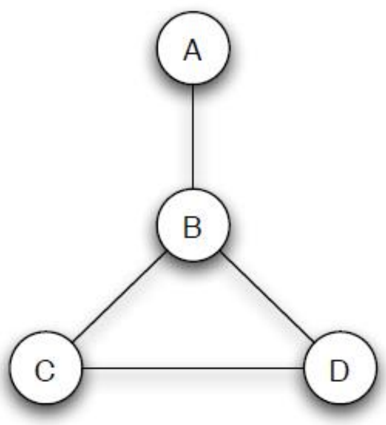
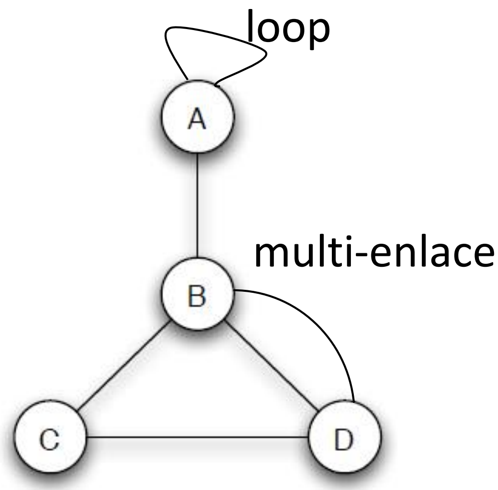
Conceptos Básicos

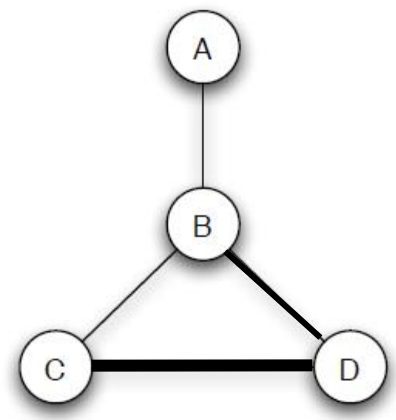
Un grafo es…

- Un grafo *G* es un conjunto de nodos y enlaces

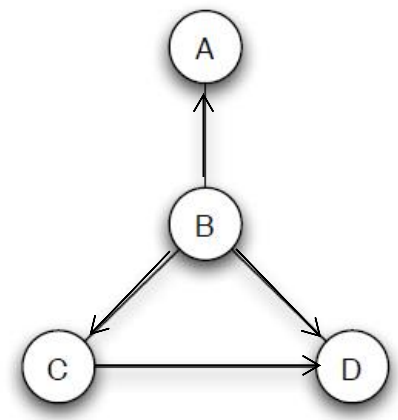


grafo simple
no-dirigido





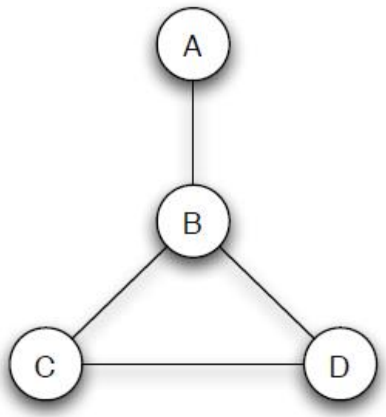
Grafo pesado



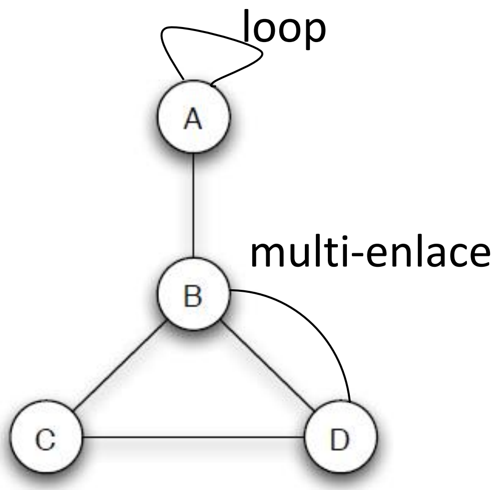
Grafo dirigido

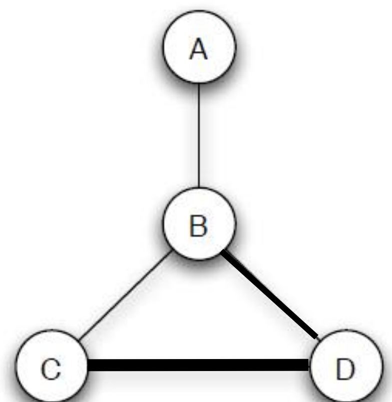
Un grafo es…

- Un grafo *G* es un conjunto de nodos y enlaces

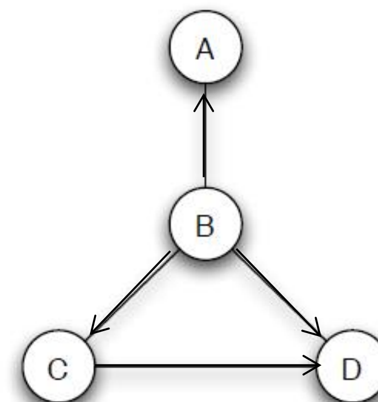


grafo simple
no-dirigido





Grafo pesado

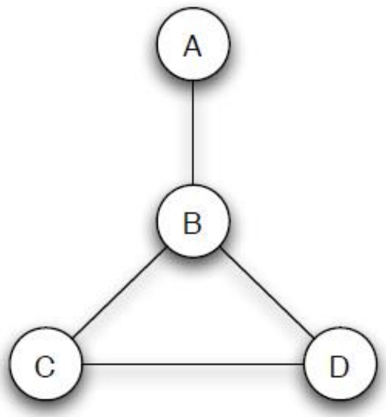


Grafo dirigido

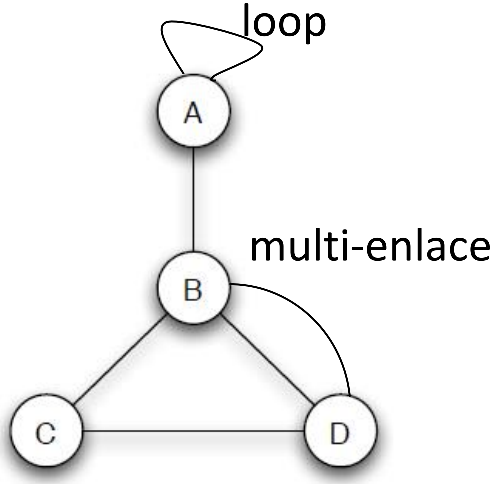
Grafo simple no dirigido, ***G(N,E)***, es un par de conjuntos $\boldsymbol{N} \neq 0$ y ***E*** . ***N*** es un conjunto de elementos $\boldsymbol{N}=\{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ llamados nodos o vértices. Los elementos de $\boldsymbol{E}=\{e_1, e_2, \dots, e_M\}$ son <u>pares no-ordenados</u> de elementos distintos de ***N***, llamados enlaces.

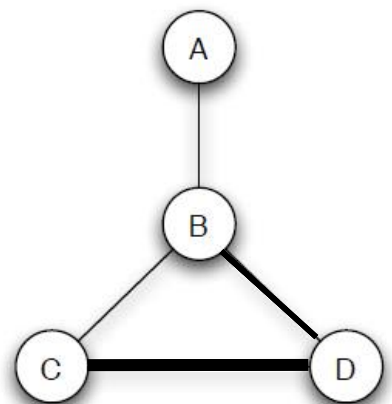
Un grafo es…

- Un grafo *G* es un conjunto de nodos y enlaces

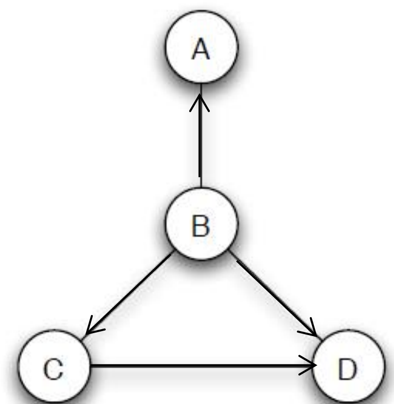


grafo simple
no-dirigido





Grafo pesado

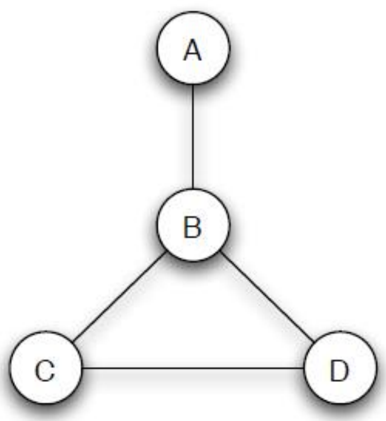


Grafo dirigido

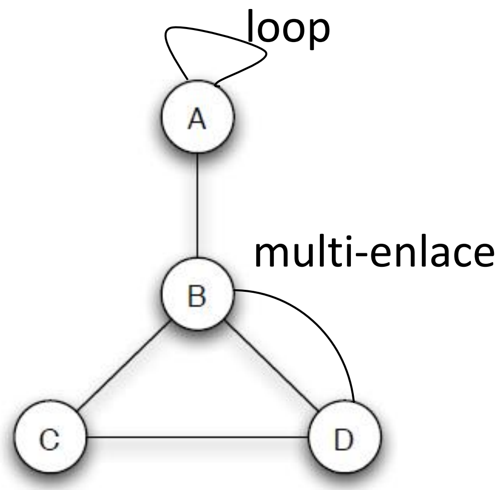
Grafo simple dirigido, ***G(N,E)***, es un par de conjuntos $\boldsymbol{N}\neq 0$ y $\boldsymbol{E}$. ***N*** es un conjunto de elementos $\boldsymbol{N}=\{n_1, n_2, \ldots, n_N\}$ llamados nodos o vértices. Los elementos de $\boldsymbol{E}=\{e_1, e_2, \ldots, e_M\}$ son pares ordenados de elementos distintos de ***N***, llamados enlaces.

