Vamos a demostrarlo por reducción a lo absurdo.

Supongamos que  $\sigma^{(q)} \approx_{U_{p'}} \sigma^{(q')}$  y que  $\sigma^{(q)} \sim_{U_{p'+h}} \sigma^{(q')}$  para algún  $h \geq 1$ . Sabemos entonces que existe un  $(p' + h)$ -símplice  $\tau^{(p'+h)}$  que contiene ambos símlices como caras,  $\sigma^{(q)} \subseteq \tau^{(p'+h)}$  y  $\sigma^{(q')} \subseteq \tau^{(p'+h)} \implies$  existe un  $(p' + h)$ -símplice  $\tau^{(p'+h)}$  tal que  $\sigma^{(q)} \cup \sigma^{(q')} \subseteq \tau^{(p'+h)}$ .

Por otra parte, como  $\sigma^{(q)} \sim_{L_{p^*}} \sigma^{(q')}$ , existe un  $p$ -símplice  $\tau^{(p)}$  tal que  $\tau^{(p)} \subseteq \sigma^{(q)}$  y  $\tau^{(p)} \subseteq \sigma^{(q')}$  y no existe un  $(p+1)$ -símplice tal que  $\tau^{(p+1)} \subseteq \sigma^{(q)}$  y  $\tau^{(p+1)} \subseteq \sigma^{(q')}$ , luego  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  compartirán exactamente  $p+1$  vértices. De ahí, sabemos que el símlice más pequeño que contiene a ambos símlices tendrá que tener  $(q+1) + (q'+1) - (p+1) = q + q' + 1 - p$  vértices (los vértices de un símlice más los del otro menos los que comparten porque están contados dos veces); es decir, será un  $p' = q + q' - p$ -símplice.

En particular, el  $(p' + h)$ -símplice  $\tau^{(p'+h)}$  que teníamos antes tendrá una  $p'$ -cara que contiene a  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  como caras, luego  $\sigma^{(q)} \sim_{U_{p'}} \sigma^{(q')}$  y llegamos a contradicción, luego hemos acabado.  $\square$

Gracias a esta proposición sabemos que si dos símlices no son  $p'$ -superiormente adyacentes (siendo  $p' = q + q' - p$ ), ya no lo serán a órdenes superiores, por lo que no estarán ambos contenidos en ningún símlice de orden superior a  $p'$ . Podemos ya introducir la nueva noción de adyacencia general dada en [24]:

**Definición 3.16.** Diremos que  $\sigma^{(q)}$  y  $\sigma^{(q')}$  son **p-adyacentes** si son  $p^*$ -inferior adyacentes y no son  $p'$ -superior adyacentes para  $p' = q + q' - p$ :

$$\sigma^{(q)} \sim_{A_p} \sigma^{(q')} \iff \sigma^{(q)} \sim_{L_{p^*}} \sigma^{(q')} \text{ y } \sigma^{(q)} \not\approx_{U_{p'}} \sigma^{(q')} \quad (3.14)$$

Para que esta definición concuerde con lo que sabemos de la teoría de grafos, diremos que **dos vértices** (0-símlices)  $v_i$  y  $v_j$  son **adyacentes** si  $v_i \sim_{U_1} v_j$ , es decir, si existe  $\tau^{(1)}$  de manera que  $v_i \subseteq_{U_1} \tau^{(1)}$  y  $v_j \subseteq_{U_1} \tau^{(1)}$ , lo que equivale a decir que existe una arista que los une.

**Definición 3.17.** Diremos que  $\sigma^{(q')}$  es **p-adyacente maximal** a  $\sigma^{(q)}$  si es  $p$ -adyacente a  $\sigma^{(q)}$  y no es una cara contenida en ningún otro símlice  $p$ -adyacente a  $\sigma^{(q)}$

$$\sigma^{(q)} \sim_{A_{p^*}} \sigma^{(q')} \iff \sigma^{(q)} \sim_{A_p} \sigma^{(q')} \text{ y } \nexists \sigma^{(q'')} / \sigma^{(q')} \subset \sigma^{(q'')} \text{ y } \sigma^{(q'')} \sim_{A_p} \sigma^{(q)} \quad (3.15)$$

**Ejemplo 8.** Veamos un ejemplo de la adyacencia general que acabamos de definir. En la Figura 3.8 tenemos un complejo simplicial con tres facetas: los tetraedros  $\tau_1^{(3)}$  y  $\tau_2^{(3)}$ , y el triángulo  $\sigma^{(2)}$ . Estudiemos qué símlices son 1-adyacentes con  $\sigma^{(2)}$ .

Dado un  $q$ -símplice  $\sigma^{(q)}$  será 1-adyacente a  $\sigma^{(2)}$  si  $\sigma^{(q)} \sim_{L_{1^*}} \sigma^{(2)}$  y  $\sigma^{(q)} \not\approx_{U_{q+1}} \sigma^{(2)}$ ; es decir, si comparten una arista y ambos están contenidos en un mismo  $(q+1)$ -símplice.

- Comenzamos con  $q = 1$ . Es claro que cualquier arista 1-inferior adyacente al triángulo  $\sigma^{(2)}$  está contenido en él, luego será también 2-superior adyacente a  $\sigma^{(2)}$ , por lo que no hay ningún 1-símplice (arista) adyacente a  $\sigma^{(2)}$ .

- Para  $q = 2$ . Un 2-símplice (triángulo)  $\tau^{(2)}$  es adyacente a  $\sigma^{(2)}$  si  $\tau^{(2)} \sim_{L_1^*} \sigma^{(2)}$  y  $\tau^{(2)} \not\sim_{U_3} \sigma^{(2)}$ . Es decir, si comparten una arista y no están ambos contenidos en un mismo tetraedro. Observamos que hay 4 triángulos, dos de  $\tau_1^{(3)}$  y otros dos de  $\tau_2^{(3)}$ , que verifican ambas condiciones, y que por tanto son 1-adyacentes (no maximales) a  $\sigma^{(2)}$ .
- Para  $q = 3$ . Un 3-símplice (tetraedro)  $\tau^{(3)}$  es adyacente a  $\sigma^{(2)}$  si  $\tau^{(3)} \sim_{L_1^*} \sigma^{(2)}$  y  $\tau^{(3)} \not\sim_{U_4} \sigma^{(2)}$ . Es claro que ambos tetraedros  $\tau_1^{(3)}$  y  $\tau_2^{(3)}$  comparten una arista con  $\sigma^{(2)}$  y no están contenidos en ningún 4-símplice, por lo que serán 1-adyacentes a  $\sigma^{(2)}$ . Además,  $\tau_1^{(3)}$  y  $\tau_2^{(3)}$  no son caras de ningún otro símple 1-adyacente a  $\sigma^{(2)}$ , luego serán 1-adyacentes maximales.

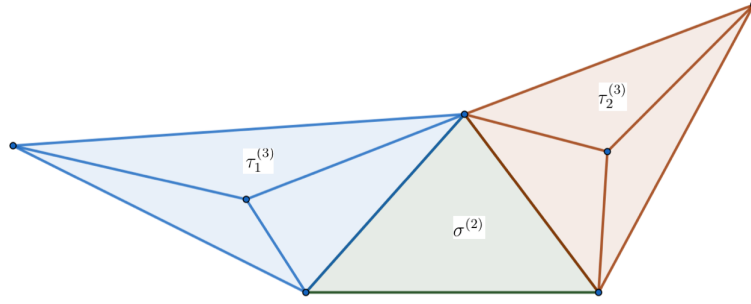


Figura 3.8: Adyacencia general para símplexes de dimensiones distintas

### 3.3.2. Grado superior generalizado de un símplex

**Definición 3.18.** Se define el **grado p-superior de un q-símplex**  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $q'$ -símplexes que son p-superior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_U^p(\sigma^{(q)})$

$$deg_U^p(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q')} : \sigma^{(q')} \sim_{U_p} \sigma^{(q)}\} \quad (3.16)$$

**Definición 3.19.** Se define el **grado p-superior estricto** de un  $q$ -símplex  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $q'$ -símplexes que son  $p^*$ -superior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_U^{p^*}(\sigma^{(q)})$

$$deg_U^{p^*}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q')} : \sigma^{(q')} \sim_{U_{p^*}} \sigma^{(q)}\} \quad (3.17)$$

**Definición 3.20.** Definimos el **grado (h,p)-superior** de un  $q$ -símplex  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $(q+h)$ -símplexes que son p-superior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_U^{h,p}(\sigma^{(q)})$

$$deg_U^{h,p}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q+h)} : \sigma^{(q+h)} \sim_{U_p} \sigma^{(q)}\} \quad (3.18)$$

**Definición 3.21.** Definimos el **grado (h,p)-superior estricto** de un  $q$ -símplex  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $(q+h)$ -símplexes que son  $p^*$ -superior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_U^{h,p^*}(\sigma^{(q)})$

$$deg_U^{h,p^*}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q+h)} : \sigma^{(q+h)} \sim_{U_{p^*}} \sigma^{(q)}\} \quad (3.19)$$

Tenemos las siguientes propiedades:



1. Si  $q = 0$ ,  $h = 1$  y  $p = q + h = 1$ , el grado (1,1)-superior de un vértice  $v$  es su grado usual:

$$deg_U^{1,1}(v) = \{\text{aristas incidentes a } v\} = deg(v) \quad (3.20)$$

- 2.

$$deg_U^p(\sigma^{(q)}) = \sum_{h=-q}^{p-q} deg_U^{h,p}(\sigma^{(q)}) \text{ y } deg_U^{p*}(\sigma^{(q)}) = \sum_{h=-q}^{p-q} deg_U^{h,p*}(\sigma^{(q)}) \quad (3.21)$$

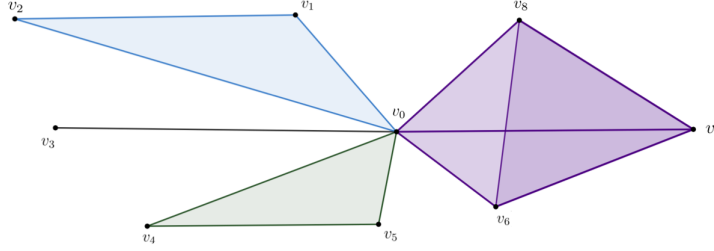


Figura 3.9: Grado superior generalizado de un  $q$ -símplice

**Ejemplo 9.** Vamos a calcular los distintos grados que acabamos de definir para la arista  $\sigma^{(1)} = \{v_0, v_8\}$  del complejo simplicial de la Figura 3.9.

- El **grado 2-superior** de  $\sigma^{(1)}$  es el número de  $q'$ -símplices 2-superior adyacentes con  $\sigma^{(1)}$ . Tomando  $q'=0$ , el número de vértices 2-superior adyacentes con  $\sigma^{(1)}$  es cuatro ( $\{v_0\}$ ,  $\{v_6\}$ ,  $\{v_7\}$ ,  $\{v_8\}$ ); para  $q'=1$  hay cuatro aristas para las que existe un triángulo que contiene a esa arista y  $\sigma^{(1)}$ ; y para  $q'=2$  hay dos triángulos que contienen a  $\sigma^{(1)}$  como cara. Sumando concluimos  $deg_U^2(\sigma^{(1)}) = 4 + 4 + 2 = 10$ .
- El **grado 2-superior estricto** de  $\sigma^{(1)}$  es el número de  $q'$ -símplices que son 2\*-superior adyacentes a  $\sigma^{(1)}$ . Todos los  $q$ -símplices 2-superior adyacentes con  $\sigma^{(1)}$  están contenidos en el tetraedro morado, luego  $deg_U^2(\sigma^{(1)}) = 0$ .
- El **grado (1,2)-superior** de  $\sigma^{(1)}$  es el número de triángulos 2-superior adyacentes a  $\sigma^{(1)}$ ; es decir, el número de triángulos en los que está contenido  $\sigma^{(1)}$ .

$$deg_U^{1,2}(\sigma^{(1)}) = \#\{\sigma^{(2)} : \sigma^{(1)} \sim_{U_2} \sigma^{(2)}\} = 2 \quad (3.22)$$

- De nuevo utilizando el argumento de (3) sabemos que  $deg_U^{1,2*}(\sigma^{(1)}) = 0$

### 3.3.3. Grado inferior generalizado de un símplice

**Definición 3.22.** Se define el **grado p-inferior** de un  $q$ -símplice  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $q'$ -símplices que son p-inferior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_L^p(\sigma^{(q)})$

$$deg_L^p(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{q'} : \sigma^{q'} \sim_{L_p} \sigma^{(q)}\} \quad (3.23)$$

**Definición 3.23.** Se define el **grado p-inferior estricto** de un q-símplice  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $q'$ -símplices que son p\*-inferior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_L^{p^*}(\sigma^{(q)})$

$$deg_L^{p^*}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{q'} : \sigma^{q'} \sim_{L_{p^*}} \sigma^{(q)}\} \quad (3.24)$$

**Definición 3.24.** Definimos el **grado (h,p)-inferior** de un q-símplice  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $(q-h)$ -símplices que son p-inferior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_L^{h,p}(\sigma^{(q)})$

$$deg_L^{h,p}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q-h)} : \sigma^{(q-h)} \sim_{L_p} \sigma^{(q)}\} \quad (3.25)$$

**Definición 3.25.** Definimos el **grado (h,p)-inferior estricto** de un q-símplice  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $(q-h)$ -símplices que son p\*-inferior adyacentes a  $\sigma^{(q)}$  y se denota por  $deg_L^{h,p^*}(\sigma^{(q)})$

$$deg_L^{h,p^*}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q-h)} : \sigma^{(q-h)} \sim_{L_{p^*}} \sigma^{(q)}\} \quad (3.26)$$

Tenemos las siguientes propiedades:

1. Si  $h = 1$  y  $p = q - h = q - 1$  tenemos,

$$deg_L^{1,q-1}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q-1)} : \sigma^{(q-1)} \sim_{L_{q-1}} \sigma^{(q)}\} = \#\{(q-1) - \text{cara de } \sigma^{(q)}\} = q + 1 \quad (3.27)$$

luego observamos que el grado (1,q-1)-inferior de un q-símplice coincide con la definición de grado inferior de un q-símplice 3.9.

