

Aprendizaje Automatico con Grafos

Tópicos Avanzados en Analítica
Maestría en Analítica para la Inteligencia de Negocios

Sergio Alberto Mora Pardo - H2 2023

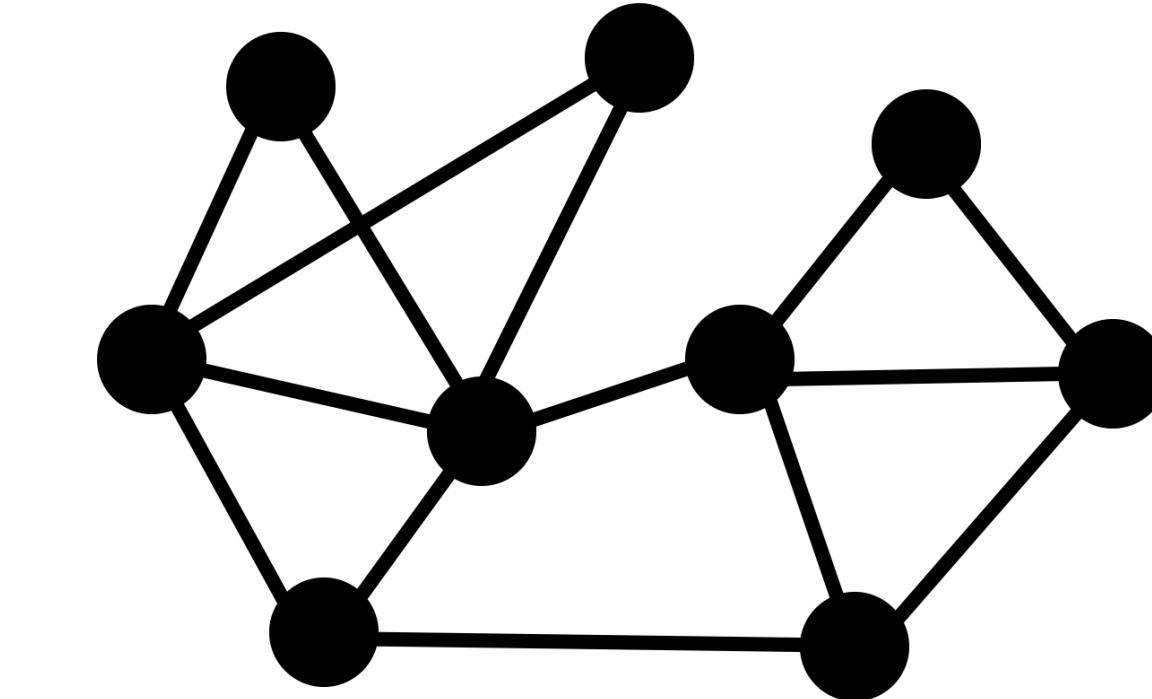
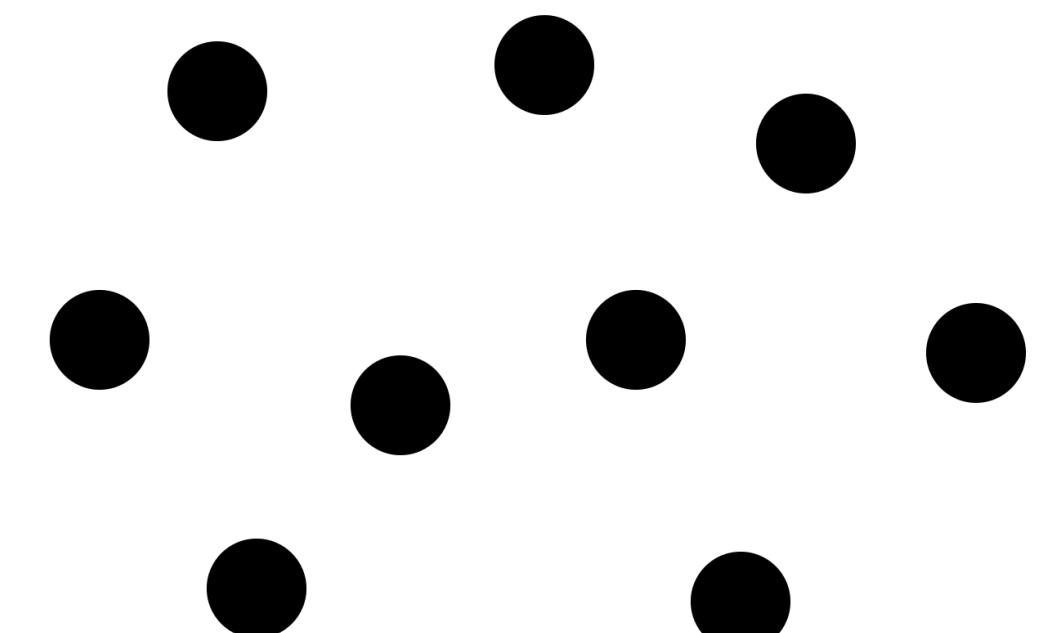
Intro to Graph

