Sho que se bolu

Resumen

Hola :p [1]

Objetivos

Índice

1.

2. Fundamento Teórico

Se presenta el marco teórico del que se basan las Redes neuronales profundas, se bordan las teorías principales para el desarrollo de estas como lo son la Teoría de Grafos, la Teoría de Redes, algunas estructuras importantes para el modelado de este tipo de redes.

2.1. Teoría de Grafos

2.1.1. ¿Qué es la teoría de grafos?

La teoría de grafos es una rama de las matemáticas que estudia las propiedades de sistemas complejos modelados mediante estructuras matemáticas llamadas **grafos**. Estas estructuras se utilizan para representar relaciones entre objetos.

Un grafo está compuesto por:

- Nodos: representan los objetos individuales.
- Enlaces: representan relaciones o conexiones entre los objetos.

Esta teoría tiene aplicaciones fundamentales en informática (redes de computadoras), biología (como redes metabólicas o neuronales), y especialmente en inteligencia artificial, se utiliza para modelar redes neuronales.

Origen histórico. La teoría de grafos se originó en 1736 con el trabajo de Leonard Euler sobre el problema de los puentes de Königsberg. Este fue el primer problema formalizado usando un grafo y marcó el inicio de esta área.

2.1.2. Problema principal

El objetivo principal de la teoría de grafos es representar, analizar y resolver relaciones entre pares de elementos. Algunos problemas clásicos incluyen:

- **Camino más corto:** ¿Cuál es la ruta más eficiente entre dos nodos?
- **Conectividad:** ¿Qué nodos están conectados entre sí directa o indirectamente?
- **Flujo en redes:** ¿Cuál es la máxima cantidad de flujo (información, energía, etc.) que se puede transmitir de un nodo a otro?
  - Se modela asignando capacidades a los enlaces y utilizando algoritmos como Ford-Fulkerson.
- **Detección de ciclos y árboles:**
  - **Ciclo:** Secuencia de enlaces que comienza y termina en el mismo nodo.
  - **Árbol:** Grafo conexo sin ciclos, que conecta todos los nodos con el mínimo número de enlaces ($n-1$ para n nodos).

2.1.3. Conceptos clave

Concepto	Descripción
Grafo dirigido	Los enlaces tienen una dirección (de un nodo a otro).
Grafo no dirigido	Los enlaces no tienen dirección, la relación es mutua.
Camino	Secuencia de nodos conectados por enlaces.
Ciclo	Camino cerrado donde el nodo inicial y final coinciden.
Grado (degree)	Número de enlaces conectadas a un nodo (grado de entrada y salida si es dirigido).
Conectividad	Existencia de caminos entre nodos en el grafo.
Subgrafo	Cualquier subconjunto de nodos y enlaces que forma un grafo.
Árbol	Grafo conexo sin ciclos. Si tiene n nodos, tiene $n-1$ enlaces.

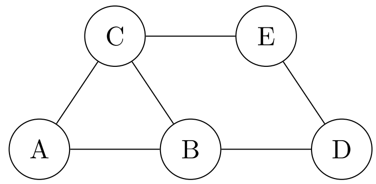


Figura 1: Ejemplo de grafo no dirigido. Contiene un ciclo entre A, B y C.

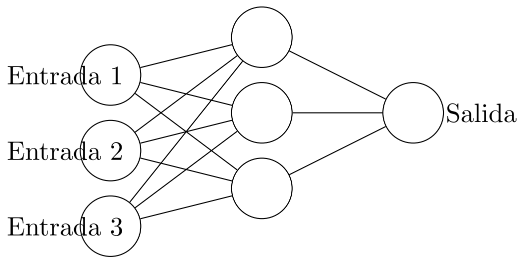


Figura 2: Red neuronal representada como grafo dirigido.

2.1.4. Métricas estadísticas y estructurales

Estas métricas permiten analizar cuantitativamente las propiedades del grafo. Son esenciales para entender su estructura global y la importancia de sus componentes.

Métrica	**Significado**
Grado medio ($\langle k \rangle$)	Promedio de conexiones por nodo.
Distribución de grados	Probabilidad de que un nodo tenga cierto número de conexiones.
Centralidad	Mide la importancia de un nodo. Tipos: ▪ **Degree centrality:** número de conexiones. ▪ **Closeness:** inverso de la distancia promedio al resto. ▪ **Betweenness:** cuántos caminos más cortos pasan por el nodo.
Diámetro	Máxima distancia (camino más corto) entre dos nodos cualesquiera.
Longitud promedio del camino	Promedio de distancias más cortas entre todos los pares de nodos.
Densidad	Relación entre el número de enlaces existentes y el número máximo posible.
Coeficiente de agrupamiento	Mide cuán conectados están los vecinos de un nodo (transitividad local).

2.1.5. Aplicación a redes neuronales

Las redes neuronales artificiales pueden modelarse como grafos dirigidos con peso:

- Las **neuronas** son los **nodos** del grafo.
- Las **conexiones sinápticas** son los **enlaces dirigidos** con un **peso** asociado, que representa la fuerza de la conexión.

Este enfoque permite aplicar herramientas de teoría de grafos para analizar, optimizar y entender el comportamiento estructural de las redes neuronales.

Ejemplos de aplicaciones

- **Visualización y análisis estructural:** identificar cuellos de botella, redundancias y zonas críticas.
- **Análisis de capas:** usando conectividad, centralidad y otras métricas para caracterizar cada capa de la red.
- **Redes neuronales recurrentes (RNN):** se modelan naturalmente como grafos con ciclos, debido a su retroalimentación temporal.
- **Interpretabilidad:** detectar nodos influyentes o rutas críticas usando centralidades y flujo.
- **Graph Neural Networks (GNN):** modelos de aprendizaje profundo que operan directamente sobre estructuras de grafos, utilizados en química computacional, redes sociales, procesamiento de lenguaje natural, entre otros.