2. Si  $p=q-h$  tenemos:

$$deg_L^{1,q-h}(\sigma^{(q)}) := \#\{\sigma^{(q-h)} : \sigma^{(q-h)} \sim_{L_{q-h}} \sigma^{(q)}\} = \#\{(q-h)\text{-símplices de } \sigma^{(q)}\} = \binom{q+1}{q-h+1} \quad (3.28)$$

3. De la definición es inmediato:

$$deg_L^{h,p^*}(\sigma^{(q)}) = deg_L^{h,p}(\sigma^{(q)}) - deg_L^{h,p+1}(\sigma^{(q)}) \quad (3.29)$$

- 4.

$$deg_L^p(\sigma^{(q)}) = \sum_{h=q-dimK}^{q-p} deg_L^{h,p}(\sigma^{(q)}) \text{ y } deg_L^{p^*}(\sigma^{(q)}) = \sum_{h=q-dimK}^{q-p} deg_L^{h,p^*}(\sigma^{(q)}) \quad (3.30)$$

**Ejemplo 10.** Calculemos los distintos grados que acabamos de definir para el triángulo  $\{v_0, v_4, v_5\}$  del complejo simplicial de la Figura 3.9.

- El **grado 0-inferior** de  $\sigma^{(2)}$  es el número de  $q'$ -símplices 0-inferior adyacentes con  $\sigma^{(2)}$ . Tomando  $q' = 0$ , el número de vértices 0-inferior adyacentes con  $\sigma^{(2)}$  es 3 ( $\{v_0\}, \{v_4\}, \{v_5\}$ ); para  $q' = 1$ , hay 9 aristas que comparten un vértice con  $\sigma^{(2)}$ ; para  $q' = 2$ , hay 4 triángulos que tienen un vértice común con  $\sigma^{(2)}$ ; y por último para  $q' = 3$ , el único tetraedro que hay comparte el vértice  $v_0$  con  $\sigma^{(2)}$  luego hay un 3-símplice 0-inferior adyacente con  $\sigma^{(2)}$ . Sumando nos queda  $deg_L^0(\sigma^{(2)}) = 3 + 9 + 4 + 1 = 17$ .

- El **grado 0\*-inferior** de  $\sigma^{(2)}$  es el número de  $q'$ -símplices 0\*-inferior adyacentes con  $\sigma^{(2)}$ . El único valor de  $q'$  para el que varía con respecto al grado 0-inferior es para  $q'=1$ , pues las tres aristas de  $\sigma^{(2)}$  que habíamos contado antes son también 1-inferior adyacentes con  $\sigma^{(2)}$  luego en este caso no las contamos. Así, nos quedaría  $deg_L^{0*}(\sigma^{(2)}) = 3 + 6 + 4 + 1 = 14$ .
- Tomando  $h = 1$  y  $p = 0$  tendremos  $deg_U^{1,0}(\sigma^{(2)}) = \#\{\sigma^{(1)} : \sigma^{(1)} \sim_{L_0} \sigma^{(2)}\} = 9$
- De nuevo razonando como el el segundo punto:  
 $deg_L^{1,0*}(\sigma^{(2)}) = \#\{\sigma^{(1)} : \sigma^{(1)} \sim_{L_{0*}} \sigma^{(2)}\} = 6$ .

### 3.3.4. Grado de adyacencia general y grado simplicial

Teniendo en cuenta la definición dada de adyacencia general 3.16 y 3.17, vamos a definir los grados asociados a esa definición y el grado simplicial general de un símplex.

**Definición 3.26.** Se define el **grado p-adyacente** de un  $q$ -símplex  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $q'$ -símplices que son p-adyacentes a  $\sigma^{(q)}$

$$deg_A^p(\sigma^{(q)}) = \#\{\sigma^{(q')}/\sigma^{(q)} \sim_{A_p} \sigma^{(q')}\} \quad (3.31)$$

Se define el **grado p-adyacente maximal** de un  $q$ -símplex  $\sigma^{(q)}$  como el número de  $q'$ -símplices que son p-adyacentes maximales a  $\sigma^{(q)}$

$$deg_A^{p*}(\sigma^{(q)}) = \#\{\sigma^{(q')}/\sigma^{(q)} \sim_{A_{p*}} \sigma^{(q')}\} \quad (3.32)$$

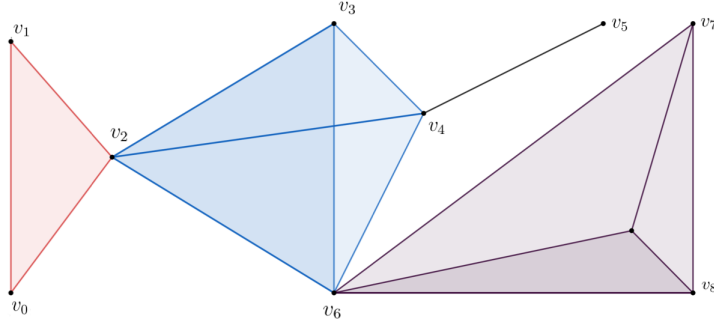


Figura 3.10: Grado de adyacencia general

**Ejemplo 11.** Calculemos el **grado 0-adyacente maximal** del 2-símplex  $\sigma^{(2)} = \{v_2, v_4, v_6\}$  del complejo simplicial que tenemos en la Figura 3.10.

Empezaremos calculando el grado 0-adyacente,  $deg_A^0(\sigma^{(2)})$ . Por definición,  $deg_A^0(\sigma^{(2)}) = \#\{\sigma^{(q')}/\sigma^{(2)} \sim_{A_0} \sigma^{(q')}\} = \#\{\sigma^{(q')}/\sigma^{(2)} \sim_{L_0^*} \sigma^{(q')} \text{ y } \sigma^{(2)} \not\sim_{U_{2+q'}} \sigma^{(q')}\}$ .

Para  $q' = 0$ , **no hay ningún vértice** 0-adyacente con  $\sigma^{(2)}$  porque los vértices que son 0-inferior adyacentes a  $\sigma^{(2)}$  son los que están contenidos en él, luego sí que son 2-superior adyacentes y no verifican por tanto la segunda condición.

Tomando  $q' = 1$ , **hay 6 aristas** que comparten un único vértice con  $\sigma^{(2)}$  (son estrictamente 0-inferior adyacentes) y no están contenidas en el tetraedro azul, que es el tetraedro que contiene a  $\sigma^{(2)}$  (no son 3-superior adyacentes).

Con  $q' = 2$  el 2-símplice (triángulo) rosa y tres de las 2-caras del tetraedro morado comparten un vértice con  $\sigma^{(2)}$  sin compartir una arista (son estrictamente 0-inferior adyacentes) y no son superior adyacentes. Es decir, hay cuatro triángulos 0-adyacentes a  $\sigma^{(2)}$ .

Por último, tomando,  $q' = 3$ , solo el tetraedro morado verifica las dos condiciones. Sumando obtenemos  $deg_A^0(\sigma^{(2)}) = 0 + 6 + 4 + 1 = 11$

Para calcular ahora el **grado 0-adyacente maximal** como queríamos, tenemos que tener en cuenta los símlices 0\*-adyacentes maximales, que serán la arista negra, el triángulo rosa y el tetraedro morado, luego  $deg_A^{0*}(\sigma^{(2)}) = 3$ .

Supongamos ahora que el complejo simplicial de la Figura 3.10 es una empresa, donde los nodos son los trabajadores y están unidos si trabajan de una manera conjunta en un proyecto. Consideremos el 2-símplice  $\sigma^{(2)} = \{v_2, v_4, v_6\}$ . Observamos que  $\sigma^{(2)}$ , además de colaborar con la arista negra por  $v_4$ , el triángulo rosa por  $v_2$  y el tetraedro morado por  $v_6$ , colabora también con el tetraedro azul en el que está contenido. Por ello, si queremos estudiar la influencia del “grupo de trabajo”  $\sigma^{(2)}$ , podemos contabilizar dicho tetraedro azul, pues es otro de los proyectos en los que participa. Esto motiva la introducción de un nuevo grado, el **grado simplicial maximal** de un q-símplice.

Así, el **grado simplicial maximal** nos dará otra forma de estudiar la “importancia que tiene un q-símplice en un complejo simplicial”. Este grado, además de tener en cuenta las facetas a las que es adyacente general un q-símplice, considera las facetas con las que colabora superiormente (como el tetraedro azul del ejemplo anterior).

**Definición 3.27.** Se define el **grado simplicial maximal** de  $\sigma^{(q)}$  como

$$deg^*(\sigma^{(q)}) = deg_A^*(\sigma^{(q)}) + deg_U^*(\sigma^{(q)}) \quad (3.33)$$

donde

$$deg_A^*(\sigma^{(q)}) = \sum_{p=0}^{q-1} deg_A^{p*}(\sigma^{(q)}) \text{ y } deg_U^*(\sigma^{(q)}) = \sum_{h=1}^{dimK-q} deg_U^{(h,(q+h)*)}(\sigma^{(q)}) \quad (3.34)$$

$deg_U^*(\sigma^{(q)})$  se denomina **grado simplicial superior maximal**

**Ejemplo 12.** Calculemos el **grado simplicial maximal** de  $\sigma^{(2)}$ . Aplicando la definición tenemos:

$$deg_A^*(\sigma^{(2)}) = deg_A^{0*}(\sigma^{(2)}) + deg_A^{1*}(\sigma^{(2)}) + deg_U^{(1,3*)}(\sigma^{(2)}) \quad (3.35)$$

Por el Ejemplo 3.10 sabemos que  $deg_A^{0*}(\sigma^{(2)}) = 3$ . Por otra parte,

$$deg_A^{1*}(\sigma^{(2)}) = \#\{\sigma^{(q)}/\sigma^{(2)} \sim_{A_1^*} \sigma^{(q)}\} = \#\{\sigma^{(q)}/\sigma^{(2)} \sim_{L_1^*} \sigma^{(q)} \text{ y } \sigma^{(2)} \approx_{U_{1+q'}} \sigma^{(q)}\} \quad (3.36)$$

No hay ningún 1-símplice que verifique que sea 1-adyacente con  $\sigma^{(2)}$  porque todos ellos están contenidos en  $\sigma^{(2)}$ , luego sí serían 2-superior adyacentes. Tampoco hay ningún 2-símplice 1-adyacente a  $\sigma^{(2)}$  porque todos los que comparten una arista con  $\sigma^{(2)}$  están contenidos en el 3-símplice. Por último, el 3-símplice azul comparte una arista con  $\sigma^{(2)}$ ,

pero también comparte un triángulo, por lo que es 2-inferior adyacente con él y por tanto tampoco nos sirve. Concluimos por tanto que  $deg_A^{1*}(\sigma^{(2)}) = 0$ .

Por último,

$$deg_U^{(1,3^*)}(\sigma^{(2)}) = \#\{\sigma^{(3^*)} : \sigma^{(2)} \sim_{U_{3^*}} \sigma^{(3)}\} = 1 \quad (3.37)$$

pues hay un único 3-símplice que contiene a  $\sigma^{(2)}$  (el azul).