Intro to Graph

Concept

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.



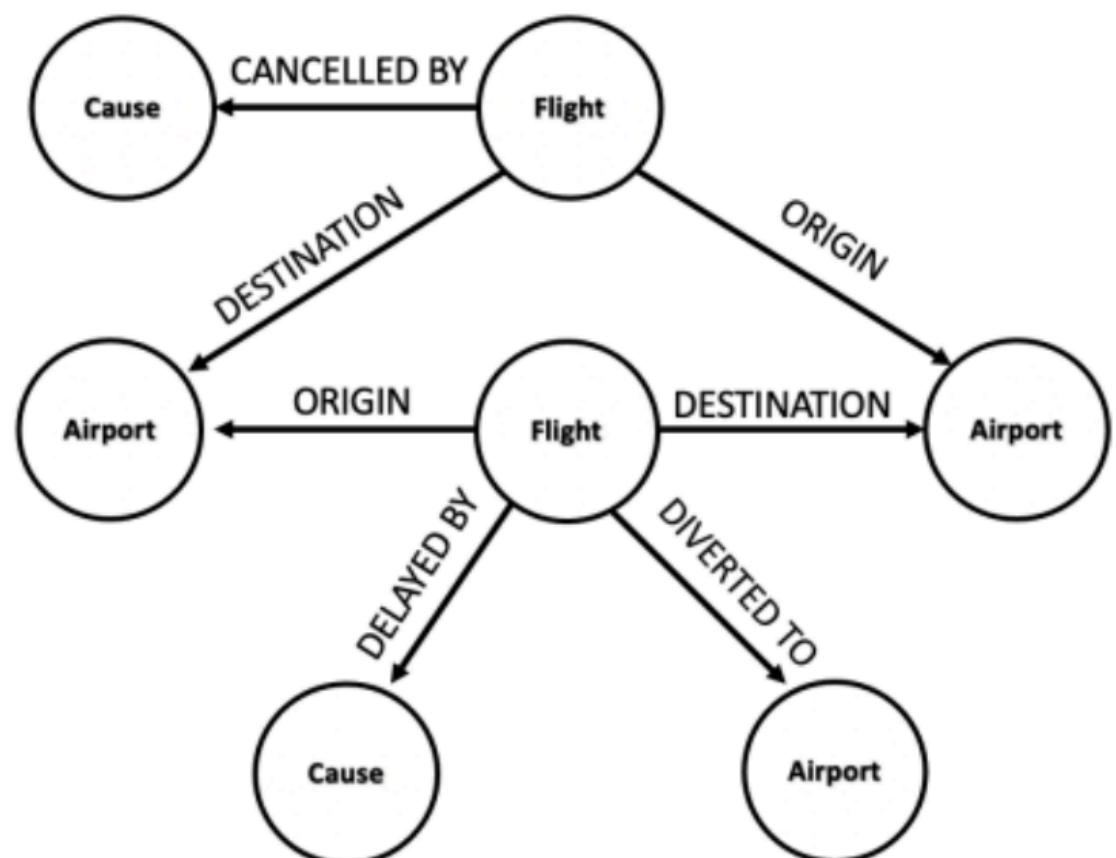
Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Grafos de eventos