2.2. Redes libres de escala (modelo de Barabási–Albert)

Las redes libres de escala son un tipo de red compleja caracterizada porque la distribución de grados de sus nodos sigue una ley de potencias, es decir, la probabilidad de que un nodo tenga k conexiones es proporcional a $k^{-\gamma}$, donde γ suele estar entre 2 y 3:

$$P(k) \sim k^{-\gamma}$$

Esto implica que la mayoría de los nodos tienen pocos enlaces, pero unos pocos (*hubs*) tienen muchos. Esta característica contrasta con redes aleatorias como las de Erdős–Rényi, donde la distribución de grados es de tipo Poisson.

Modelo de Barabási–Albert

Propuesto en 1999 por Albert-László Barabási y Réka Albert [1], el modelo BA simula el crecimiento de una red con las siguientes reglas:

- **Crecimiento:** La red comienza con un pequeño conjunto de nodos. En cada paso del tiempo, se agrega un nuevo nodo con un número fijo de enlaces (m) que se conectan a nodos ya existentes.
- **Conectividad preferencial:** Los nuevos nodos tienen mayor probabilidad de conectarse a nodos que ya poseen un alto número de conexiones. Formalmente, la probabilidad de conectar con un nodo i es proporcional a su grado k_i:
$$\Pi(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j}$$

Este mecanismo genera automáticamente una red con distribución de grados en forma de ley de potencias.

Ventajas del modelo Barabási–Albert respecto a otros modelos

Comparado con modelos clásicos como el modelo de Erdős–Rényi (red aleatoria) o las redes regulares (como cuadrículas o anillos), el modelo BA presenta varias ventajas al modelar sistemas reales:

- **Realismo estructural:** La ley de potencias en la distribución de grados reproduce fielmente estructuras observadas en redes reales como Internet, redes sociales, redes biológicas y de transporte.
- **Presencia de hubs:** La generación natural de nodos altamente conectados permite modelar nodos críticos en sistemas reales (por ejemplo, aeropuertos grandes, personas influyentes, servidores principales, etc.).
- **Robustez topológica:** Las redes BA son resistentes a fallos aleatorios de nodos, lo que las hace útiles para modelar sistemas tolerantes a fallos (como redes distribuidas o neuronales).

- **Pequeño mundo emergente:** Aunque el modelo no impone explícitamente una estructura de "mundo pequeño", suele generar redes con baja longitud de camino promedio, lo que favorece una rápida propagación de información.
- **Simplicidad y escalabilidad:** Su implementación es simple y eficiente computacionalmente, lo que lo hace práctico para simular redes grandes.
- **Aplicabilidad en aprendizaje automático:** Las redes con hubs ofrecen estructuras jerárquicas que pueden ser aprovechadas por modelos como GNNs para mejorar la propagación y agregación de información.

Propiedades adicionales de las redes libres de escala

- **Emergencia de hubs:** Pocos nodos muy conectados, esenciales para la conectividad global.
- **Robustez estructural:** Resistentes a la eliminación aleatoria de nodos, pero vulnerables a ataques dirigidos a hubs.
- **Pequeño diámetro:** La mayoría de los nodos pueden alcanzarse con pocas conexiones.
- **Alta heterogeneidad:** Distribución desigual del grado de los nodos.

Ejemplos en el mundo real

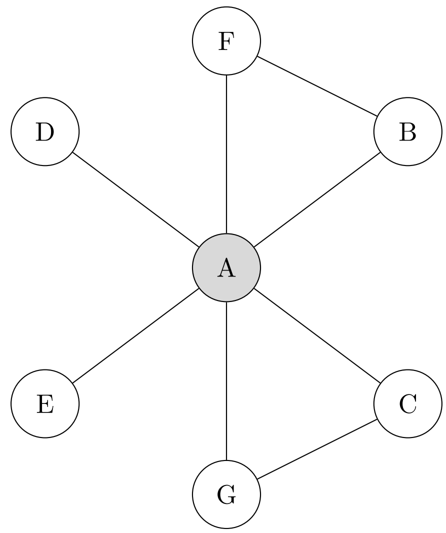
- Internet (a nivel de routers o dominios).
- Redes sociales (algunos usuarios tienen millones de conexiones).
- Redes de transporte aéreo.
- Redes de citaciones académicas.
- Redes biológicas como redes metabólicas.

Aplicación a redes neuronales y GNN

En el contexto de redes neuronales, el análisis estructural de la arquitectura puede beneficiarse del modelo de redes libres de escala:

- Las **Graph Neural Networks (GNN)** son capaces de operar sobre grafos arbitrarios, lo que las hace ideales para trabajar con redes complejas como las libres de escala.
- Las GNN pueden explotar la estructura jerárquica de los hubs para mejorar la eficiencia en la propagación de información.
- Redes neuronales profundas presentan propiedades de conectividad similares a las redes libres de escala.

Visualización del modelo BA



En este grafo, el nodo A es un hub: tiene muchas más conexiones que el resto, lo cual es característico del modelo.

Las redes libres de escala representan una clase fundamental de redes complejas que se encuentran en numerosos sistemas naturales y artificiales. El modelo de Barabási–Albert provee una base simple para modelar este tipo de estructuras. En el análisis de arquitecturas neuronales y el diseño de algoritmos de aprendizaje automático sobre grafos, este modelo resulta esencial.

3.

4. Conclusiones

Referencias

[1] Albert-László Barabási and Réka Albert. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 286(5439): 509–512, 1999.