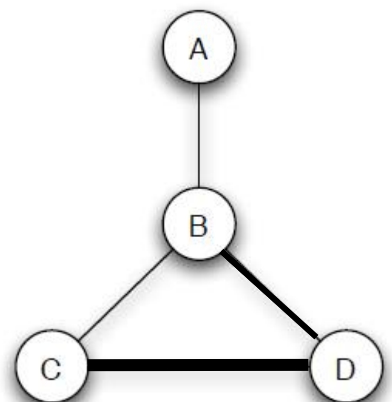
Un grafo es…

- Un grafo *G* es un conjunto de nodos y enlaces

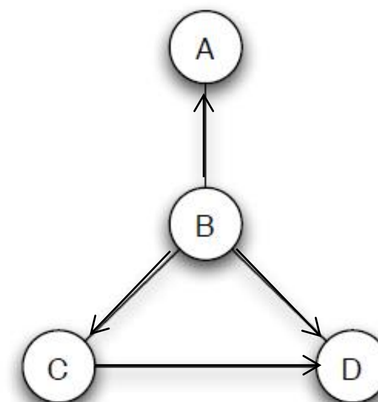


grafo simple
no-dirigido





Grafo pesado



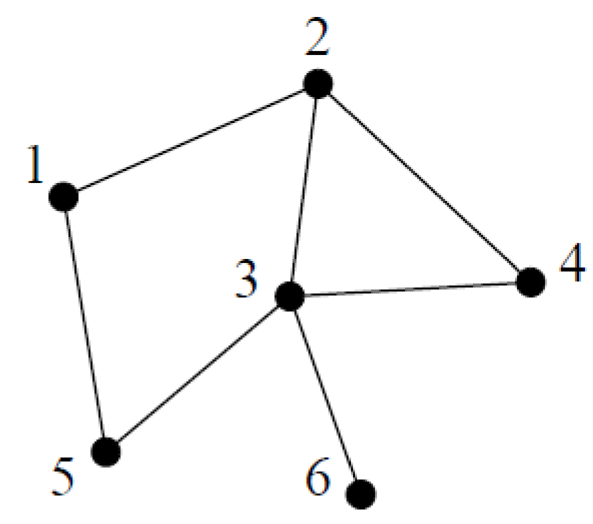
Grafo dirigido

Grafo pesado, ***G(N,E)***, es un par de conjuntos $\boldsymbol{N} \neq 0$ y ***E*** . ***N*** es un conjunto de elementos $\boldsymbol{N}=\{n_1, n_2, \ldots, n_N\}$ llamados nodos o vértices. Los elementos de $\boldsymbol{E}=\{e_1, e_2, \ldots, e_M\}$ son pares de elementos distintos de ***N***, llamados enlaces. Además existe la **función de peso** $\boldsymbol{w}:\boldsymbol{E} \times \mathbb{R}$

Cómo representar un grafo simple

Lista de enlaces

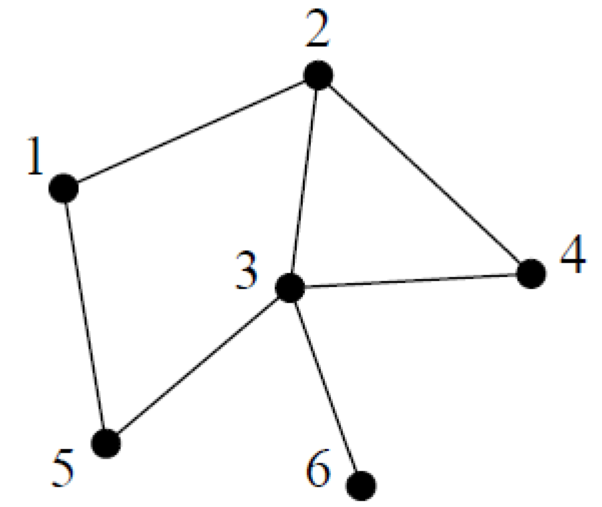
(1,2)
(1,5)
(2,3)
(2,4)
(3,4)
(3,5)
(3,6)



Cómo representar un grafo simple

Matriz de adyacencia

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



$A_{ij}=$ 1 si existe enlace entre nodos *i* y *j*
0 si no

A es una matriz **simétrica.**

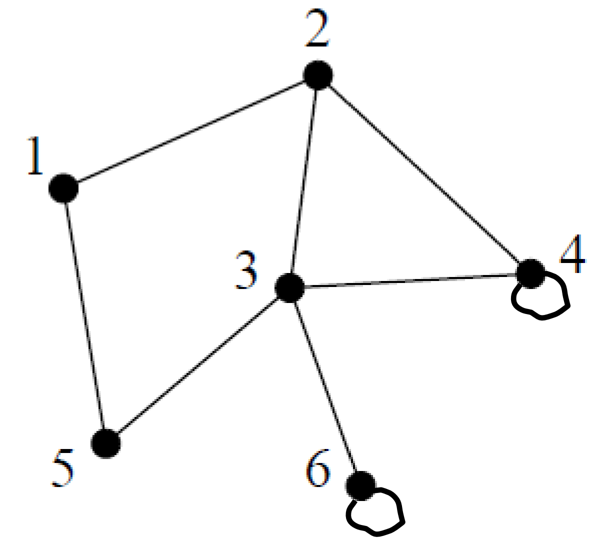
$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$$

$$A_{ij} = A_{ji}$$

Cómo representar un grafo con loops

Matriz de adyacencia

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$



$A_{ij}=$ 1 si existe enlace entre nodos *i* y *j*
0 si no

Los ***loops*** se corresponden con
$A_{ii} = 2$

A es una matriz **simétrica.**

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$$

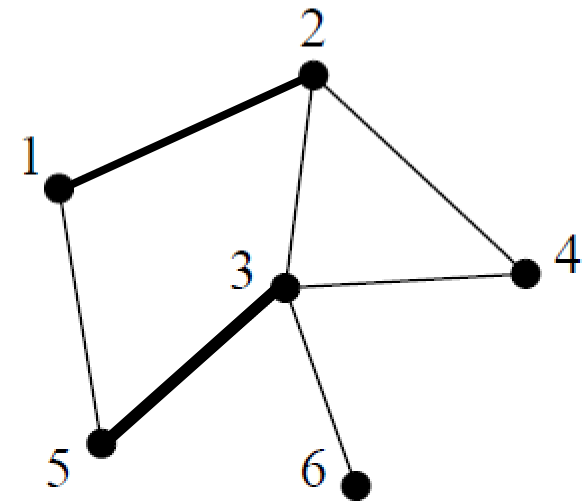
$$A_{ij} = A_{ji}$$

- Un enlace tipo *loop* tiene dos conexiones con el nodo-i
- Cada enlace aparece 2 veces en ***A***

Cómo representar un grafo pesado

Matriz de adyacencia

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



$A_{ij}=$ w_{ij} si existe enlace entre nodos *i* y *j*
0 si no

A es una matriz **simétrica.**

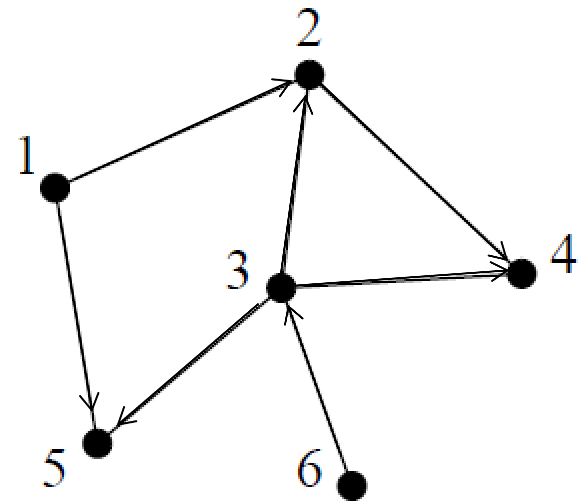
$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$

$A_{ij} = A_{ji}$

Cómo representar un grafo dirigido

Matriz de adyacencia

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

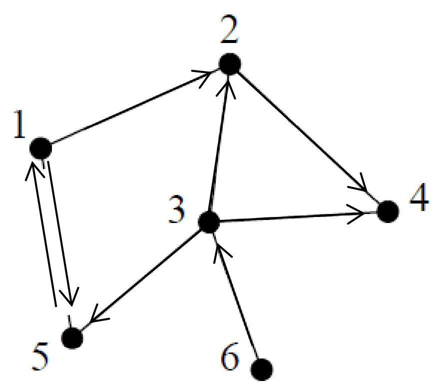


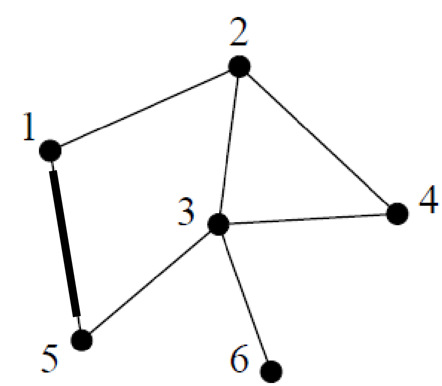
$A_{ij}=$ 1 si existe enlace que **llega a** ***i*** **desde** ***j***
0 si no

A <u>no es</u> una matriz **simétrica.**

Versión no-dirigida de grafo dirigido

¿Cuál es la version no-dirigida de un grafo dirigido?