Redes Computacionales



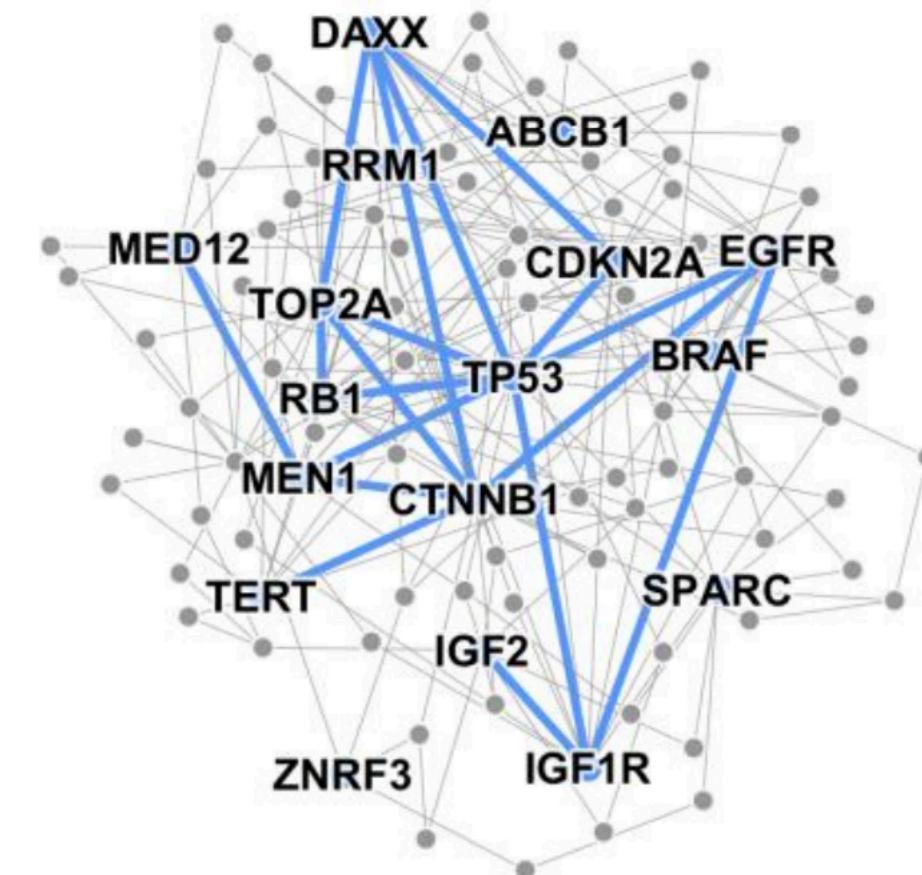
Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