Sumando,  $deg_A^*(\sigma^{(2)}) = 3 + 0 + 1 = 4$ .

# Capítulo 4

## Epidemiología en redes simpliciales

En el Capítulo 1 describimos el modelo compartimental SIS, modelo a través del cuál podemos estudiar la propagación de enfermedades infecciosas. En dicho capítulo tuvimos en cuenta únicamente los casos en los que la topología de contacto sobre la que se expande la epidemia es una red. Sin embargo, en muchas ocasiones el proceso de contagio ocurre a través de un grupo. Para modelizar este tipo de contagios representaremos la red de contactos como un complejo simplicial, en el que los símlices son los distintos grupos.

En [16] se propone un nuevo modelo compartimental del tipo SIS para el contagio social llamado **modelo de contagio simplicial** y en el que vamos a centrarnos a partir de ahora.

### 4.1. Modelo de Contagio Simplicial (MCS)

El **modelo de contagio simplicial (MCS) de orden  $D$**  está regido por  $D$  parámetros  $B = \{\beta_1, \dots, \beta_D\}$  donde  $\beta_k$  representa la probabilidad por unidad de tiempo de que un nodo susceptible  $i$  cualquiera se infecte a través de un  $k$ -símlice del que forma parte y en el que el resto de vértices están infectados.

Por ejemplo,  $\beta_1 = \beta$  es la probabilidad de que un nodo susceptible  $i$  cualquiera se infecte a través de una arista  $\{i, j\}$  en la que  $j$  es un nodo infectado. Es decir, es la tasa de infección  $\beta$  que teníamos en cuenta en el Capítulo 1 (la probabilidad de que un nodo susceptible se infecte al estar en contacto con un infectado). Veremos más adelante que el MCS de orden 1 es el modelo SIS descrito en el Capítulo 1.

En este modelo, lo nuevo son las probabilidades  $\beta_j$  con  $j \geq 2$ . Por ejemplo,  $\beta_2 = \beta_\Delta$  es la probabilidad de que un nodo susceptible  $i$  cualquiera se infecte a través de un triángulo  $\{i, j, k\}$  donde  $j$  y  $k$  están infectados. Es decir,  $i$  se infecta a través de un grupo (hay un contagio de grupo a individuo).

En la siguiente figura vemos los posibles “canales de infección” para un nodo susceptible  $i$  en el **MCS de orden  $D = 2$** . Estudiemos en cada caso cuál es la probabilidad de que el nodo  $i$  se infecte. Como bien se indica en la figura, los nodos infectados son los rojos y los susceptibles los azules.

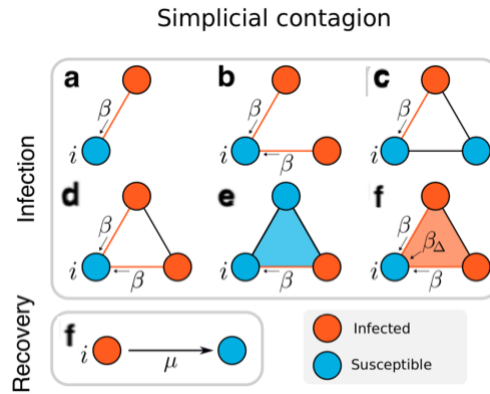


Figura 4.1: MCS de [16]

En (a) tenemos un nodo infectado y uno susceptible que están en contacto. Este caso es exactamente igual que cuando en el modelo SIS en redes: un infectado está en contacto con un susceptible, y la probabilidad de que lo contagie es  $\beta$ .

Tanto en (c) como en (e), tenemos un nodo susceptible  $i$  conectado a un nodo infectado y otro susceptible. Sin embargo, representan situaciones diferentes. En (c) los tres nodos forman un triángulo vacío y en (e) el triángulo que forman está relleno. Esto nos indica que en (e) los tres nodos están conectados dos a dos, mientras que en (g) forman un grupo común, es decir, un 2-símplice. Sin embargo, en ambos casos la probabilidad de que  $i$  se infecte será  $\beta$ , pues el nodo infectado es el único que “actúa sobre él”.

De nuevo, tanto en (b), como en (d) y en (f) tenemos dos nodos infectados y uno susceptible, y, sin embargo, representan situaciones diferentes. En (b) el nodo susceptible está conectado de manera individual con los otros dos nodos infectados. Así, cada uno de los nodos infectados contagia al nodo susceptible con probabilidad  $\beta$ . En (d), los tres nodos forman un triángulo vacío, por lo que sabemos que los tres individuos están conectados dos a dos y por tanto cada uno de los infectados contagia a  $i$  con probabilidad  $\beta$ . Por último, en f, los tres nodos forman un triángulo relleno, es decir, un 2-símplice. Como forman un 2-símplice, cada uno de los nodos infectados podrá contagiar a  $i$  con una probabilidad  $\beta$ , y, además,  $i$  podrá infectarse a través del 2-símplice con una probabilidad  $\beta_{\Delta}$ .

Por último, en (f) está representado el proceso de recuperación, en el que el nodo infectado se recupera con probabilidad  $\mu$

Veamos ahora cuál es la ecuación diferencial que utilizan en [16] para representar la variación de individuos infectados de la población con respecto al tiempo de este modelo MCS. Es decir, veamos cuál es la dinámica de contagio del MCS.

Sea  $i(t) = I(t)/N$  como en el Capítulo 2 la **densidad de los nodos infectados**, que es en realidad la fracción de nodos infectados, y  $s(t)$  la fracción de nodos susceptibles. Recordemos que como  $i(t) + s(t) = 1$ , entonces  $1 - i(t)$  es la fracción de nodos susceptibles  $s(t)$ .

Denotaremos al **grado de un vértice  $v$  con respecto a  $h$ -símplices** visto en el Capítulo 3 por  $k_h(v) = deg_V^{(h,h)}(v)$ , que recordemos es el número de  $h$ -símplices a los que pertenece  $v$  (Definición (3.6)). Para cada  $h$ ,  $\langle k_h \rangle$  será la media del  $k_h$  de todos los nodos de la red.

Asumiendo la **hipótesis de mezcla homogénea** y teniendo en cuenta además que las probabilidades de infección  $\{\beta_1, \dots, \beta_2\}$  y la probabilidad de recuperación  $\mu$ , en [16] proponen la siguiente aproximación del MCS para describir la variación de nodos infectados por instante de tiempo:

$$\frac{di}{dt} = -\mu i + \sum_{h=1}^D \beta_h \langle k_h \rangle i^h (1-i) \quad (4.1)$$

**Observación 4.1.1.** Nótese que  $i = i(t)$ .

Es claro que para  $D = 1$  la Ecuación (4.1) coincide con la dada para el modelo SIS sobre redes (Ecuación (2.6)).

Para estudiar los posibles resultados del MCS de manera cómoda nos centraremos en el caso de  $D = 2$ ; es decir, en los complejos simpliciales sobre los que actúa el MCS únicamente aparecerán 1-símplices (aristas) y 2-símplices (triángulos). En ese caso la ecuación (4.1) nos queda:

$$\frac{di}{dt} = -\mu i + \beta_1 \langle k_1 \rangle i(1-i) + \beta_2 \langle k_2 \rangle i^2(1-i) \quad (4.2)$$

Definiendo los valores  $\lambda = \beta_1 \langle k_1 \rangle / \mu$  (que es esencialmente el **número reproductivo básico**) y  $\lambda_\Delta = \beta_2 \langle k_\Delta \rangle / \mu$ , sustituyendo y reescalando por  $\mu$  obtenemos:

$$\frac{di}{dt} = -i(1 - \lambda(1-i) - \lambda_\Delta i(1-i)) \implies \frac{di}{dt} = -i(i - i_{2+}^*)(i - i_{2-}^*) \quad (4.3)$$

siendo  $i_{2+}^*$  y  $i_{2-}^*$  soluciones de la ecuación de segundo grado  $\lambda_\Delta i^2 + (\lambda - \lambda_\Delta)i + (1 - \lambda) = 0$  ( $1 - \lambda(1-i) - \lambda_\Delta i(1-i) = \lambda_\Delta i^2 + (\lambda - \lambda_\Delta)i + (1 - \lambda)$ ). Las soluciones de  $\frac{di}{dt} = 0$  son por lo tanto:

$$i_1^* = 0, \quad i_{2+}^* = \frac{\lambda_\Delta - \lambda + \sqrt{(\lambda - \lambda_\Delta)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda)}}{2\lambda_\Delta} \quad \text{y} \quad i_{2-}^* = \frac{\lambda_\Delta - \lambda - \sqrt{(\lambda - \lambda_\Delta)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda)}}{2\lambda_\Delta}$$

La solución  $i_1^* = 0$  corresponde al **estado de libre infección**, en el que toda el mundo se recupera y finalmente no hay nadie infectado. A continuación vamos a ver qué valor toma  $i$  según los valores de  $\lambda$  y  $\lambda_\Delta$ . Como  $i$  representa la fracción de infectados, es claro que tiene que ser un valor real y  $0 \leq i \leq 1$ , de manera que cuando  $i = 0$  no hay nadie infectado, y cuando  $i = 1$  toda la población está infectada. Dividiremos primero en dos casos,  $\lambda_\Delta \leq 1$  y  $\lambda_\Delta > 1$ .

- Para  $\lambda = 1$ , sustituyendo obtenemos que  $i_{2+}^* = 0$  y  $i_{2-}^* > 0$ .
- $\lambda_\Delta \leq 1$ .
- $0 \leq \lambda < 1$

A su vez, puede ocurrir bien que  $0 \leq \lambda < \lambda_\Delta \leq 1$ , o bien que  $0 \leq \lambda_\Delta \leq 1$ :

1. Para  $0 \leq \lambda < \lambda_\Delta \leq 1$ , el discriminante  $(\lambda - \lambda_\Delta)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda) < 0$ , luego  $i_{2+}^*$  y  $i_{2-}^*$  son imaginarios.



2. Para  $0 \leq \lambda_\Delta \leq \lambda < 1$ , tenemos que  $\lambda_\Delta - \lambda \leq 0$ , con lo que es claro que, en el caso de que  $i_{2-}^*$  sea un valor real,  $i_{2-}^* < 0$ . Por su parte, utilizando otra vez que  $\lambda_\Delta - \lambda < 0$ , tendremos que

$$i_{2+}^* > 0 \iff \sqrt{(\lambda - \lambda_\Delta)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda)} > \lambda_\Delta - \lambda \iff -4\lambda_\Delta(1 - \lambda) > 0$$

y como  $1 - \lambda < 0$  y  $\lambda_\Delta > 0$ , sabemos que  $-4\lambda_\Delta(1 - \lambda) < 0$  y concluimos que  $i_{2+}^* < 0$ .

Como hemos obtenido que tanto  $i_{2-}$  como  $i_{2+}$  son, o bien valores no reales, o bien valores reales negativos, no son soluciones válidas (recordemos que  $i \geq 0$ ) y por lo tanto para  $0 \leq \lambda < 1$  la única solución posible es  $i_1^* = 0$ .

- $\lambda > 1$  ( $\lambda > 1 \geq \lambda_\Delta$ )

Como  $\lambda > \lambda_\Delta$ , es claro que  $\lambda_\Delta - \lambda < 0$ , con lo que, en el caso de que sea real,  $i_{2-}^* < 0$  (no es solución válida). Por otra parte, de nuevo por  $\lambda_\Delta - \lambda < 0$ , sabemos que

$$i_{2+}^* > 0 \iff \sqrt{(\lambda - \lambda_\Delta)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda)} > \lambda_\Delta - \lambda \iff -4\lambda_\Delta(1 - \lambda) > 0$$

y como en este caso  $1 - \lambda < 0$  (y  $\lambda_\Delta > 0$ ) concluimos que, en efecto,  $i_{2+}^* > 0$ .

- $\lambda = 1$  ( $\lambda_\Delta < \lambda = 1$ )

En este caso, sustituyendo obtenemos que  $i_{2+}^* = 0$ . Con respecto a  $i_{2+}^*$ , como  $\lambda_\Delta - \lambda < 0$ , tenemos que  $i_{2+} > 0 \iff \sqrt{(1 - \lambda)^2} > \lambda_\Delta - 1$ , y puesto que  $1 - \lambda$  es positivo y  $\lambda_\Delta - 1$  es negativo, concluimos que  $i_{2+}^* > 0$ .