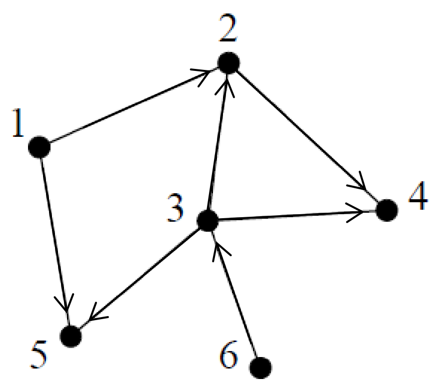




A $\qquad$ ***A'=A+A^T***

La red no-dirigida tiene menos información [N^2 vs N(N+1)/2 grados de libertad].
Existen otras maneras de *proyectar* recapitulando otros aspectos de la red dirigida…

Proyección co-citas de red dirigida



Coeficiente de **cocitación** entre nodos *i* y *j*:

- Número de nodos que tienen enlaces que apuntan a nodos *i* y *j* al mismo tiempo

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}A_{jk} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}(\boldsymbol{A}^T)_{kj}$$

$$C = AA^T$$

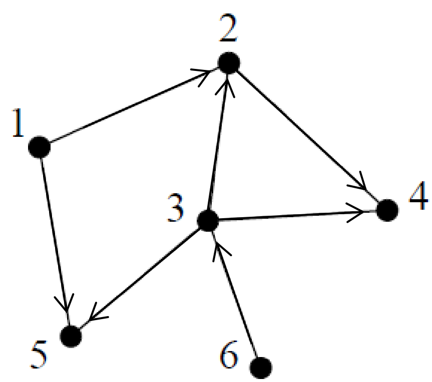
$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Notar que

$$C_{ii} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}A_{ik} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} \geq 0$$

C_{ii} = num_enlaces_entrantes = *in_degree* = k_{in}

Proyección co-citas de red dirigida



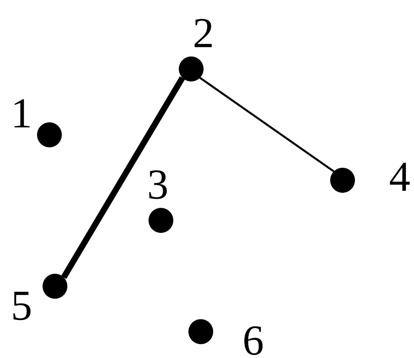
Coeficiente de **cocitación** entre nodos *i* y *j*:

- Número de nodos que tienen enlaces que apuntan a nodos *i* y *j* al mismo tiempo

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}A_{jk} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}(\boldsymbol{A}^T)_{kj}$$

$$C = AA^T$$

$$\tilde{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

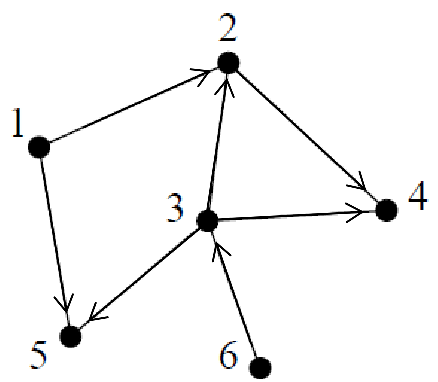


Puedo armar una red no-dirigida si considero

$$\tilde{C} = C - diag(C)$$

Red de cocitación: enlaces cuantifican noción de *similitud* inferida a partir de patrón de citas recibidas

Proyección acople bibliográfico



Coeficiente de **acople bibliográfico** entre nodos *i* y *j* :

Número de nodos referenciados, a la vez, por los nodos *i* y *j*

$$B_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ki} A_{kj} = \sum_{k=1}^{n} (\boldsymbol{A}^T)_{ik} A_{kj}$$

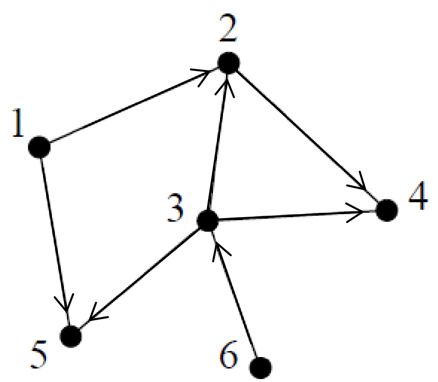
$$B = A^T A$$

$$B = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$B_{ii} = \sum_{k=1}^{n} A_{ki} A_{ki} = \sum_{k=1}^{n} A_{ki}$$

B_{ii} = num_enlaces_salientes = *out_degree* = k_{out}

Cómo representar un grafo dirigido



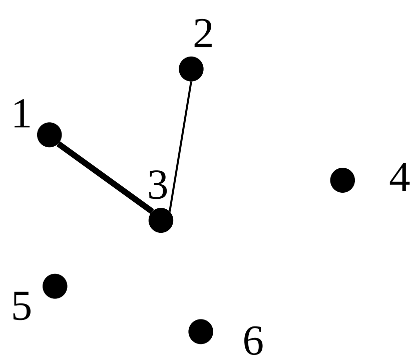
Coeficiente de **acople bibliográfico** entre nodos *i* y *j* :

Número de nodos referenciados, a la vez, por los nodos *i* y *j*

$$B_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ki} A_{kj} = \sum_{k=1}^{n} (\boldsymbol{A}^T)_{ik} A_{kj}$$

$$B = A^T A$$

$$B = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

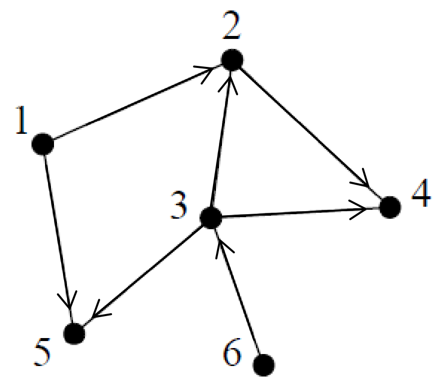


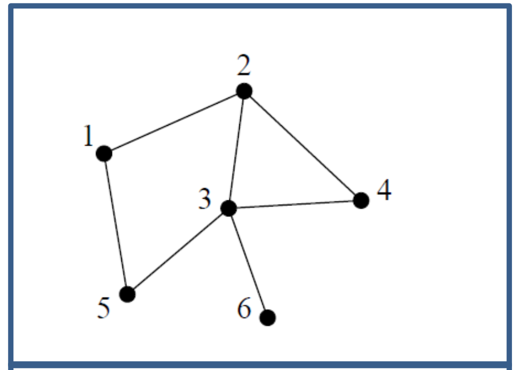
$$\tilde{B} = B - diag(B)$$

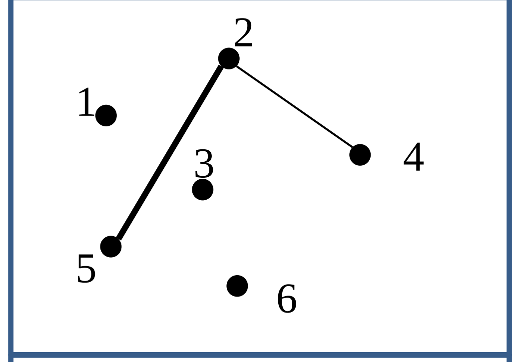
Red de acople bibliografico: noción de *similitud* inferida a partir de patrón de citas realizadas

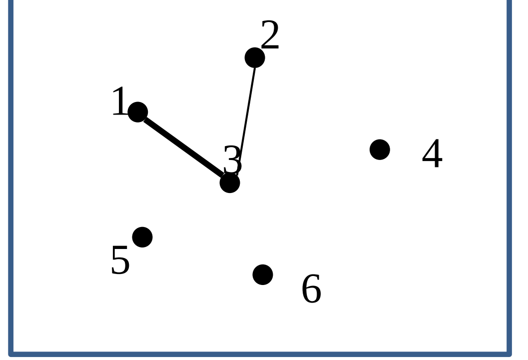
Cómo representar un grafo dirigido

¿Cuál es la version no-dirigida de un grafo dirigido?