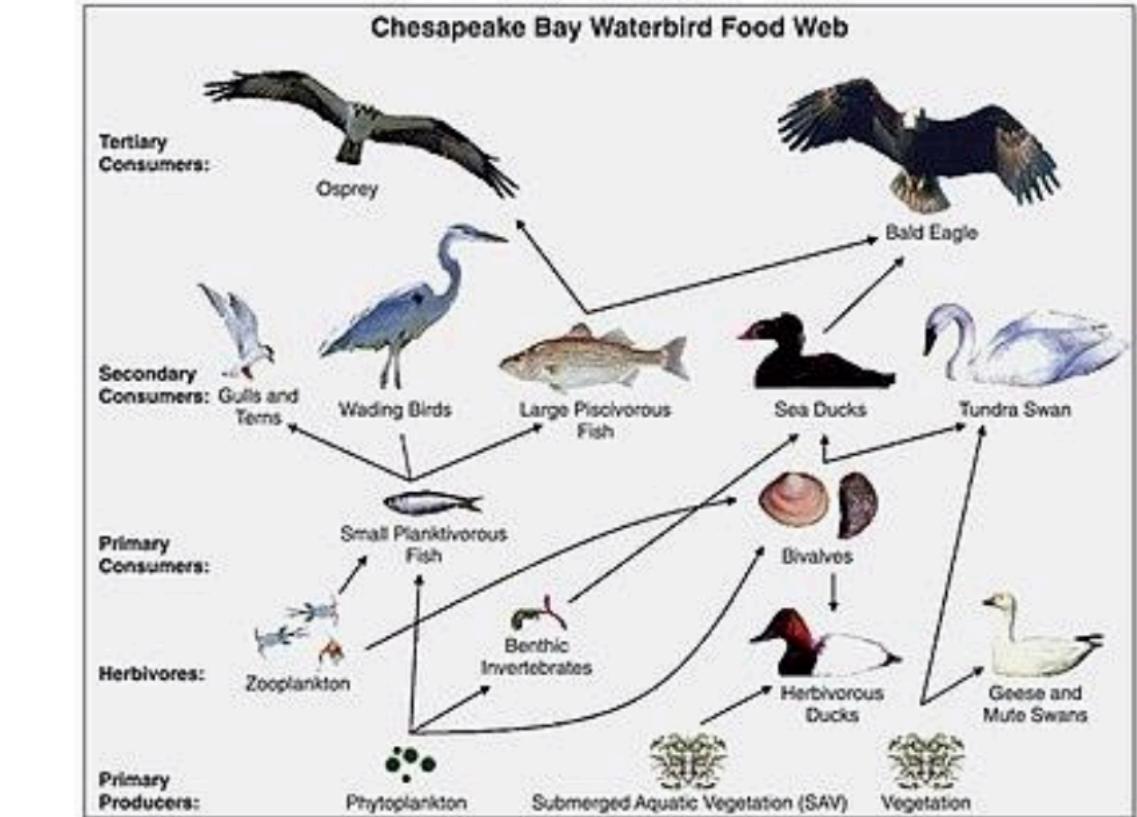
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Disease Pathways



Food Webs



Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Particle Networks



Underground Networks



Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

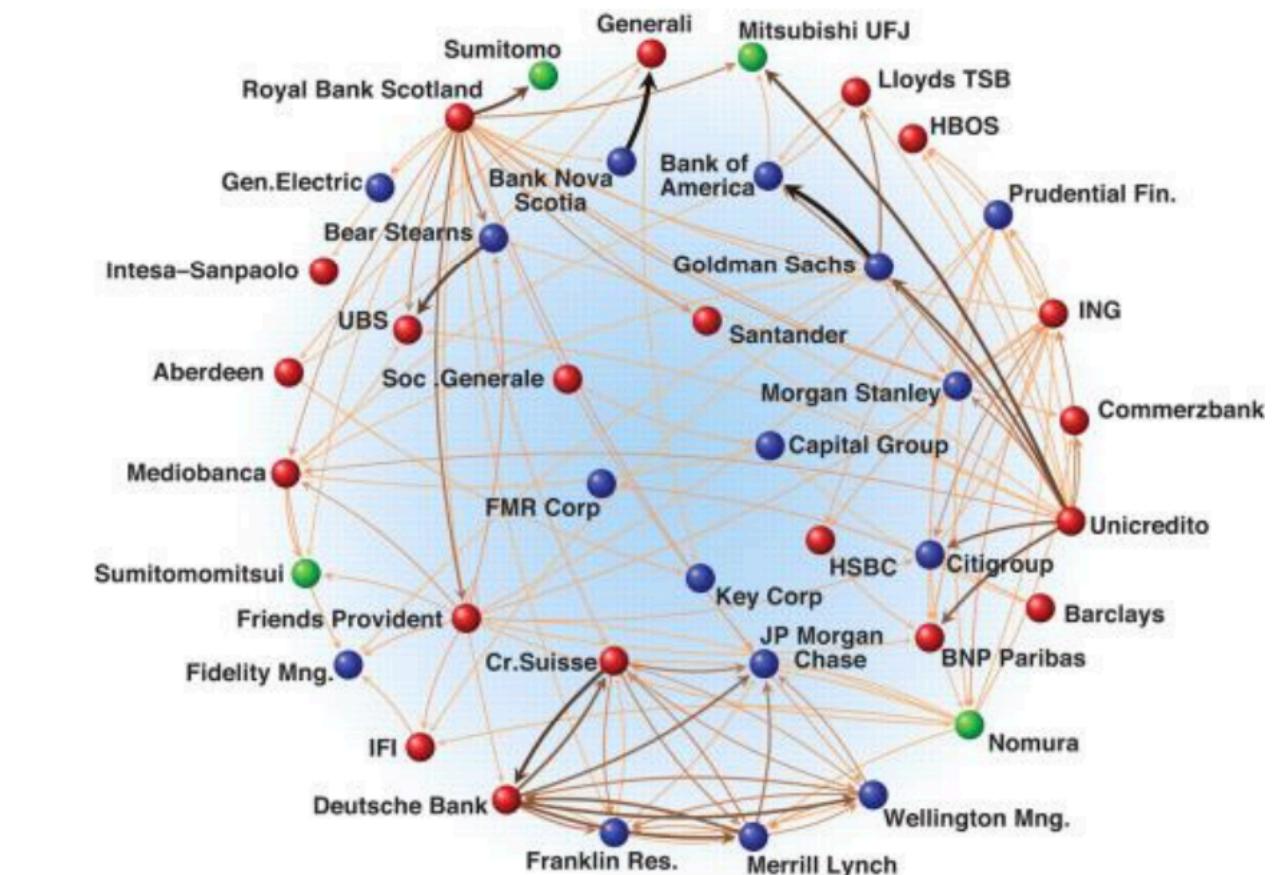
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Social Networks