Sabemos entonces que para  $\lambda_\Delta \leq 1$ , si  $\lambda \leq 1$  la epidemia siempre converge al estado libre de infección, pues la única solución posible es  $i_1^* = 0$ . Si por el contrario  $\lambda > 1$ , tenemos que  $i_{2+}^* > 0$ , luego la pandemia converge a un estado endémico. Así, **podemos concluir que para  $\lambda_\Delta \leq 1$  el MCS se comporta de manera análoga al modelo SIS estándar.**

## ■ $\lambda_\Delta > 1$

Estudiemos ahora este segundo caso. Como antes, dividiremos en distintos subcasos.

- $\lambda > 1$

Para este valor de  $\lambda$  el discriminante  $D = (\lambda - \lambda_\Delta)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda)$  es siempre positivo, con lo que sabemos que tanto  $i_{2-}^*$  como  $i_{2+}^*$  serán valores reales. Dividiremos a su vez en dos subcasos:

1.  $\lambda_\Delta > \lambda > 1$

○ Como  $\lambda_\Delta - \lambda > 0$ ,

$$i_{2+}^* > 0 \iff \lambda_\Delta - \lambda > -\sqrt{D}$$

y por tanto concluimos que  $i_{2+}^* > 0$  (pues  $\lambda_\Delta - \lambda$  es positivo y  $-\sqrt{D}$  es negativo).

o Para el caso de  $i_{2-}^*$ , utilizando de nuevo  $\lambda_\Delta - \lambda > 0$ ,

$$i_{2-}^* > 0 \iff \lambda_\Delta - \lambda > \sqrt{D} \iff -4\lambda_\Delta(1 - \lambda) < 0$$

y como  $\lambda_\Delta > 0$  y  $1 - \lambda < 0$ , nos queda  $-4\lambda_\Delta(1 - \lambda) > 0$ . Con ello concluimos que  $i_{2-}^* < 0$ .

2.  $\lambda > \lambda_\Delta > 1$

o Ahora tenemos que  $\lambda_\Delta - \lambda < 0$ . Así,

$$i_{2+}^* > 0 \iff \sqrt{D} > \lambda_\Delta - \lambda \iff -4\lambda_\Delta(1 - \lambda) > 0$$

y como  $\lambda_\Delta > 0$  y  $1 - \lambda < 0$  concluimos que en efecto  $i_{2+}^* > 0$ .

o Como  $\lambda_\Delta - \lambda < 0$ , es claro que  $i_{2-}^* < 0$ .

Podemos asegurar entonces que para  $\lambda > 1$  obtenemos  $i_{2-}^* < 0 < i_{2+}^*$ .

•  **$\lambda < 1$**

Lo primero que vamos a ver son los valores para los cuales  $i_{2-}^*$  y  $i_{2+}^*$  son valores reales. Para ello veremos para qué valores el discriminante  $D$  es mayor que 0.

$$\begin{aligned} (\lambda - \lambda_\Delta)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda) > 0 &\iff (\lambda + \lambda_\Delta)^2 > 4\lambda_\Delta \iff \quad (4.4) \\ &\iff \lambda + \lambda_\Delta > 2\sqrt{\lambda_\Delta} \text{ o bien } \lambda + \lambda_\Delta > -2\sqrt{\lambda_\Delta} \end{aligned}$$

y como sabemos que  $\lambda + \lambda_\Delta > 1$ , obtenemos que  $i_{2+}^*$  y  $i_{2-}^*$  son reales si y solo si  $\lambda > -\lambda_\Delta + 2\sqrt{\lambda_\Delta}$ . Denotaremos por  $\lambda^c = -\lambda_\Delta + 2\sqrt{\lambda_\Delta}$ . Se verifica que  $\lambda^c < 1$ , pues,

$$\begin{aligned} \lambda^c < 1 &\iff -\lambda_\Delta + 2\sqrt{\lambda_\Delta} < 1 \iff 2\sqrt{\lambda_\Delta} < 1 + \lambda_\Delta \iff \\ &\iff 4\lambda_\Delta < 1 + \lambda_\Delta^2 + 2\lambda_\Delta \iff (\lambda_\Delta - 1)^2 > 0 \end{aligned}$$

donde hemos utilizado que  $\lambda_\Delta > 1$  en el tercer si y solo si. Teniéndolo en cuenta, distinguiremos dos casos:

1.  $\lambda < \lambda^c$ . En este caso  $i_{2-}^*$  y  $i_{2+}^*$  son valores imaginarios, y por tanto la única solución posible es  $i_1^* = 0$ .
2.  $\lambda^c < \lambda$  ( $\lambda^c < \lambda < 1 < \lambda_\Delta$ ). En este caso sabemos que  $i_{2-}^*$  y  $i_{2+}^*$  son valores reales.
  - o Como  $\lambda_\Delta - \lambda > 0$ , es claro que  $i_{2+}^* > 0$
  - o Para  $i_{2-}^*$  tenemos

$$i_{2-}^* > 0 \iff \lambda_\Delta - \lambda > \sqrt{(\lambda_\Delta - \lambda)^2 - 4\lambda_\Delta(1 - \lambda)} \iff -4\lambda_\Delta(1 - \lambda) < 0$$

y al ser  $\lambda_\Delta > 0$  y  $1 - \lambda > 0$ , concluimos que en efecto  $i_{2-}^* > 0$ .

Podemos entonces afirmar que en este caso  $0 < i_{2-}^* < i_{2+}^*$ .

Resumiendo entonces el caso de  $\lambda_\Delta > 1$ , tenemos que si  $\lambda > 1$ , la epidemia converge a un estado endémico, puesto que  $i_{2+}^* > 0$ . En cambio, si  $\lambda < 1$ , obtenemos que la epidemia converge a un estado libre de infección si  $\lambda < \lambda^c$ , y si por el contrario  $\lambda^c < \lambda < 1$  el estado final de la pandemia no es siempre la misma. Así, la región en la que  $\lambda^c < \lambda < 1$  es una región biestable, dado que **los estados libre de infección y endémico coexisten**. Comprobaremos con simulaciones sobre redes empíricas a lo largo del capítulo que, en esta región, el estado al que converge la pandemia depende de la fracción inicial de nodos infectados  $i_0$ .

La existencia de una región biestable es algo totalmente **novedoso** que no ocurría en el modelo SIS sobre redes de grafos. Al estudiar el modelo SIS en redes aleatorias (Sección 2.1) definimos el parámetro  $\lambda = \beta \langle k \rangle / \mu$ . Vimos que si  $\lambda \leq 1$  la pandemia converge a un estado libre de enfermedad, en el que todo el mundo se recupera y la enfermedad se extingue. Si por el contrario  $\lambda > 1$ , la epidemia alcanza un estado endémico, con  $i(t \rightarrow \infty) > 0$ . Como acabamos de ver, en el caso de las redes simpliciales la pandemia no está determinada por un solo parámetro como en el modelo SIS estándar, sino que hay dos parámetros  $\lambda$  y  $\lambda_\Delta$  que decretan qué es lo que ocurre. En el siguiente diagrama bidimensional están representadas las conclusiones del estudio que acabamos de hacer:

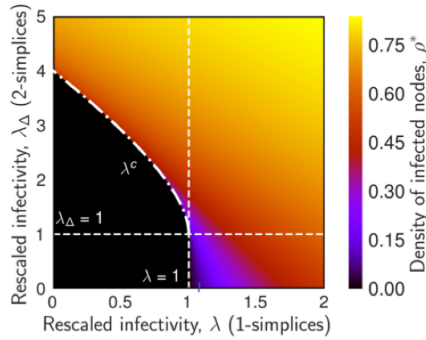


Figura 4.2: Diagrama bidimensional del MCS de orden D=2 (de [16])

En dicho diagrama, el eje horizontal nos indica los valores que toma la variable  $\lambda$  y el eje vertical los que toma  $\lambda_\Delta$ . Están representadas las rectas  $\lambda = 1$  y  $\lambda_\Delta = 1$ , y la parábola  $\lambda = \lambda^c$ , que nos van a determinar el estado final de la epidemia. Por otra parte, la convergencia de la epidemia en el diagrama bidimensional está representada por colores. Los colores claros corresponden a los valores más altos de la densidad estacionaria de nodos infecciosos (estado estacionario), mientras que el color negro nos indica que la densidad estacionaria de nodos infectados es 0, por lo que toda la población se recupera y hay un estado de libre infección.

Hay tres regiones principales. La primera es la región en la que  $\lambda > 1$ , que corresponde con la parte de la derecha de la recta  $\lambda = 1$ , y en la cuál la epidemia converge a un estado estacionario. La segunda región que hay que tener en cuenta es en la que  $\lambda < 1$  y  $\lambda < \lambda^c$ , en la cuál la epidemia converge a un estado libre de infección y corresponde con la parte de la izquierda de la recta  $\lambda = 1$  y que además es inferior a la parábola  $\lambda = \lambda^c$ . Por último, para  $\lambda < 1$  y  $\lambda > \lambda^c$  hay una región de biestabilidad, donde el estado final de la epidemia depende de la fracción inicial de nodos infectados  $i_0$ .

## 4.2. Runge Kutta de orden 2 para la ecuación diferencial del MCS

En numerosas ocasiones se pueden resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias (e.d.o) utilizando métodos numéricos. Por ejemplo, los métodos **Runge-Kutta** son métodos numéricos unipaso que nos permiten aproximar las soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias.

En la sección anterior estudiamos las soluciones de la ecuación (4.2). Vamos a ilustrar ahora la evolución temporal de la densidad de nodos infectados  $i(t)$ . Para ello, resolveremos primero la ecuación diferencial de primer orden (4.2) utilizando el **método Runge-Kutta de orden 2** (RK2) que he programado en *Mathematica*, y a continuación representaremos dicha solución para distintos valores de  $\lambda$ ,  $\lambda_\Delta$  y  $i_0 = i(0)$ .

Dado un problema de valor inicial del tipo

$$i' = f(t, i), \quad i(t_0) = i_0 \text{ donde } f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

el **método general de Runge-Kutta de orden 2 (RK2)** está definido por las siguientes ecuaciones:

$$i_{n+1} = i_n + h\left(\frac{1}{2}m_1 + \frac{1}{2}m_2\right) \quad (4.5)$$

$$m_1 = f(t_n, i_n) \quad (4.6)$$

$$m_2 = f(t_n + h, i_n + hm_1) \quad (4.7)$$

En nuestro caso  $f(t, i) = -\mu i + \beta_1 < k_1 > i(1 - i) + \beta_2 < k_2 > i^2(1 - i)$ . El método RK2 nos dará un conjunto discreto de puntos  $(t_n, i_n)$  donde la  $t$  representa el tiempo, que va desde  $t_0$  (tiempo inicial) hasta  $t_f$  (tiempo final), y la  $i$  la fracción de infectados. Este conjunto de puntos describirán una trayectoria que aproxima la solución  $i(t)$  de la ecuación diferencial (4.2).

Tendremos entonces que definir: las tasas de infección  $\lambda$  y  $\lambda_\Delta$ , el tiempo inicial  $t_0$ , el tiempo final  $t_f$ , la fracción inicial de nodos infectados  $0 \leq i_0 \leq 1$ , el ancho del intervalo del tiempo  $h$ , el número de interacciones  $N_i$  (que tendrá que ser entero) y por supuesto la función  $f(t, i)$ . Además, definiremos una lista vacía de a la que le iremos añadiendo los puntos obtenidos. Así, una vez fijados los valores de  $\lambda$ ,  $\lambda_\Delta$ ,  $t_0$ ,  $t_f$ ,  $i_0$ ,  $h$  y  $N_i = \text{IntegerPart}\left[\frac{t_f - t_0}{h}\right]$  (toma la parte entera), el pseudocódigo del método RK2 para resolver la ecuación 4.2 será:

$$f(t, i) = -\mu i + \beta_1 < k_1 > i(1 - i) + \beta_2 < k_2 > i^2(1 - i)$$

tray={}

**for** Ni veces **do**

$$m_1 = f(t_0, i_0),$$

$$m_2 = f(t_0 + h, i_0 + hm_1),$$

$$i_0 = i_0 + \frac{h}{2}(m_1 + m_2),$$

$$t_0 = t_0 + h,$$

Añadimos el punto  $(t_0, i_0)$  a la lista tray

**end for**

Observamos que hemos ido añadiendo a la lista tray cada punto de la solución aproximada. Así, para representar después las curvas solución aproximadas de la ecuación (4.2) basta con utilizar un *ListLinePlot*.