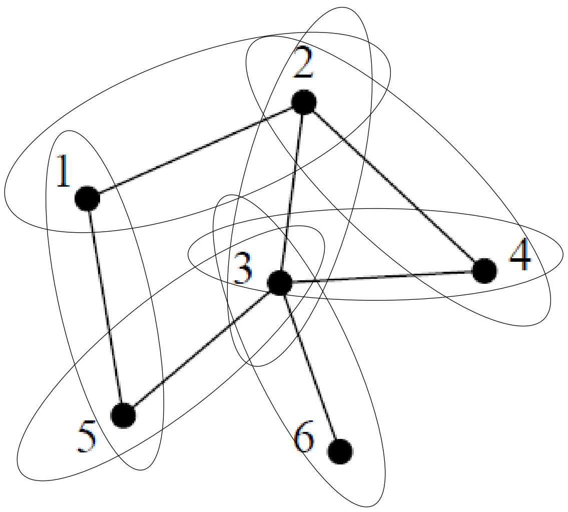








Hipergrafos



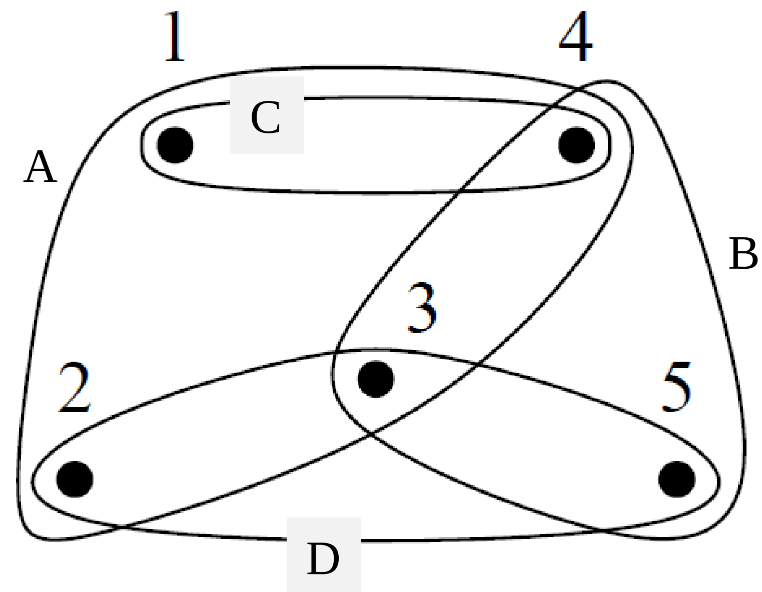
Cada enlace se corresponde con una asociación entre **pares** de vértices.

Es posible extender el concepto de enlace para conjunto s de más de dos elementos?

Hipergrafos

Descripción que involucre explicitar relaciones entre más de dos entidades (hiperenlaces)

- Concepto de familias
- Reacciones bioquímicas que involucren más de dos especies
- …



Matriz de incidencia

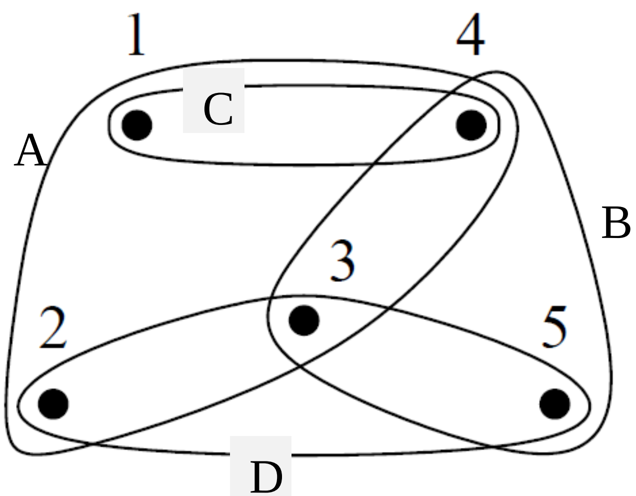
$$I = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \begin{array}{cccc} A & B & C & D \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}$$

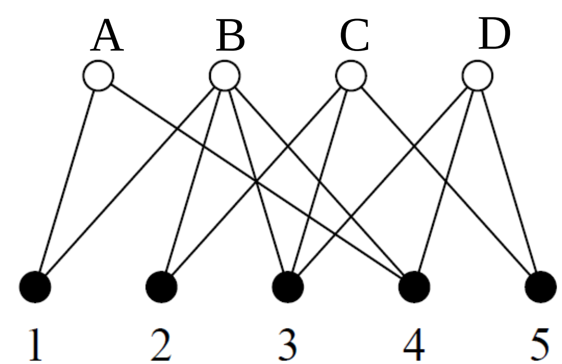
La matriz $\boldsymbol{I}$ involucra a dos tipos de entidades

$I_{i\alpha}$ 1 si nodo *i* esta incluido en conjunto α
0 si no

Hipergrafos <-> redes de filiación

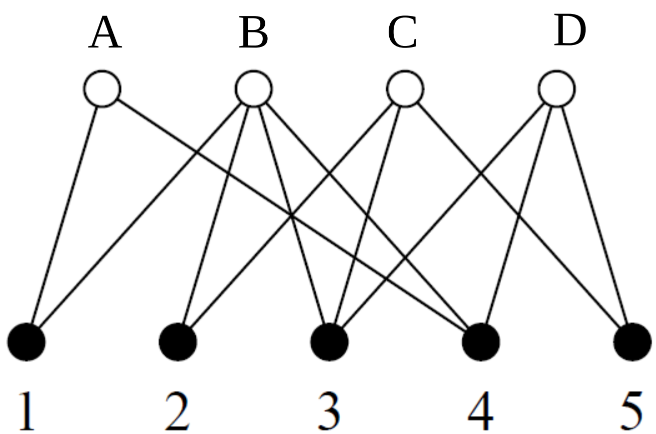
En gral la info contenida en hipergrafos puede representarse mediante **redes de filiación** compuesta por dos tipos de nodos: elementos e hiperenlaces que dan lugar a **focos**





$$
I = \begin{array}{c|cccc}
 & A & B & C & D \\
\hline
1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
2 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
3 & 0 & 1 & 1 & 1 \\
4 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
5 & 0 & 0 & 1 & 1
\end{array}
$$

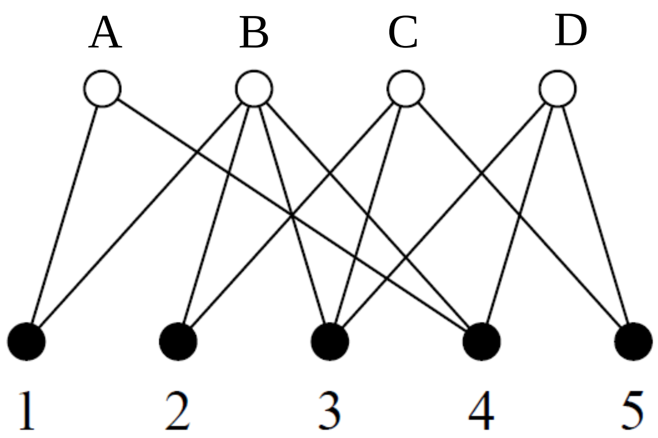
Red Bipartita



$$
\boldsymbol{A} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ A \\ B \\ C \\ D \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & A & B & C & D \end{array} \\
\begin{array}{ccccccccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{array}
\end{array}
$$

Red bipartita: grafo *G(V, A, E)* constituido por tres conjuntos: $V \neq 0, A \neq 0$ y E. Los elementos de $V=\{v_1, v_2, \ldots, v_N\}$ y $A=\{a_1, a_2, \ldots, a_L\}$ son distintos y se denominan nodos tipo-*V* y tipo-*A* de la red respectivamente. Los elementos de $E=\{e_1, e_2, \ldots, e_M\}$, denominados enlaces, son pares diferentes de elementos no-ordenados , uno de *tipo-V* otro de *tipo-A.*