Economic Networks



Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

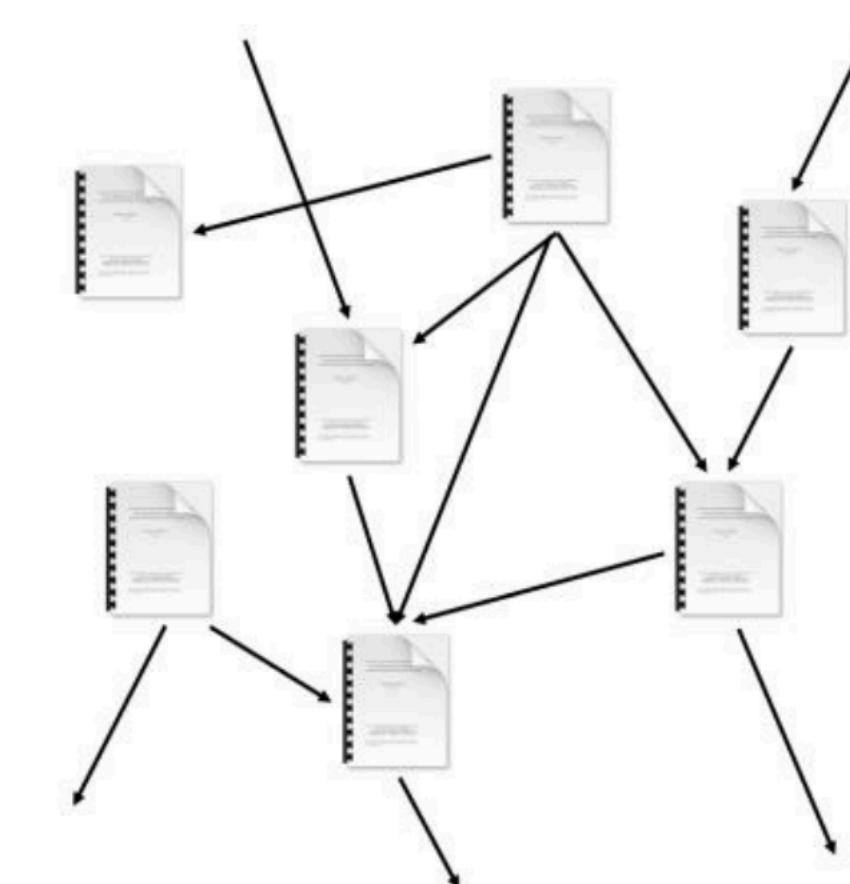
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Communication Networks