### CASO $\lambda_{\Delta} \leq 1$ ( $\lambda_{\Delta} = 0,8$ )

Al programar el método de RK2 para resolver la ecuación (4.2) en *Mathematica* para  $\lambda < 1$ ,  $\lambda > 1$  y  $\lambda = 1$ , y representar la solución, obtenemos las siguientes gráficas:

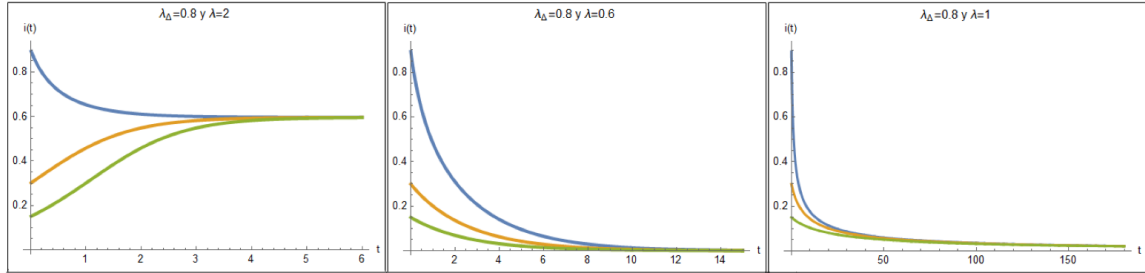


Figura 4.3: Runge-Kutta de orden 2 para  $\lambda_{\Delta} \leq 1$

Observamos que en cada una de las gráficas de la Figura 4.3, fijadas  $\lambda$  y  $\lambda_{\Delta}$ , hemos representado  $i(t)$  para tres valores distintos de la fracción inicial de nodos infectados:  $i_0 = 0,9$  (curvas azules),  $i_0 = 0,3$  (curvas naranjas) y  $i_0 = 0,15$  (curvas verdes).

Recordemos que al estudiar las soluciones de la ecuación (4.2) concluimos que en el caso de  $\lambda_{\Delta} < 1$  el MCS se comporta de forma análoga al modelo SIS estándar. En efecto, fijándonos en la primera y tercera gráfica respectivamente vemos que para  $\lambda \leq 1$  ( $\lambda = 0,6$ ) y  $\lambda = 1$  todas las curvas convergen al 0, de manera que todo el mundo se recupera y se alcanza el estado libre de infección. Asimismo, para  $\lambda > 1$  ( $\lambda = 2$ ) la epidemia alcanza un estado endémico (curvas de la segunda gráfica).

### CASO $\lambda_{\Delta} > 1$ ( $\lambda_{\Delta} = 2,5$ )

De nuevo, usando el método Runge-Kutta de orden 2 para  $\lambda > 1$  y  $\lambda < 1$ , teniendo en cuenta en cada caso tres densidades iniciales de nodos infectados,  $i_0 = 0,9$ ,  $i_0 = 0,3$  y  $i_0 = 0,15$ , y a continuación hemos representado las soluciones obtenidas.

La primera gráfica que hemos obtenido (primera gráfica de la Figura 4.4) corresponde con  $\lambda > 1$  ( $\lambda = 1,7$ ) y observamos que las trayectorias convergen en un estado endémico, tal y como se vio en el estudio matemático de las soluciones de la Ecuación (4.2) de la sección anterior.

Por otra parte, en el caso de  $\lambda < 1$  obtuvimos que era una región biestable, de manera que  $\lambda^c$  es un “valor umbral” que nos divide ambos estados (recordemos el cuadrante superior izquierdo del diagrama bidimensional de la Figura 4.2, limitado por las rectas  $\lambda_{\Delta} = 1$  y  $\lambda = 1$ ).

Lo primero que hacemos entonces es calcular  $\lambda^c = -\lambda_{\Delta} + 2\sqrt{\lambda_{\Delta}} \approx 0,662278$ , y comprobamos que en efecto  $\lambda^c < 1$ . Sabemos por tanto que si tomamos  $0,662278 < \lambda < 1$  en ocasiones la epidemia converge al estado libre de infección y otras veces la epidemia

converge en un estado endémico. Si por el contrario  $\lambda < 0,662278$ , siempre convergerá al estado libre de infección.

Así pues, para  $\lambda < 1$  primero hemos tomado  $\lambda = 0,75$  ( $0,662278 < \lambda < 1$ ) (segunda gráfica de la Figura 4.4), y después  $\lambda = 0,6$  ( $\lambda < 0,662278$ ) (tercera gráfica de la Figura 4.4). Efectivamente, en la segunda gráfica de la Figura 4.4 observamos que para  $i_0 = 0,9$  y  $i_0 = 0,3$  la epidemia alcanza un estado endémico, mientras que para  $i_0 = 0,15$  la epidemia converge a un estado libre de infección. Esto nos muestra de manera clara que **la convergencia de la epidemia en la región biestable depende de la fracción inicial de nodos infectados  $i_0$** .

Por el contrario, en la tercera gráfica la epidemia converge al estado libre de infección, independientemente del valor de la fracción inicial de nodos infectados.

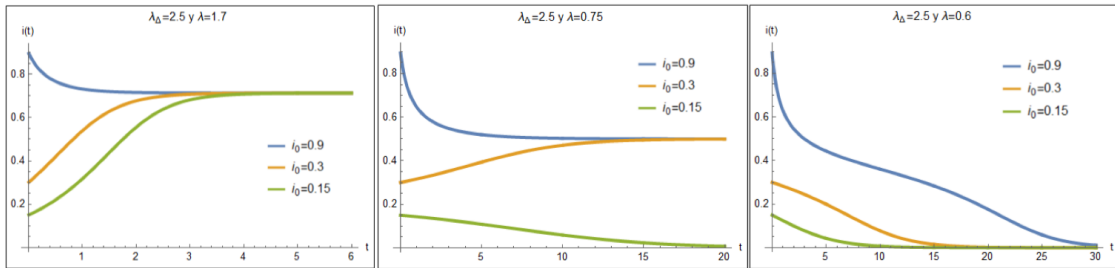


Figura 4.4: Runge-Kutta de orden 2 para  $\lambda_{\Delta} > 1$

### 4.3. Contagio simplicial sobre complejos simpliciales del mundo real

En [16] consideran cuatro datasets recopilados por SocioPatterns [25] que describen interacciones cara a cara en cuatro contextos sociales diferentes: 1) el trabajo, 2) en una conferencia, 3) en un hospital y 4) en un instituto. Gracias a estos datos obtienen complejos simpliciales que representan estructuras sociales sobre los contextos sociales considerados, limitando el proceso a orden  $D = 2$  por simplicidad. Sobre estos complejos simpliciales “reales” simulan el MCS de orden  $D = 2$  y obtienen los resultados.

Las simulaciones consisten en hacer correr el MCS fijando una fracción inicial de nodos infectados  $i_0$ . En el artículo no está explicado pero si nos vamos al código de Python del archivo “utils\_simplagion\_on\_RSC.py” que se encuentra en el enlace <https://github.com/iaciac/simplagion>, observamos que lo que se hace es recorrer cada uno de los nodos infectados y los 2-símplices del complejo simplicial, considerando así todos los canales de infección posibles para  $D = 2$  representados en la Figura 4.1.

En dicho código hay una función de inicialización en la que definimos la lista de nodos del complejo simplicial, la lista de triángulos, un diccionario cuyas llaves son los nodos y para cada nodo su valor es una lista de vecinos de dicho nodo, el número de nodos y la fracción de nodos infectados del complejo simplicial. Hay otra función en la que se hace una configuración inicial del complejo simplicial teniendo en cuenta la densidad inicial fijada  $i_0$  de manera que se crean dos nuevas listas, una de susceptibles y otra de

infectados. Y después aparece ya la función *run*, en la que se hace correr el MCS sobre dicho complejo, es decir, donde se realiza la simulación. Durante todo el código se refieren a los nodos como **agentes**.

Veremos a continuación los pseudocódigos del contagio en una simulación del MCS, que forman parte de la función *run*.

- Para el CONTAGIO ESTÁNDAR recorreremos la lista de nodos infectados del complejo simplicial, denominando a cada nodo infectado por “*iagente*”. Para cada nodo infectado, recorreremos la lista de sus vecinos, y aquellos vecinos del nodo que sean susceptibles los infectamos con probabilidad  $\beta_1$  (recordemos que si un nodo susceptible y uno infectado están en contacto, el nodo susceptible se infecta con probabilidad  $\beta_1$ ). Así, solo infectaremos al vecino de *iagente* si al generar un número aleatorio con la función *random()* este es menor que  $\beta_1$ , lo cuál explica el último *if*. Recordamos además que un agente es susceptible si se encuentra en la lista de susceptibles.

```

for iagente nodo infectado del complejo simplicial do
  for agente vecino de iagente do
    if agente es susceptible then
      if númeroAleatorio  $\leq$   $\beta_1$  then
        Infectamos agente
      end if
    end if
  end for
end for

```

- En el caso del CONTAGIO POR TRIÁNGULOS recorreremos la lista de triángulos del complejo simplicial, y denotamos por  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$  a cada uno de sus tres nodos. En el caso de que haya dos nodos del 2-símplice infectados y el otro sea susceptible, el nodo susceptible se infecta con probabilidad  $\beta_\Delta$ . Por ello, una vez tengamos dos infectados y uno susceptible, generaremos como antes un número aleatorio con la función *random()* y si este es menor que  $\beta_\Delta$  infectaremos al susceptible. Recordemos además que un nodo es infectado si está en la lista de infectados y es susceptible si está en la lista de susceptibles. Así, los tres primeros *if* anidados representan al caso en el que los agentes  $n_1$  y  $n_2$  son infectados, y  $n_3$  es susceptible, y a continuación infectamos  $n_3$  con probabilidad  $\beta_\Delta$  (cuarto *if*). Para los otros dos casos (1º)  $n_1, n_3$  infectados y  $n_2$  susceptible; 2º)  $n_2, n_3$  infectados y  $n_1$  susceptible) se hace de manera análoga, haciendo uso de la estructura *if-else*.

```

for triangulo del complejo simplicial do
   $n_1, n_2, n_3 = \text{triangulo}$ 
  if  $n_1$  es nodo infectado then
    if  $n_2$  es nodo infectado then
      if  $n_3$  es nodo susceptible then
        if númeroAleatorio  $\leq$   $\beta_\Delta$  then
          Infectamos  $n_3$ 
        end if
      end if
    end if
  else
    if  $n_3$  es infectado then

```

```

        if númeroAleatorio  $\leq \beta_{\Delta}$  then
            Infectamos  $n_2$ 
        end if
    end if
end if
else
    if ( $n_2$  es infectado) && ( $n_3$  es infectado) then
        if númeroAleatorio  $\leq \beta_{\Delta}$  then
            Infectamos  $n_1$ 
        end if
    end if
end if
end for

```

A la hora de realizar una simulación se pueden dar dos casos: que se alcance el estado libre de enfermedad, finalizando así la simulación; o llegar a un estado estacionario, en cuyo caso se calcula la **media de la densidad estacionaria de nodos infecciosos**  $i^*$ , que se obtiene haciendo la media de la fracción de nodos infectados  $i$  en los 100 pasos después de alcanzar dicho estado. Finalmente, se realiza el promedio de 120 ejecuciones realizadas todas ellas con una misma densidad inicial  $i_0$  pero cambiando las posiciones de los nodos infectados. Además, debemos saber que utilizan los parámetros de infección ya definidos  $\lambda = \beta \langle k \rangle / \mu$  y  $\lambda_{\Delta} = \beta_{\Delta} \langle k_{\Delta} \rangle / \mu$ , teniendo en cuenta así que los distintos datasets tienen distintas densidades de aristas (1-símplices) y triángulos (2-símplices) (véase tabla de la Figura 4.5).

Dataset	Context	$\langle k \rangle$	$\langle k_{\Delta} \rangle$
InVS15	Workplace	21.0	7.0
SFHH	Conference	21.6	7.7
LH10	Hospital	25.7	17.5
Thiers13	High school	32.0	11.1

Figura 4.5: Grados medios de aristas y triángulos de los complejos simpliciales “reales” creados en [16] a partir de los datasets (de [16])

Una vez sabemos cómo realizan en [16] las simulaciones del MCS sobre complejos simpliciales reales, centrémonos ahora en los resultados que han obtenido y representado.

Así, en cada una de las gráficas se representa la media de la densidad estacionaria de nodos infectados  $i^*$  con respecto a la tasa de infección  $\lambda$  para  $\lambda_{\Delta} = 0$  (equivalente al modelo SIS),  $\lambda_{\Delta} > 1$  y  $\lambda_{\Delta} < 1$ , y en cada uno de los contextos sociales. Además, si nos fijamos en los cuadrados naranjas, que describen la curva de difusión para  $\lambda_{\Delta} > 1$ , en realidad hay dos curvas superpuestas que coinciden en una gran parte de su trayectoria. Estas dos curvas representan diferentes densidades iniciales  $i_0$ .