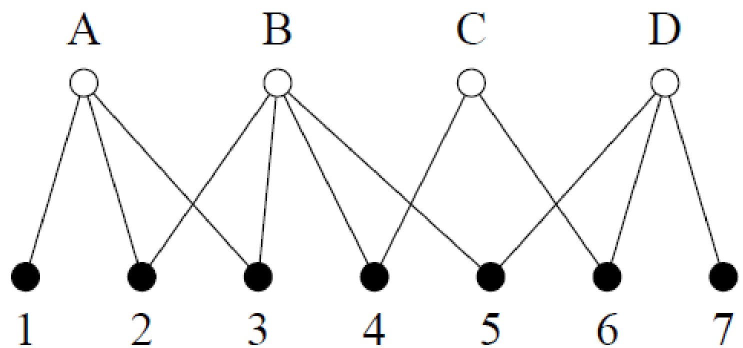
Red Bipartita

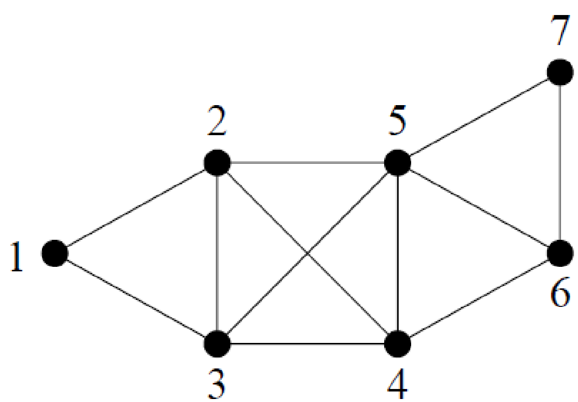


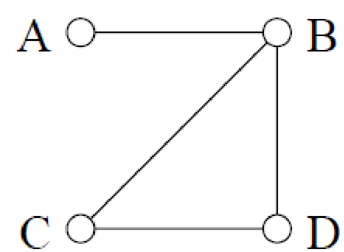
$$
\boldsymbol{A} = \begin{array}{c|ccccccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & A & B & C & D \\
\hline
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\
2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\
3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & I & \\
4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\
5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\
A & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\
B & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\
C & & & I^T & & & 0 & 0 & 0 & 0 \\
D & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0
\end{array}
$$

Red bipartita: grafo *G(V, A, E)* constituido por tres conjuntos: $V \neq 0, A \neq 0$ y E. Los elementos de $V=\{v_1, v_2, \ldots, v_N\}$ y $A=\{a_1, a_2, \ldots, a_L\}$ son distintos y se denominan nodos tipo-V y tipo-A de la red respectivamente. Los elementos de $E=\{e_1, e_2, \ldots, e_M\}$, denominados enlaces, son pares diferentes de elementos no-ordenados , uno de *tipo-V* otro de *tipo-A.*

Proyecciones de una Red Bipartita







$$P_{ij} = \sum_{\alpha=1}^{L} I_{i\alpha} I_{j\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{L} I_{i\alpha} \left(I^{T}\right)_{\alpha j}$$

$$P = I \, . \, I^{T}$$

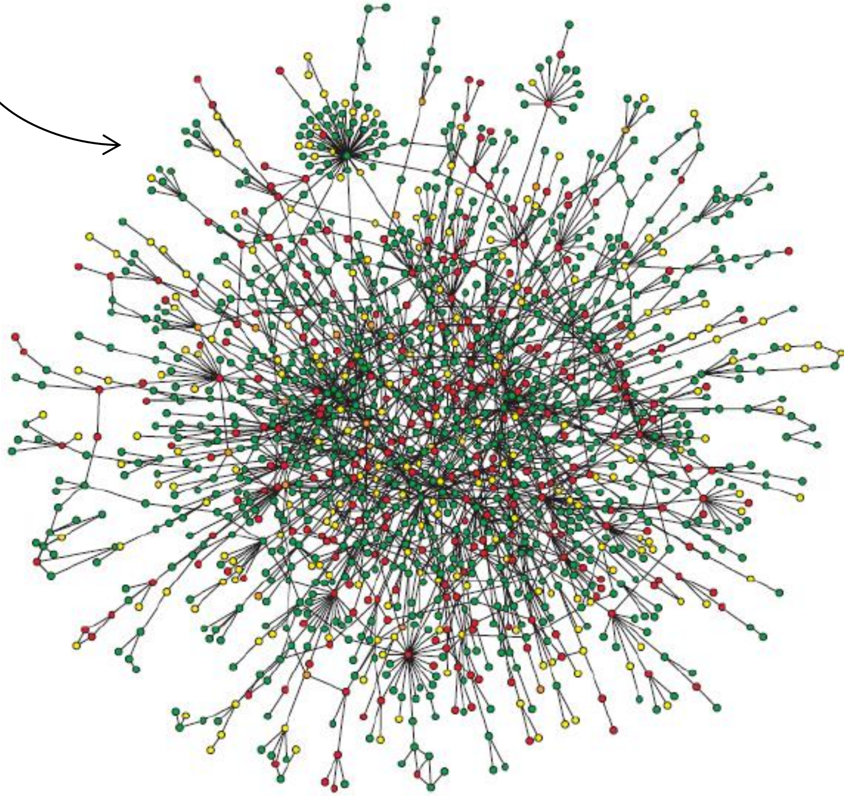
$$P'_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{N} I_{i\alpha} I_{i\beta} = \sum_{i=1}^{N} \left(I^{T}\right)_{\alpha i} I_{i\beta}$$

$$P' = I^{T} . \, I$$

Cual es el significado de P_{ij}?

Propiedades de redes complejas

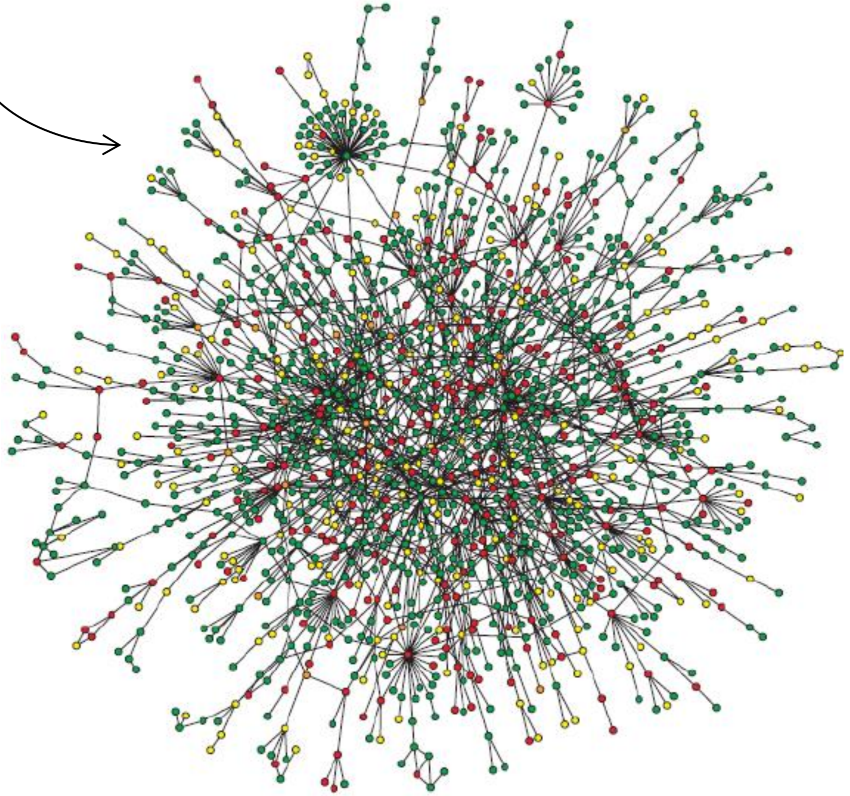
Propiedades cuantitativas para analizar y entender como están organizadas este tipo de *cosas*



- Distribución de grado
- Asortatividad/homofilia
- Clustering
- Motifs
- Modularidad
- Distancias
- Centralidad
- Eficiencia
- Robustez
- ….

Caracterizando redes complejas

Propiedades cuantitativas para analizar y entender como están organizadas este tipo de *cosas*

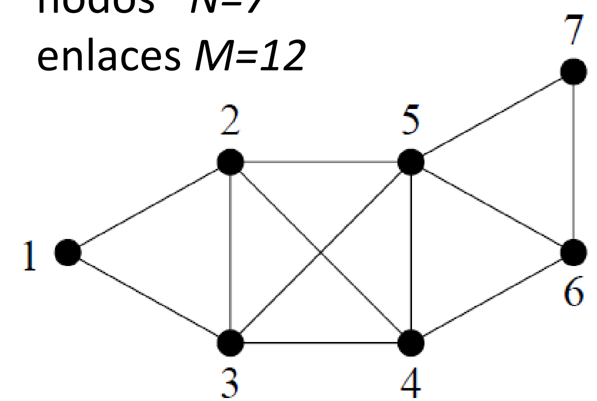


Grado

Grado de un nodo: número de enlaces incidentes

$$k_i = \sum_{j=1}^{N} A_{ij}$$

nodos *N=7*
enlaces *M=12*



Además, como cada *enlace* tiene dos extremos*:

$2M = \sum_{i=1}^{N} k_i$ por lo que $M = \frac{1}{2}\sum_{i,j} A_{ij}$

k_1=2, k_2=4, k_3=4 …

*2 * 12 = 2+4+4+4+5+3+2*

Grado medio

$$\langle k\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} k_i = \frac{2M}{N}$$

<k>=24/7=3.43

*Esto hace sentido aun para grafos con loops (si asignamos adyacencia 2 a elementos diagonales con loops)

Densidad

Máximo número de enlaces para un grafo de N vértices:

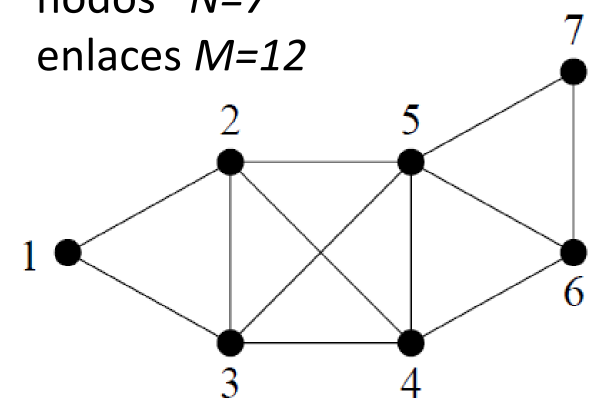
$$M_{max} = \binom{N}{2} = \frac{N * (N-1)}{2}$$

Densidad del grafo

$$\rho = \frac{M}{M_{max}}$$

$$= \frac{M}{\binom{N}{2}} = \frac{2 * M}{N * (N-1)} = \frac{< k >}{N-1}$$

nodos *$N=7$*
enlaces *$M=12$*



$k_1=2,\ k_2=4,\ k_3=4\ \ldots$

$<k>=24/7=3.43$

$M_{max}=21$

$\rho=0.67$

Redes densas o ralas

$$\rho = \frac{2 * M}{N * (N-1)} = \frac{< k >}{N-1}$$

Supongamos que analizamos una red que crece en el tiempo: N=N(t), M=M(t)

Una red es **rala** si $\underset{N \to \infty}{\rho(t) \to 0}$ Internet, WWW, redes de amistad

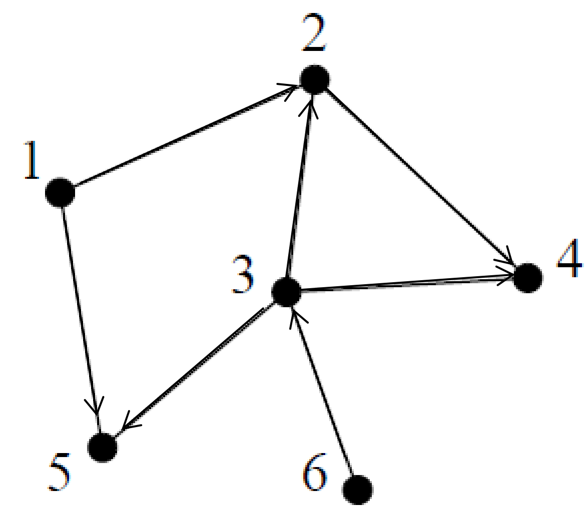
densa si $\underset{N \to \infty}{\rho(t) \to cte}$ redes tróficas

Grado de redes dirigidas

$$k_i^{\,in} = \sum_j A_{ij}$$

$$k_j^{\,out} = \sum_i A_{ij}$$

nodos $N=6$



Cada **enlace** tiene un *extremo-in* y otro *out*

$$M = \sum_{i=1}^{N} k_i^{\,in} = \sum_{i=1}^{N} k_i^{\,out} = \sum_{i,j} A_{ij}$$

$k^{in}_3 = 1$
$k^{out}_3 = 3$

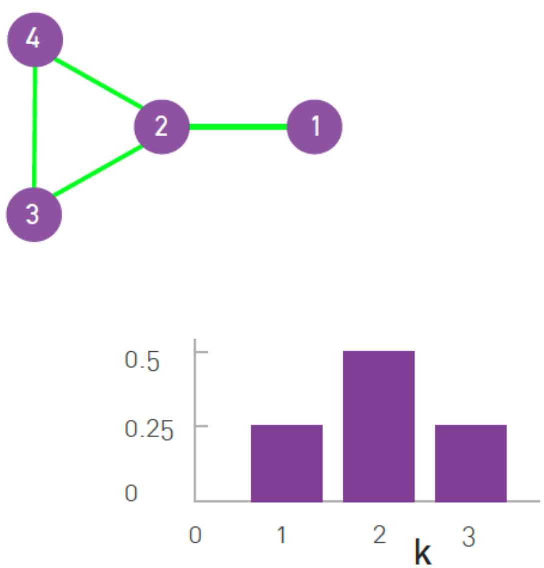
Grado medio

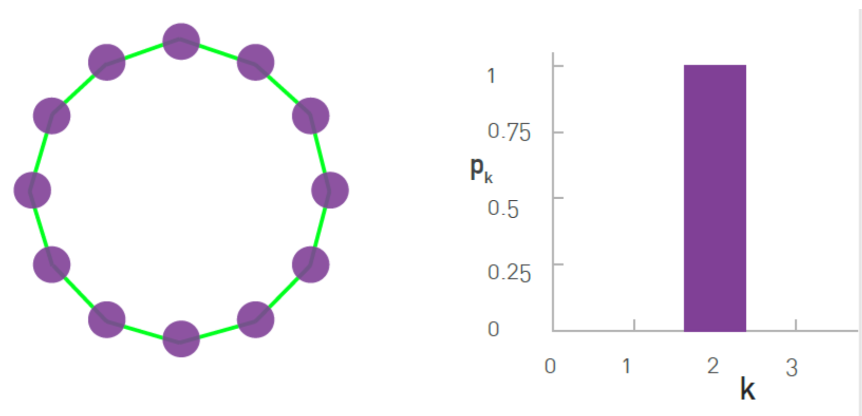
$$\left.\begin{array}{l} \langle k^{in} \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} k_i^{\,in} \\ \langle k^{out} \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} k_i^{\,out} \end{array}\right| = \frac{1}{N}\sum_{i,j} A_{ij} = \frac{M}{N}$$

Distribución de grado

La **distribución de grado**, p_k, de nodos de una red provee la probabilidad de que un nodo elegido al azar tenga grado k.

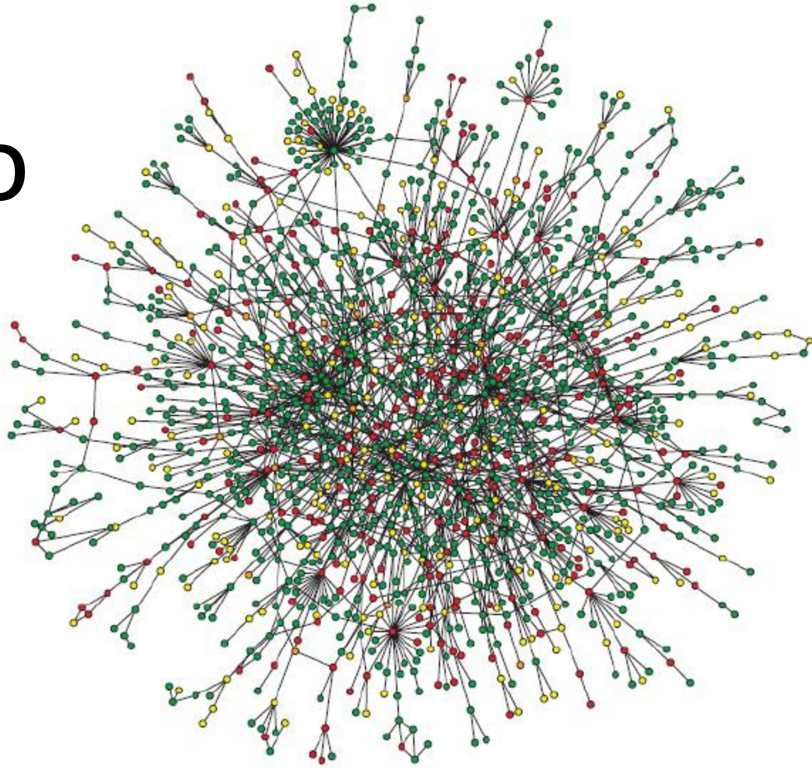
$$p_k = \frac{n_k}{N} \qquad\qquad \sum_{k}^{N} p_k = 1$$