Citation Networks



Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

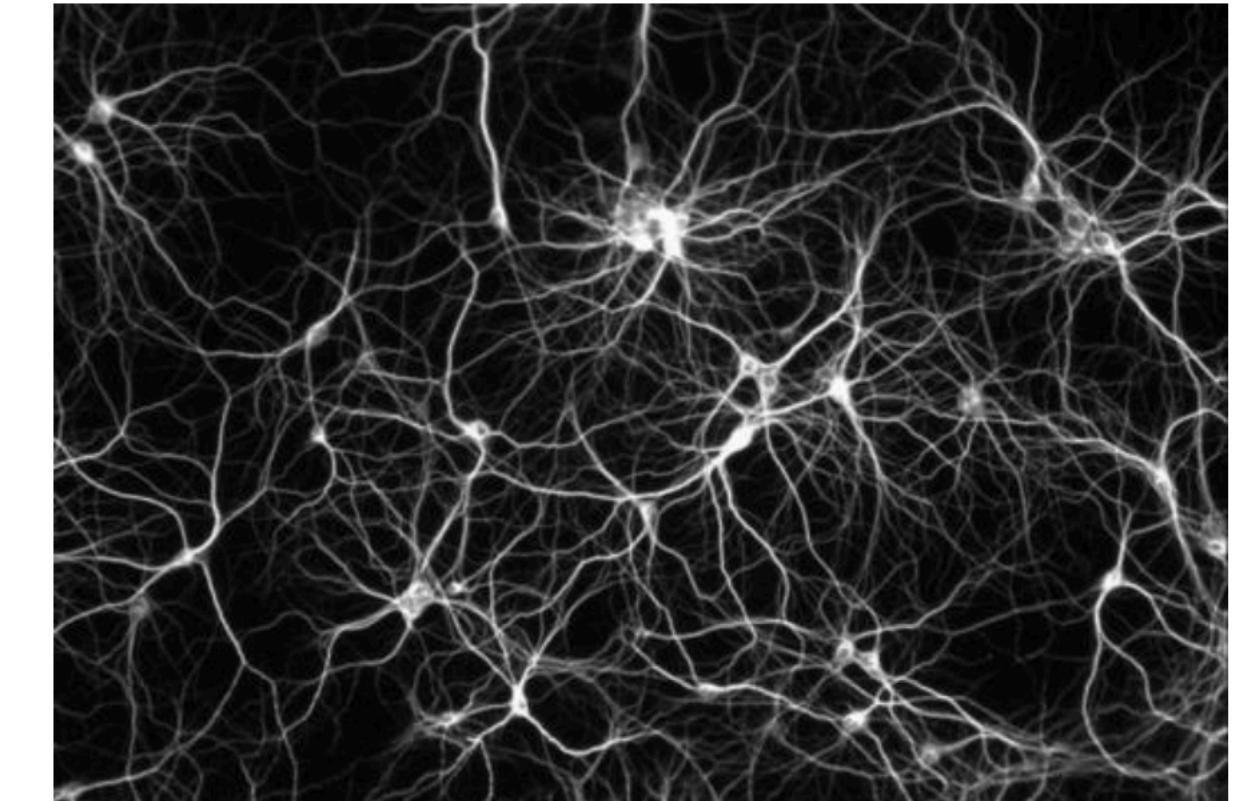
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Internet