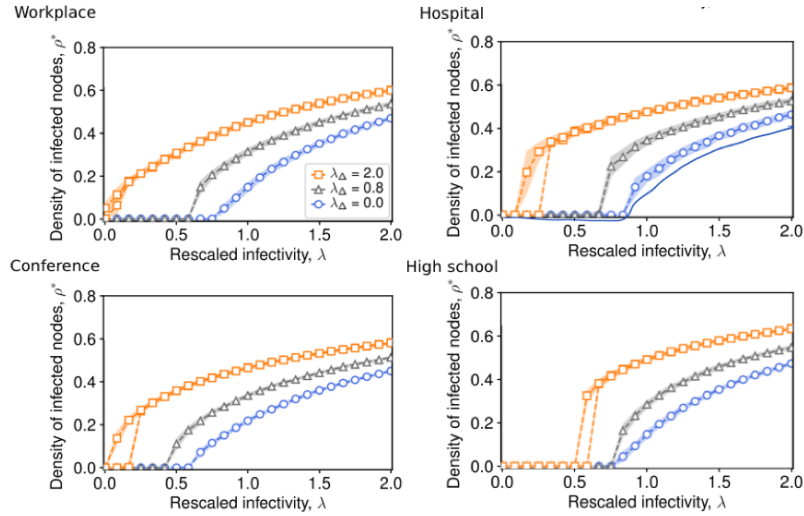


Figura 4.6: MCS de orden  $D=2$  sobre complejos simpliciales reales donde  $\rho^*$  denotaría nuestro  $i^*$  (de [16])

Los círculos azules nos señalan la curva de difusión simulada para  $\lambda_\Delta = 0$ , que equivale al modelo SIS estándar y en la que observamos una transición continua del estado libre de infección al estado endémico. Dicha curva es muy similar a la descrita para  $\lambda_\Delta < 1$  ( $\lambda_\Delta = 0,8$ ), con lo que podemos afirmar que para  $\lambda_\Delta < 1$  el MCS se comporta de manera parecida al modelo SIS estándar. Sin embargo, para  $\lambda_\Delta > 1$  ( $\lambda_\Delta = 2,0$ ) observamos que existe una región de  $\lambda$  para la cuál una de las curvas de cuadrados naranjas representa un estado libre de enfermedad mientras que la otra nos informa de que hay un estado endémico. Aparece por lo tanto una región biestable, en la que los estados libres de infección ( $i^* = 0$ ) y endémico ( $i^* > 0$ ) coexisten (recordemos la segunda gráfica de la Figura 4.4, en la que para dos valores de  $i_0$  la curva convergió a un estado endémico y para otro a un estado libre de infección).

Los complejos simpliciales obtenidos a partir de los datasets y sobre los que hemos simulado el MCS corresponden todos a distintos contextos sociales con diferentes densidades de 1- y 2-símplices y distribuciones de grado de aristas  $k_1$  (calculadas en [16]) similares (representadas en la Figura 4.7). Así, la dinámica del MCS es similar sobre cada uno de ellos. Dicha dinámica, coincide también con el comportamiento de la aproximación de la solución  $i$  de la ecuación diferencial (4.2). De esta manera, podemos decir que la aproximación del comportamiento del MCS dada por el método RK2 es suficientemente precisa sobre este tipo de redes reales.

En el Capítulo 1 vimos que las redes de escala-libre eran aquellas cuya distribución de grado  $p_k$  es de potencia (gráfica de la izquierda de la Figura 1.3), mientras que en las redes aleatorias la distribución de grado sigue una distribución de Poisson (Figura 1.2). Si nos fijamos en las gráficas de la Figura 4.7, podemos observar que los complejos simpliciales reales definidas por los datasets siguen una distribución de grado de aristas  $k_1$  de potencia. En la siguiente sección simularemos el MCS sobre complejos simpliciales sintéticos, que van a tener una topología de grado de aristas  $k_1$  de Poisson (Figura 4.7).

De esta manera obtendremos la evolución del MCS sobre redes con una topología de

contactos distinta a estas redes reales.

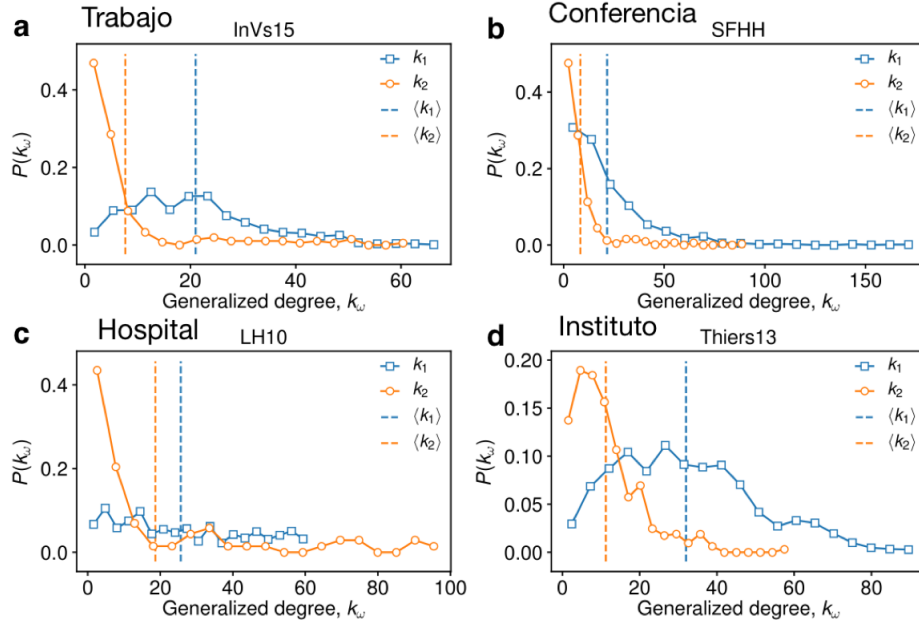


Figura 4.7: Distribuciones de los datasets con datos reales (de [16])

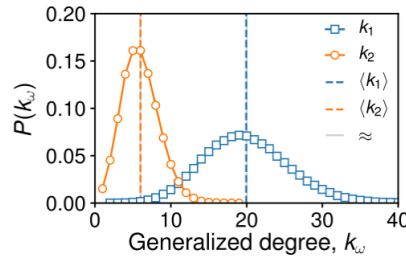


Figura 4.8: MCS de orden  $D=2$  sobre complejos simpliciales reales (de [16])

## 4.4. Contagio simplicial sobre redes sintéticas

En el Capítulo 0 estudiamos las propiedades de las redes aleatorias de Erdős-Rényi, donde cada par de nodos tienen la misma probabilidad de estar conectados. Además, vimos el algoritmo que nos permite crear este tipo de redes y analizamos su distribución de grados. En este capítulo, lo que nos interesa es un modelo que genere complejos simpliciales aleatorios con simplices de distintas dimensiones, nos permita conocer sus propiedades y controlar su conectividad local.

En [16] proponen un modelo para **construir complejos simpliciales aleatorios**: el modelo RSC (Random Simplicial Complex model). Este modelo nos permitirá controlar simultáneamente el grado medio de los nodos con respecto aristas  $\langle k \rangle$  y el grado medio de los nodos con respecto a triángulos  $\langle k_{\Delta} \rangle$ .

### 4.4.1. MODELO RSC DE DIMENSIÓN D

El **modelo RSC de dimensión D** cuenta con  $D+1$  parámetros  $(N, p_1, \dots, p_D)$ , donde  $N$  es el número de vértices del complejo simplicial que queremos contruir y las  $p_k$  con  $0 \leq k \leq D$  son probabilidades que nos controlan la creación de  $k$ -símplices. Así, cualquier conjunto de  $k-1$  vértices formarán un  $k$ -símplice con probabilidad  $p_k$ . Dados por tanto dos nodos cualesquiera  $i, j$ , los conectaremos formando un 1-símplice  $(i, j)$  con probabilidad  $p_1$ . Igualmente, los 2-símplices del complejo simplicial se crearán conectando cualquier triplete de nodos  $(i, j, k)$  con probabilidad  $p_2 = p_\Delta$ .

Así, teniendo en cuenta que un nodo cualquiera de un complejo simplicial aleatorio de dimensión  $D = 2$ , estará unido a cualquier otro nodo con probabilidad  $p_1$  y pertenecerá a un 2-símplice con probabilidad  $p_\Delta$ , es sencillo calcular  $\langle k \rangle$  y  $\langle k_\Delta \rangle$ . Por ello, dados unos valores determinados de  $N, \langle k \rangle$  y  $\langle k_\Delta \rangle$ , podemos crear el complejo simplicial correspondiente tomando los  $p_1$  y  $p_\Delta$  apropiados. En [16] generalizan esta situación para un  $D$  cualquiera (pero no ponen fórmula) y realizan el caso para  $D = 2$ . Aquí, haremos primero el caso para  $D = 3$  y a continuación especificaremos la fórmula generalizada para un  $D$  arbitrario.

**Proposición 4.4.1.** *Dados unos valores específicos de  $N, \langle k_1 \rangle, \langle k_\Delta \rangle, \langle k_3 \rangle$ , podemos obtener el complejo simplicial aleatorio con dichos valores de  $N, \langle k_1 \rangle, \langle k_\Delta \rangle, \langle k_3 \rangle$  mediante el modelo RSC de dimensión  $D = 3$  tomando los parámetros  $p_1, p_\Delta$  y  $p_3$  de la siguiente manera:*

$$p_1 = \frac{\langle k \rangle - 2 \langle k_\Delta \rangle + 3 \langle k_3 \rangle}{N - 1 - 2 \langle k_\Delta \rangle - 3 \langle k_3 \rangle}, p_\Delta = \frac{\langle k_\Delta \rangle - 3 \langle k_3 \rangle}{\binom{N-1}{2} - 3 \langle k_3 \rangle} \text{ y } p_3 = \frac{\langle k_3 \rangle}{\binom{N-1}{3}}$$

*Demostración.* Sea el modelo RSC de dimensión  $D = 3$  con parámetros  $(N, p_1, p_\Delta, p_3)$  y calculemos  $\langle k_1 \rangle, \langle k_\Delta \rangle$  y  $\langle k_3 \rangle$  teniendo en cuenta las tres etapas del modelo.

#### 1ª etapa

En la primera etapa, dado el conjunto  $V$  de  $N$  vértices, conectaremos dos vértices cualesquiera con probabilidad  $p_1$ . Es claro entonces que  $\langle k \rangle = (N-1)p_1$ , pues dado un vértice cualquiera estará conectado con cada uno de los  $N-1$  vértices restantes con probabilidad  $p_1$ .

#### 2ª etapa

En la segunda etapa creamos ya los 2-símplices. Así, tres vértices cualesquiera  $i, j, k \in V$  se conectan formando un 2-símplice con probabilidad  $p_2$  y con ello tenemos

$$\langle k_\Delta \rangle = \binom{N-1}{2} p_\Delta = \frac{(N-1)(N-2)}{2} p_\Delta \quad (4.8)$$

pues fijando un nodo cualquiera  $i \in V$ , el resto de nodos se toman de dos en dos, y se multiplica por la probabilidad de que dicho nodo se una con los otros dos formando un 2-símplice,  $p_\Delta$ .