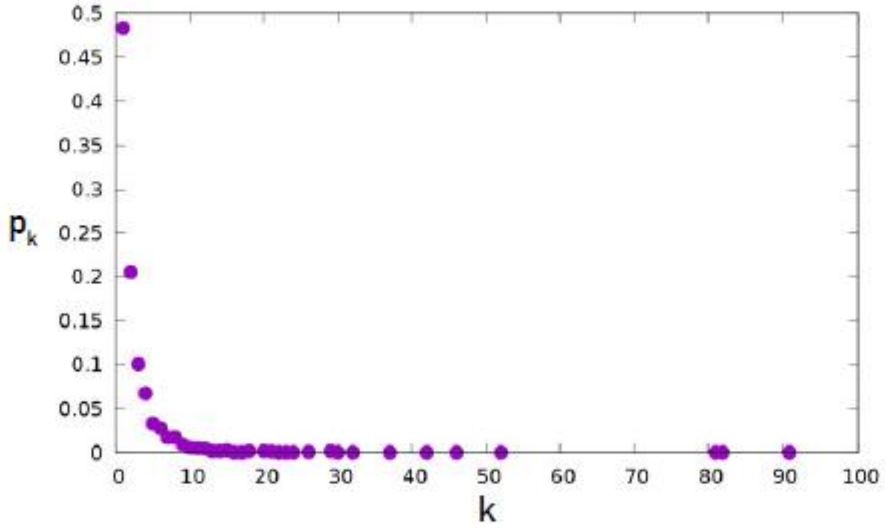


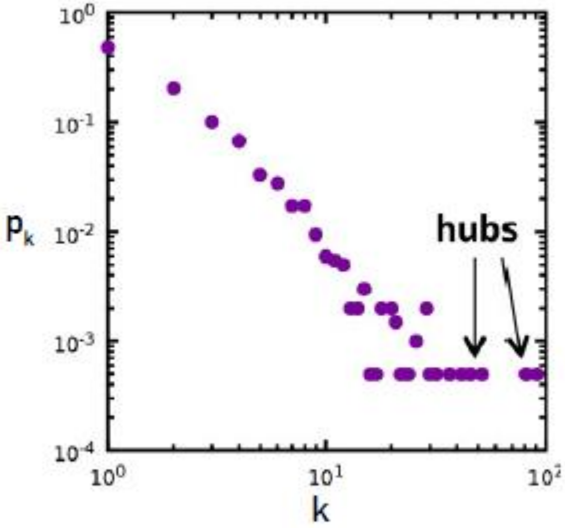


Distribución de grado

- En redes reales el grado puede variar muchísimo







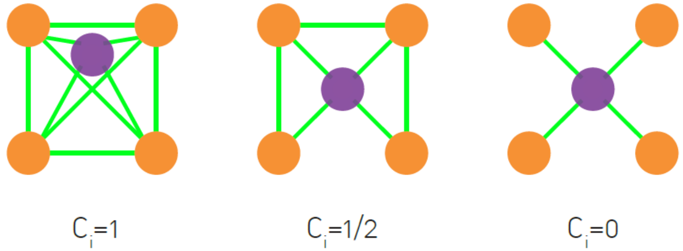
Coeficiente de *clustering*

En qué medida los vecinos de un nodo son vecinos entre sí ?

Coeficiente de clustering local:

pares de vecinos
enlazados (triángulos)

$$C_i = \frac{2L_i}{k_i(k_i-1)}$$



$$L_i = \sum_{\substack{j,k \\ i\neq j\neq k}} a_{ij}\, a_{ik} a_{jk} = \sum_{\substack{j,k\epsilon N(i) \\ j\neq k}} a_{jk}$$

- probabilidad que pares de vecinos del nodo i estén conectados
- Medida de densidad local

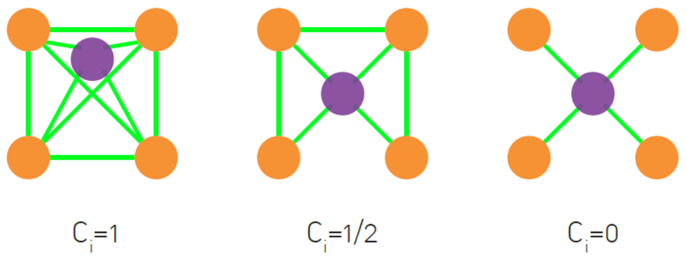
Coeficiente de *clustering*

En qué medida los vecinos de un nodo son vecinos entre sí ?

Coeficiente de clustering local:

pares de vecinos
enlazados (triángulos)

$$C_i = \frac{2L_i}{k_i(k_i - 1)}$$



En qué medida pares de vecinos de un nodo tomado al azar en la red son vecinos entre sí ?

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} C_i$$

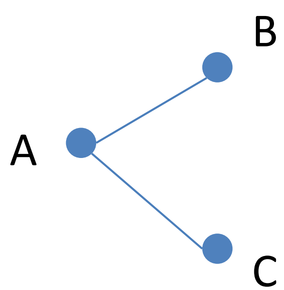
Coeficiente de *clustering*

Coeficiente de clustering global

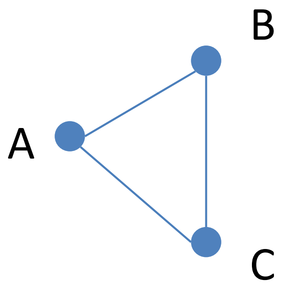
que tan probable es encontrar triangulos (a.k.a. clausura transitiva) en la red ?

$$C_{\Delta} = \frac{3 \times Number\ Of\ Triangles}{Number\ Of\ Connected\ Triples}$$

triplete conectado: conjunto de 3 nodos X, Y, Z donde X esta conectado con Y e Y con Z



BAC



BAC
ACB
CBA

Coeficiente de *clustering*

$$C_i = \frac{2L_i}{k_i(k_i - 1)}$$

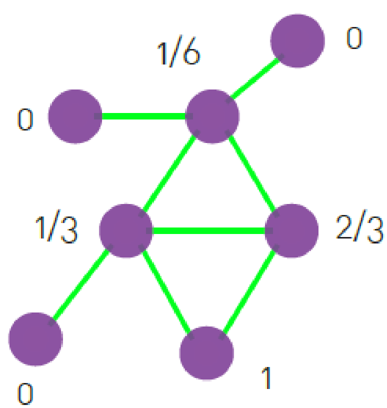
En qué medida los vecinos de un nodo i son vecinos entre sí ?

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} C_i$$

En qué medida pares de vecinos de un nodo tomado al azar en la red son vecinos entre sí ?

$$C_\Delta = \frac{3 \times Number\ Of\ Triangles}{Number\ Of\ Connected\ Triples}$$

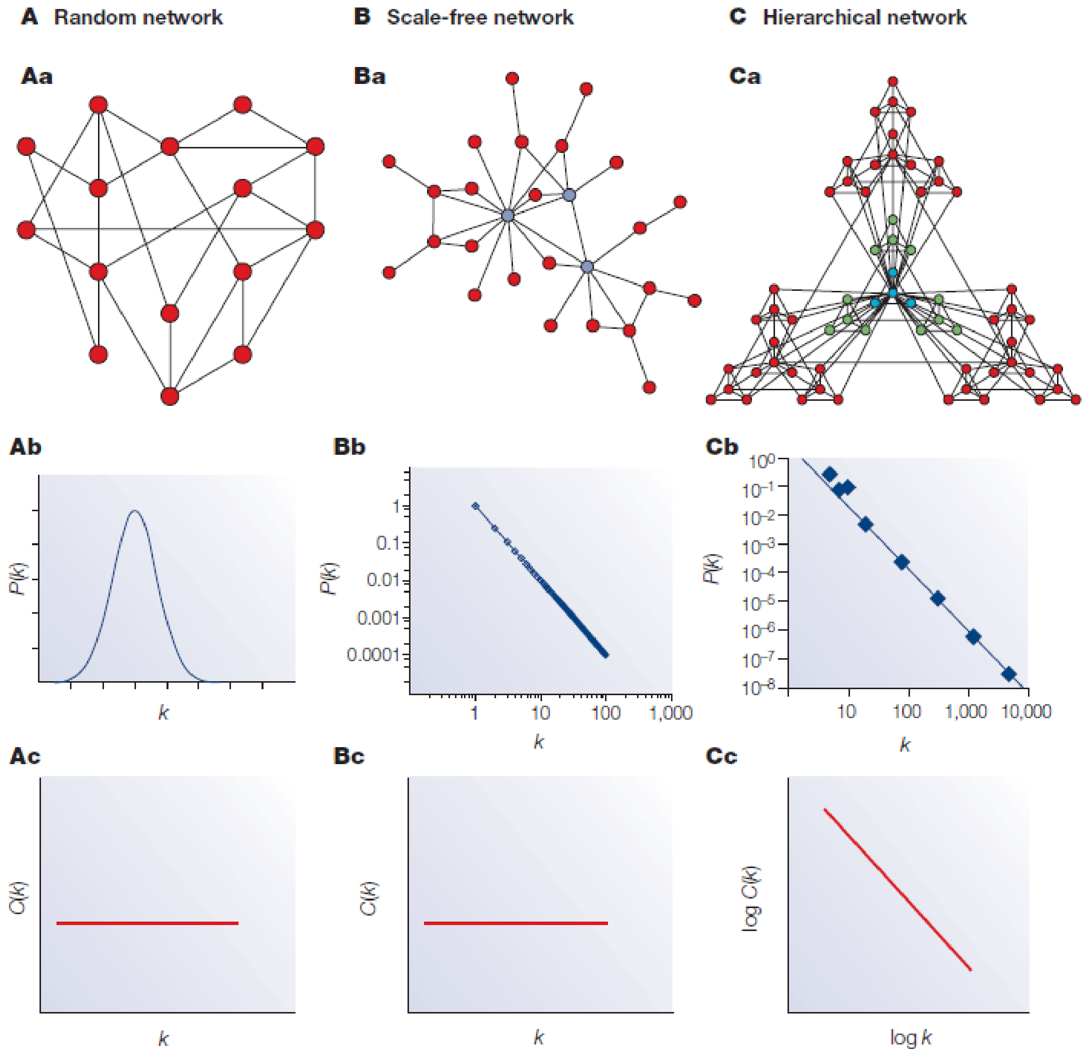
Que tan probable es encontrar triangulos (a.k.a. clausura transitiva) en la red ?