Networks of Neurons

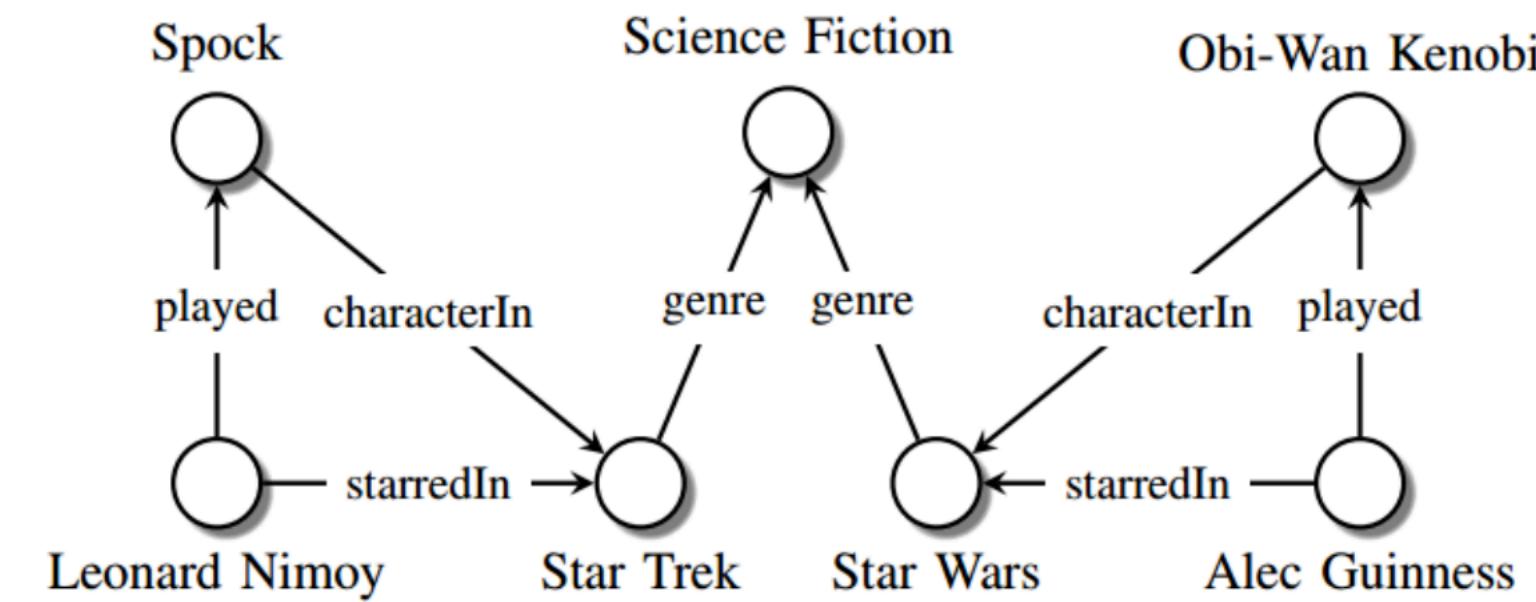


Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

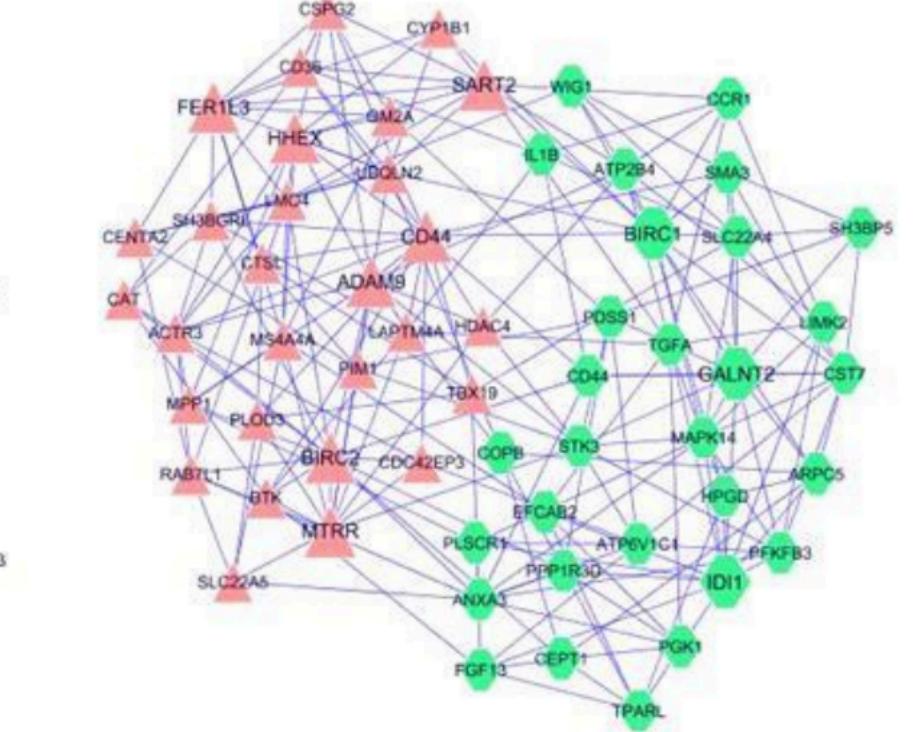
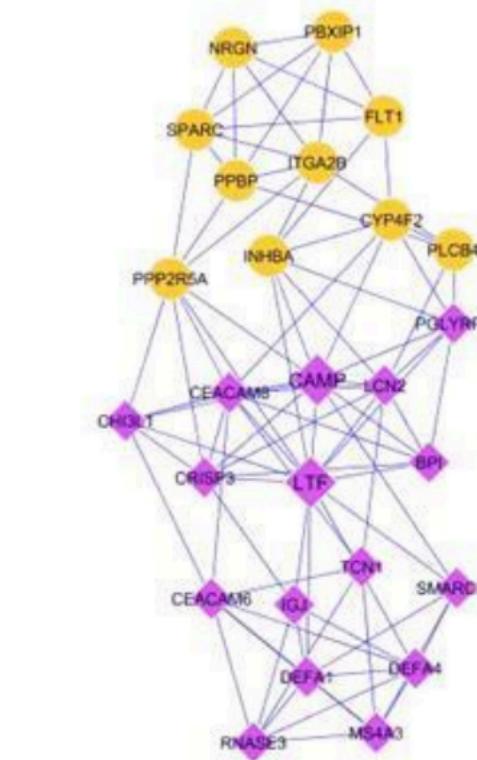
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.