Al crear nuevos 2-símplices, el grado medio  $\langle k \rangle$  podría aumentar. Para calcular  $\langle k \rangle$  esta nueva contribución, tendremos en cuenta distintos escenarios en los que un nodo cualquiera se conecta a otros dos nodos formando un 2-símplice. Sea entonces  $i \in V$  un nodo cualquiera y supongamos que vamos a crear un 2-símplice  $(i, j, k)$ ,  $j, k \in V$ . Hay 3 posibles escenarios dependiendo de la primera etapa en la que hemos creado las aristas:

1. Que el grado del nodo  $i$  aumente en dos unidades,  $k_i \rightarrow k_i + 2$ . Esto ocurre cuando el nodo  $i$  no se ha conectado con ninguno de los nodos  $j, k \in V$  en la primera etapa y por tanto sucede con probabilidad

$$P(\{\text{i no unido a j}\} \cap \{\text{i no unido a k}\}) = (1 - p_1)(1 - p_1) = (1 - p_1)^2$$

2. Que el grado del nodo  $i$  aumente en una sola unidad,  $k_i \rightarrow k_i + 1$ , en el caso de que dicho nodo se haya conectado ya en la primera etapa a uno de los nodos  $j$  o  $k$ . Esto ocurrirá por tanto con probabilidad

$$\begin{aligned} P((\{\text{i unido a j}\} \cap \{\text{i no unido a k}\}) \cup (\{\text{i no unido a j}\} \cap \{\text{i unido a k}\})) = \\ = p_1(1 - p_1) + (1 - p_1)p_1 = 2p_1(1 - p_1) \end{aligned}$$

3. Que el grado del nodo  $i$  aumente 0 unidades, en el caso de que ya esté unido con ambos nodos cuando se cree el 2-símplice. Esto ocurrirá con probabilidad:

$$P(\{\text{i unido a j}\} \cap \{\text{i unido a k}\}) = p_1p_1 = p_1^2$$

Teniendo en cuenta estos tres escenarios, sabemos que cuando creamos un nuevo 2-símplice del que forma parte un nodo fijo  $i \in V$ , este 2-símplice contribuye al grado de aristas de  $i$ ,  $k_i$ , dos unidades con probabilidad  $(1 - p_1)^2$ , una unidad con probabilidad  $2p_1(1 - p_1)$  y 0 unidades con probabilidad  $p_1^2$ . Por lo tanto,  $k_i$  **aumenta en media por cada 2-símplice al que esté unido**  $2(1 - p_1)^2 + 1 \times 2p_1(1 - p_1) + 0p_1^2 = 2(1 - p_1)$ . Así, sumando las contribuciones de las 2 etapas concluimos:

$$\langle k \rangle \approx \underbrace{(N - 1)p_1}_{1^{\text{a}} \text{ etapa}} + \underbrace{2p_1(1 - p_1)}_{2^{\text{a}} \text{ etapa}} \langle k_{\Delta} \rangle \quad (4.9)$$

Observamos que en realidad no hace falta calcular la probabilidad de que aumente 0 unidades, pues su contribución es 0 y por tanto no afecta al aumento de grado.

**3ª etapa** Por último, en la tercera etapa, dados cuatro nodos cualesquiera  $i, j, k, l \in V$ , estos se conectan con probabilidad  $p_3$  y por lo tanto

$$\langle k_3 \rangle = \binom{N - 1}{3} p_3 = \frac{(N - 1)(N - 2)(N - 3)}{6} p_{\Delta} \quad (4.10)$$

De nuevo, al añadir 3-símplices  $\langle k \rangle$  y  $\langle k_{\Delta} \rangle$  varían, pues aparecerán nuevas aristas (1-símplices) y triángulos (2-símplices).

Calculemos primero  $\langle k_{\Delta} \rangle$  de manera exacta. Sea  $i \in V$  un nodo cualquiera y supongamos que vamos a crear un 3-símplice  $(i, j, k, l)$ . Hay 4 posibles escenarios:

1. Que  $k_{\Delta i}$  aumente 3 unidades,  $k_{\Delta i} \rightarrow k_{\Delta i} + 3$ ; esto es, que el nodo  $i$  quede conectado a 3 nuevos triángulos. Esto ocurrirá cuando el nodo  $i$  no forme parte de ningún 2-símplice de  $(i, j, k, l)$  creado en la segunda etapa y la probabilidad de que esto suceda será  $(1 - p_{\Delta})^3$ .
2. Que  $k_{\Delta i}$  aumente 2 unidades,  $k_{\Delta i} \rightarrow k_{\Delta i} + 2$ , en el caso de que el nodo  $i$  forme parte de exactamente un 2-símplice del tetraedro  $(i, j, k, l)$ . Ocurre por tanto con probabilidad  $3(1 - p_{\Delta})^2 p_{\Delta}$ .

3. Que  $k_{\Delta_i}$  aumente 1 unidad,  $k_{\Delta_i} \rightarrow k_{\Delta_i} + 1$ , cuando el nodo  $i$  forme ya forma parte de dos 2-símplices del tetraedro  $(i, j, k, l)$ . Eso ocurrirá con probabilidad  $3(1 - p_{\Delta})p_{\Delta}^2$ .
4. Que  $k_{\Delta_i}$  aumente 0 unidades, que como su contribución es 0 no necesitamos saber su probabilidad.

Así, por cada 3-símplice que se crea en el complejo simplicial que estamos construyendo  $k_{\Delta_i}$  aumenta de media  $3(1 - p_{\Delta})^3 + 2 \times 3(1 - p_{\Delta})^2p_{\Delta} + 1 \times 3(1 - p_{\Delta})p_{\Delta}^2 = 3(1 - p_{\Delta})$   
Sumando las distintas etapas obtenemos:

$$\langle k_{\Delta} \rangle \approx \underbrace{\binom{N-1}{2} p_{\Delta}}_{2^{\text{a}} \text{ etapa}} + \underbrace{3(1 - p_{\Delta}) \langle k_3 \rangle}_{3^{\text{a}} \text{ etapa}} \quad (4.11)$$

Veamos ahora cuál es el valor de  $\langle k \rangle$  de manera exacta. De nuevo, tengamos en cuenta el nodo  $i$  y veamos lo que ocurre al crear un 3-símplice  $(i, j, k, l)$ . En este caso hay 4 posibles escenarios:

1. Que el grado del nodo  $i$   $k_i$  aumente en 3 unidades,  $k_i \rightarrow k_i + 3$ , en el caso de que dicho nodo no esté conectado ya a ningún otro nodo del 3-símplices. Esto ocurrirá con probabilidad

$$P(\{i \text{ no unido a } j\} \cap \{i \text{ no unido a } k\} \cap \{i \text{ no unido a } l\}) = (1 - p_1)^3$$

2. Que  $k_i$  aumente en 2 unidades,  $k_i \rightarrow k_i + 2$ , en el caso de que  $i$  ya esté conectado exactamente a una arista, y ocurre con probabilidad

$$P(\{i \text{ esté unido a } j \text{ y no a } l \text{ ni a } k\}) \cup \{i \text{ unido a } k \text{ y no a } l \text{ ni a } j\} \cup \\ \cup \{i \text{ unido a } l \text{ y no a } j \text{ ni a } k\}) = 3p_1(1 - p_1)^2$$

3. Que  $k_i$  aumente en 1 unidad,  $k_i \rightarrow k_i + 1$ , en el caso de que  $i$  ya esté conectado exactamente a dos aristas, y ocurre con probabilidad

$$P(\{i \text{ esté unido a } j \text{ y a } l \text{ y no a } k\}) \cup \{i \text{ unido a } k \text{ y a } l \text{ y no a } j\} \cup \\ \cup \{i \text{ unido a } j \text{ y a } k \text{ y no a } l\}) = 3p_1^2(1 - p_1)$$

4. Que  $k_i$  aumente en 0 unidades,  $k_i \rightarrow k_i + 0$ .

Por cada 3-símplice que se crea en el complejo simplicial que estamos construyendo  $k_i$  aumenta de media  $3(1 - p_1)^3 + 2 \times 3p_1(1 - p_1)^2 + 1 \times 3p_1^2(1 - p_1) = 3 - 3p_1 = 3(1 - p_1)$   
Sumando las tres etapas obtenemos:

$$\langle k_1 \rangle \approx \underbrace{(N-1)p_1}_{1^{\text{a}} \text{ etapa}} + \underbrace{2(1 - p_1) \langle k_2 \rangle}_{2^{\text{a}} \text{ etapa}} + \underbrace{3(1 - p_1) \langle k_3 \rangle}_{3^{\text{a}} \text{ etapa}} \quad (4.12)$$

Si despejamos  $p_3$  de (4.12) obtenemos

$$p_3 = \frac{\langle k_3 \rangle}{\binom{N-1}{3}}$$

Por otra parte, sacando factor común a  $p_\Delta$  en (4.11) sabemos que  $\langle k_\Delta \rangle = \binom{N-1}{2} - 3 \langle k_3 \rangle p_\Delta + 3 \langle k_3 \rangle$  y despejando nos queda

$$p_\Delta = \frac{\langle k_\Delta \rangle - 3 \langle k_3 \rangle}{\binom{N-1}{2} - 3 \langle k_3 \rangle}$$

Finalmente, sacando factor común a  $p_1$  en (4.12) tenemos  $\langle k \rangle = (N - 1 - 2 \langle k_\Delta \rangle - 3 \langle k_3 \rangle) p_1 + 2 \langle k_\Delta \rangle + 3 \langle k_3 \rangle$  y despejando concluimos

$$p_1 = \frac{\langle k \rangle - 2 \langle k_\Delta \rangle + 3 \langle k_3 \rangle}{N - 1 - 2 \langle k_\Delta \rangle - 3 \langle k_3 \rangle}$$

□

La siguiente proposición nos da la generalización a un  $D$  cualquiera.

**Proposición 4.4.2.** *Dados unos valores determinados de  $N$ ,  $\langle k_1 \rangle$ , ...,  $\langle k_D \rangle$ , podemos crear el complejo simplicial correspondiente mediante el modelo RSC tomando*

$$p_D = \frac{\langle k_D \rangle}{\binom{N-1}{D}} \text{ y } p_j = \frac{\langle k_j \rangle - \sum_{i=j+1}^D i \langle k_i \rangle}{\binom{N-j}{j} - \sum_{i=j+1}^D i \langle k_i \rangle} \text{ para } 1 \leq j < D$$

#### 4.4.2. Contagio simplicial sobre redes sintéticas

En la sección 4.3 vimos, a través del pseudocódigo, cómo se realizan simulaciones del MCS sobre complejos simpliciales. Actuando de la misma forma, veamos a continuación **cómo se comporta el MCS al simularlo sobre una red sintética creada por el modelo RSC:**

En [16] crean un complejo simplicial con  $N = 2000$  nodos,  $\langle k \rangle \simeq 20$  y  $\langle k_\Delta \rangle \simeq 6$  utilizando el modelo RSC y hacen correr el MCS de dimensión  $D = 2$  sobre dicho complejo. Para ello, como en el caso de complejos simpliciales reales, fijan una densidad inicial  $i_0$  colocando los nodos infectados de manera aleatoria. Después calculan la **media de la densidad estacionaria de nodos infectados**  $i^*$  realizando distintas ejecuciones del modelo SCM, cada una de ellas sobre una realización del modelo RSC distinta.

De nuevo de [16], obtenemos la gráfica que nos muestra los resultados de estas simulaciones, Figura 4.9.

- En la gráfica (a) de la Figura 4.9 la media de la densidad estacionaria de nodos infectados se representa respecto a la tasa de infectividad  $\lambda$ , para los valores  $\lambda_\Delta = 0$  (círculos azul claro),  $\lambda_\Delta < 1$  (cuadrados blancos) y  $\lambda_\Delta > 1$  (círculos azul oscuro).

Observamos que las tres curvas son muy similares a las obtenidas en las gráficas de la Figura 4.6. Para  $\lambda_\Delta < 1$  ( $\lambda_\Delta = 0,8$ ), el modelo se comporta de manera similar a como lo hace el modelo SIS estándar ( $\lambda_\Delta = 0$ ), con una transición continua en  $\lambda_\Delta = 1$ , valor en el que la epidemia pasa de converger en un estado libre de infección a un estado endémico.

Por otra parte, para  $\lambda_\Delta > 1$  hay dos curvas diferentes representadas, una para  $i_0 = 0,4$  y la otra para  $i_0 = 0,001$ , que se superponen en una gran parte. **Vemos**

que existe una región de  $\lambda$ ,  $\lambda^c < \lambda < 1$  para la cuál los estados endémico y libre de infección coexisten. El estado final de la pandemia cuando  $\lambda$  toma un valor de dicha región dependerá de la densidad inicial de nodos infectados.

Además, en la gráfica están representadas en rojo, y para cada valor de  $\lambda$  y  $\lambda_\Delta$ , la solución de la ecuación diferencial (4.2) (denotada por MF en la leyenda). Podemos observar que en efecto dichas soluciones aproximan de manera correcta los resultados obtenidos al simular el SCM sobre complejos simpliciales sintéticos.

- La gráfica (b) nos muestra la evolución temporal de la densidad de nodos infectados  $i(t) = \rho(t)$ . Para ello nos representa  $i$  con respecto al tiempo, para distintas densidades iniciales  $i_0$ , y parámetros de infección  $\lambda$  y  $\lambda_\Delta$  fijos. Dichos parámetros de infección se toman de manera que estemos en la región biestable,  $\lambda_\Delta > 1$  ( $\lambda_\Delta = 2,5$ ) y  $\lambda^c < \lambda < 1$  ( $\lambda = 0,75$ ). Cada curva (de distinto color) equivale a una sola realización del modelo SCM, con una  $i_0$  característica y dependiendo de dicha  $i_0$ , unas curvas convergen al estado endémico y otras al estado libre de infección.