$$\langle C \rangle = \frac{13}{42} \approx 0.310$$

$$C_\Delta = \frac{3}{8} = 0.375$$

Ejemplo: Modelos de juguete



Barabasi 2004 Nat Gen Network Biology

Red aleatoria

- Nodos enlazados con proba *p*
- *P(k)* Poisson (cola exponencial)
- C(k) independiente de k

Red libre-de-escala

- Crecimiento de red: *rich gets richer*
- *P(k) ~ k^{-a}*
- Red no posee estructura modular
- C(k) independiente de k

Red jerarquica

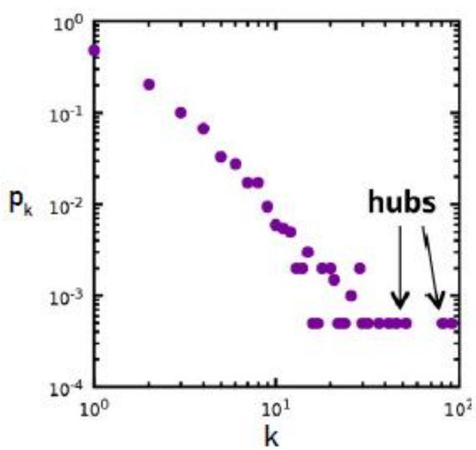
- Estructura jerarquica y modular
- *P(k) ~ k^{-a}*
- <C(k)>~0.6 (alto)
- C(k) ~ $k^{\sim 1}$
- Estructuras densas comunicadas por algunos hubs

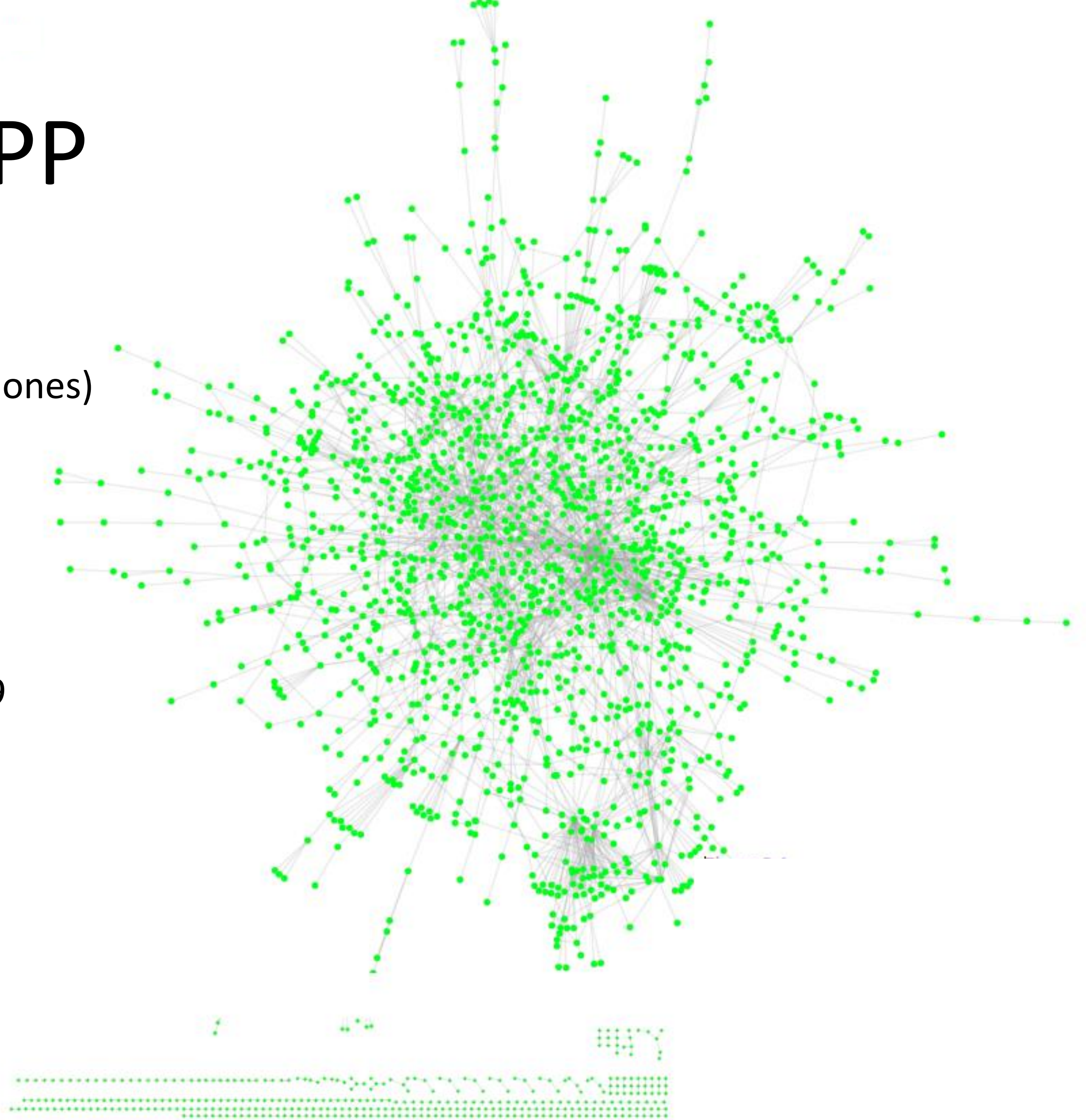
Ejemplo RIPP

N=2018 nodos (proteinas)
M=2930 enlaces (interacciones)

Grado medio

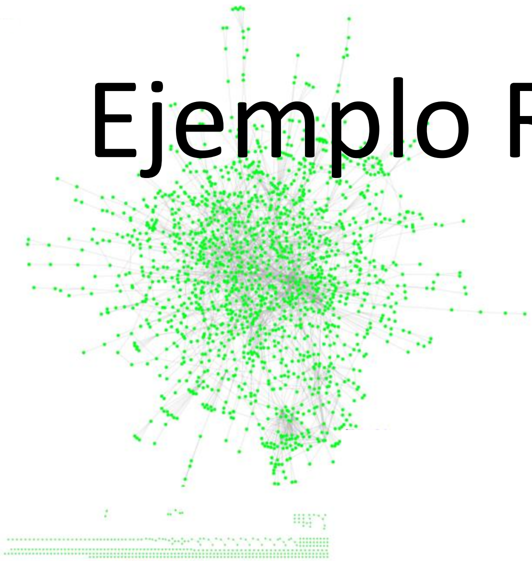
$$\langle k \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} k_i = \frac{2M}{N} = 2.9$$





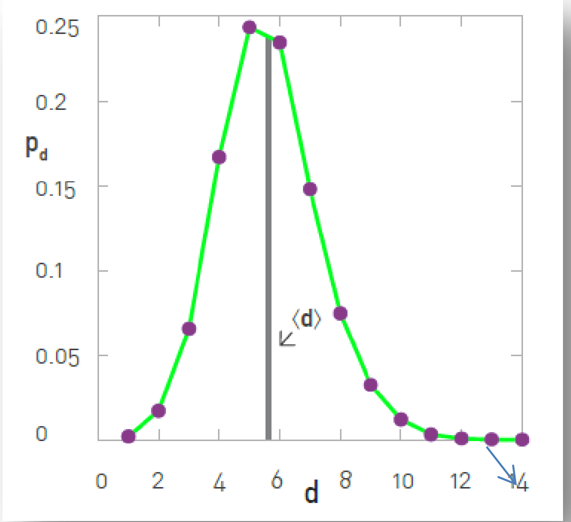
Usando BFS: componente gigante de 81% de nodos

Ejemplo RIPP



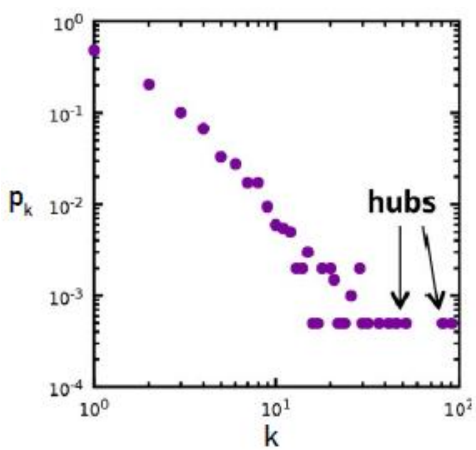
Distribucion de distancias

- distancia media = 5.61
- diámetro de la red=14



Grado medio

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} k_i = \frac{2M}{N} = 2.9$$



- $\langle C_i \rangle$=0.12
- C(k) decrece con k.
  - Nodos de bajo grado en entornos densos
  - hubs en entornos ralos
  - estructura jerárquica ...

Clustering local en función del grado de un nodo