Como se observa en la gráfica, existe un “valor umbral” de  $i_0$ , de manera que la epidemia converge a un estado libre de infección si  $i_0$  es menor que dicho valor, y converge a un estado endémico si lo supera. La línea horizontal discontinua representa ese valor umbral y **corresponde con la solución  $i_{2-}^*$  de la ecuación diferencial (4.3)**.

Así, esta gráfica ilustra de manera clara la región de biestabilidad obtenida en el estudio de la Ecuación (4.2), y que el estado final del MCS en dicha región depende de la fracción inicial de infectados  $i_0$ .

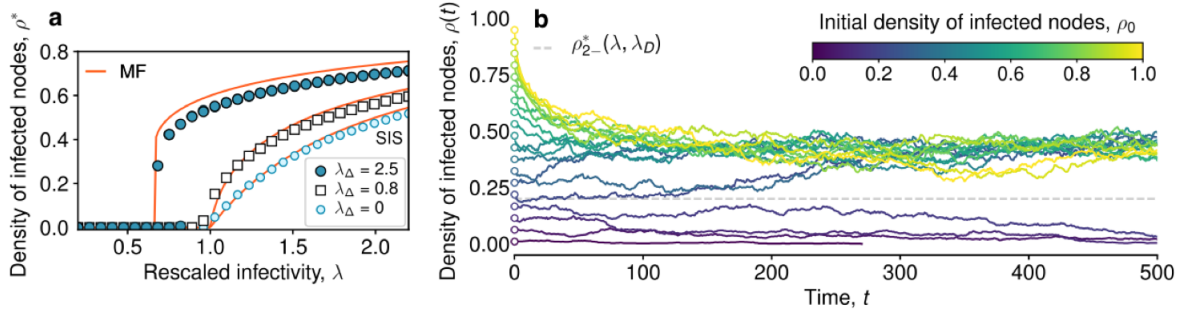


Figura 4.9: SCM de orden  $D=2$  sobre una Red Sintética (de [16]) donde  $\rho^*$  es nuestro  $i^*$  y  $\rho(t)$  es nuestro  $i(t)$

Observamos que pese a que la topología de contactos en los complejos simpliciales reales (distribución de de potencia, propia de una red de escala-libre) y en los complejos simpliciales sintéticos (distribución de Poisson, propia de una red aleatoria) es distinta, la dimensión de propagación que hemos obtenido es similar y coincide con la obtenida por RK2.

# Capítulo 5

## Conclusiones

Nuestro objetivo en este trabajo ha sido el estudio de la propagación de enfermedades infecciosas sobre redes simpliciales. En [16] proponen un nuevo modelo, llamado el **Modelo de Contagio Simplicial** (MCS), que en efecto nos permite estudiar el comportamiento de las epidemias al propagarse en redes simpliciales, y en el que nos hemos centrado en la parte final de este trabajo.

Los primeros resultados obtenidos han sido **teóricos**, gracias al estudio de la Ecuación (4.2) que aproxima dicho modelo. A partir de este estudio, hemos obtenido que **hay dos parámetros**  $\lambda$  y  $\lambda_\Delta$ , que **determinan el comportamiento de la epidemia**. Obtenemos así 3 regiones principales ilustradas en el diagrama bidimensional 4.2.

La primera región corresponde con  $\lambda > 1$  y la epidemia converge a un estado estacionario. Después, para  $\lambda < \lambda^c < 1$ , la epidemia converge a un estado libre de infección, en el que todo el mundo se recupera y no queda nadie infectado. Finalmente, nos aparece una **región de biestabilidad** para  $\lambda^c < \lambda < 1$ , en la cuál la convergencia de la epidemia depende de la fracción inicial de nodos infectados  $i_0$ .

Estas tres regiones las hemos obtenido también al representar las aproximaciones del método Runge-Kutta de orden 2 (RK2) de la fracción de infectados  $i(t)$  con respecto al tiempo, que ilustran el estudio de la Ecuación 4.2 (Figuras 4.3, 4.4). En efecto, al tomar  $\lambda = 0,75$  ( $\lambda^c < \lambda < 1$ ), en la segunda gráfica de la Figura 4.4 obtuvimos que para  $i_0 = 0,9$  y  $i_0 = 0,3$  las curvas alcanzan un valor constante positivo, mientras que para  $i_0 = 0,15$  la curva convergió al 0. Así, dicha gráfica nos ilustra la región de biestabilidad obtenida en el estudio.

Los resultados teóricos concluidos los hemos podido contrastar después con **resultados empíricos** de este mismo modelo, obtenidos a partir de las simulaciones del MCS (realizadas en [16]) sobre complejos simpliciales reales y sintéticos.

Pese a las diferentes topologías de contacto que presentan los complejos simpliciales reales y sintéticos, hemos obtenido que el MCS sigue unos patrones de comportamiento similares en ambos tipos de complejos, y que dichos patrones coinciden también con las aproximaciones del modelo RK2 de la Sección 4.2, que representan el estudio teórico anterior.

Además, he especificado la forma en la que simulan el MCS sobre un complejo simplicial a través del pseudocódigo y he detallado el modelo RSC de dimensión  $D$ , un **algoritmo de generación aleatoria de complejos simpliciales**, que nos permite controlar los grados medios de aristas  $\langle k \rangle$  y triángulos  $\langle k_\Delta \rangle$  simultáneamente.



Para obtener estos resultados, antes hemos tenido que explicar y conocer tanto algunas de las modelizaciones de las epidemias propuestas anteriormente sobre redes, como las estructuras de orden superior sobre las que queremos estudiar el comportamiento de las epidemias, los **complejos simpliciales**.

Por ello, hemos comenzado el trabajo realizando una breve introducción sobre redes, en la cuál las clasificamos según su distribución de grado  $p_k$ , en **redes aleatorias** y **redes de escala-libre**. Después, en el Capítulo 2 hemos descrito los modelos compartimentales SI y SIS, los cuales nos permiten estudiar la **dinámica de enfermedades infecciosas en redes**, tanto aleatorias como de escala-libre.

En el Capítulo 3 nos hemos enfocado en dar una serie de definiciones y propiedades sobre los complejos simpliciales, completándolas con ejemplos detallados. Hemos estudiado también las recientes nociones de adyacencias para símlices definidas en [24], y los diferentes grados simpliciales que de ellas derivan, que nos han sido de gran utilidad a la hora de estudiar el comportamiento de las epidemias sobre complejos simpliciales.

Así, una vez introducidas las propiedades de las redes aleatorias y de escala-libre, estudiado el comportamiento de los modelos compartimentales SI y SIS sobre redes, y entendidas las estructuras simpliciales, hemos podido enfocar el último capítulo al estudio del MCS, que es en realidad una generalización del modelo SIS de redes y que nos ha dado los principales resultados de este trabajo.

En 2009, la epidemia H1N1 fue la primera pandemia cuyo curso y evolución se predijo con precisión antes de que llegara a su pico. En numerosas ocasiones, conocer cómo se propaga una enfermedad en la población nos puede determinar cómo debemos administrar las curas o vacunas disponibles, con el fin de ralentizar dicho proceso de propagación.

En este trabajo, hemos descrito un marco analítico y numérico propuesto recientemente, que nos ha permitido modelizar la propagación de patógenos teniendo en cuenta las diferentes comunidades o interacciones de grupos que se forman en una población. El MCS nos permite **saber el estado en el que va a acabar la pandemia** y el tiempo que tarda en alcanzar dicho estado, obteniendo así el **tiempo que tardará una pandemia en estar controlada**.

Además, con la teoría de complejos simpliciales vista podemos saber cuáles son las comunidades “más influyentes” o con más conexiones de la población. Es claro que dichas comunidades deberán ser las primeras en estar vacunadas, dificultando así la propagación de la epidemia.

Para finalizar este trabajo podemos observar que este marco de modelización descrito va mucho más allá de la epidemiología. Así, nos permitirá modelizar y predecir otros tipos de procesos de difusión en grafos y redes simpliciales, como pueden ser los virus informáticos o los virus sociales (socialmente conocidos como memes).



# Bibliografía

- [1] Réka Albert, Hawoong Jeong y Albert-László Barabási. «Diameter of the world-wide web». En: *nature* 401.6749 (1999), págs. 130-131.
- [2] John Arquilla y David Ronfeldt. *Networks and netwars: The future of terror, crime, and militancy*. Rand Corporation, 2001.
- [3] Duygu Balcan y col. «Seasonal transmission potential and activity peaks of the new influenza A (H1N1): a Monte Carlo likelihood analysis based on human mobility». En: *BMC medicine* 7.1 (2009), págs. 1-12.
- [4] Albert-László Barabási. «Network science». En: *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 371.1987 (2013), pág. 20120375.
- [5] Albert-László Barabási. «Scale-free networks: a decade and beyond». En: *science* 325.5939 (2009), págs. 412-413.
- [6] Katy Börner, Soma Sanyal, Alessandro Vespignani y col. «Network science». En: *Annu. rev. inf. sci. technol.* 41.1 (2007), págs. 537-607.
- [7] Peter J Carrington, John Scott y Stanley Wasserman. *Models and methods in social network analysis*. Vol. 28. Cambridge university press, 2005.
- [8] Paul Erdős, Alfréd Rényi y col. «On the evolution of random graphs». En: *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci* 5.1 (1960), págs. 17-60.
- [9] Ernesto Estrada y Grant J. Ross. «Centralities in simplicial complexes. Applications to protein interaction networks». En: *Journal of Theoretical Biology* 438 (2018), págs. 46-60. ISSN: 0022-5193. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2017.11.003>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519317305040>.
- [10] Leonhard Euler. «Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis». En: *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae* (1741), págs. 128-140.
- [11] Timothy E Goldberg. «Combinatorial Laplacians of simplicial complexes». En: *Senior Thesis, Bard College* (2002).
- [12] Ronald Gould. *Graph theory*. Courier Corporation, 2012.
- [13] Nora Hartsfield y Gerhard Ringel. *Pearls in graph theory: a comprehensive introduction*. Courier Corporation, 2013.
- [14] Andrew L Hopkins. «Network pharmacology». En: *Nature biotechnology* 25.10 (2007), págs. 1110-1111.

- [15] Lars Hufnagel, Dirk Brockmann y Theo Geisel. «Forecast and control of epidemics in a globalized world». En: *Proceedings of the national academy of sciences* 101.42 (2004), págs. 15124-15129.
- [16] Iacopo Iacopini y col. «Simplicial models of social contagion». En: *Nature communications* 10.1 (2019), págs. 1-9.
- [17] Hawoong Jeong y col. «The large-scale organization of metabolic networks». En: *Nature* 407.6804 (2000), págs. 651-654.
- [18] SV Maletic. «Simplicial complexes and complex networks: the influence of higher-order (sub) structures on network properties». Tesis doct. doctoral dissertation/SV Maletic.—Belgrade, 2013.—65 p, 2013.
- [19] Amador Menéndez Velázquez y col. «Una breve introducción a la teoría de grafos». En: *Suma* (1998).
- [20] Terrence J Moore, Robert J Drost y Ananthram Swami. *The Communications and Networks Collaborative Technology Alliance Publication Network: A Case Study on Graph and Simplicial Complex Analysis*. Inf. téc. ARMY RESEARCH LAB ADELPHI MD COMPUTATIONAL e INFORMATION SCIENCES DIRECTORATE, 2015.
- [21] James R Munkres. *Elements of algebraic topology*. CRC press, 2018.
- [22] Mark EJ Newman, Duncan J Watts y Steven H Strogatz. «Random graph models of social networks». En: *Proceedings of the national academy of sciences* 99.suppl 1 (2002), págs. 2566-2572.
- [23] Sidney Redner. «How popular is your paper? An empirical study of the citation distribution». En: *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* 4.2 (1998), págs. 131-134.
- [24] Daniel Hernández Serrano, Juan Hernández-Serrano y Darío Sánchez Gómez. «Simplicial degree in complex networks. Applications of topological data analysis to network science». En: *Chaos, Solitons & Fractals* 137 (2020), pág. 109839.
- [25] SocioPatterns Collaboration. <http://www.sociopatterns.org/>. Accessed Dec 2018.
- [26] Remco Van Der Hofstad. «Random graphs and complex networks». En: *Available on http://www.win.tue.nl/rhofstad/NotesRGCN.pdf* 11 (2009), pág. 60.