Knowledge Graphs

Regulatory Networks



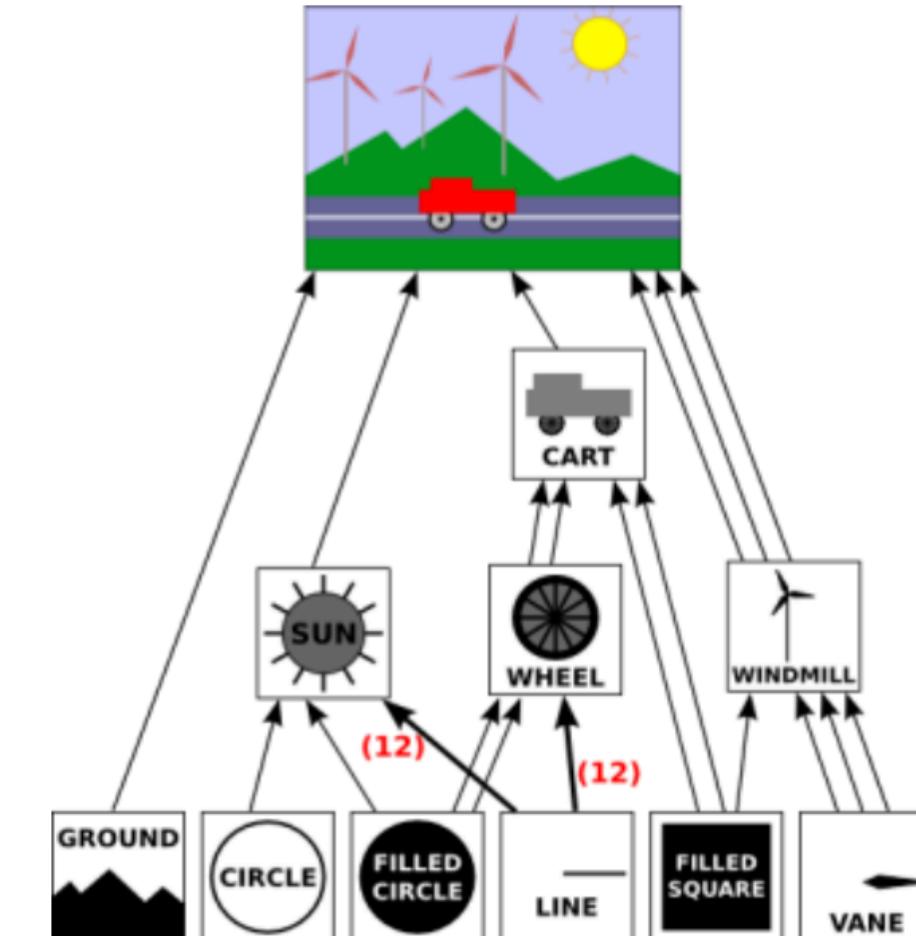
Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

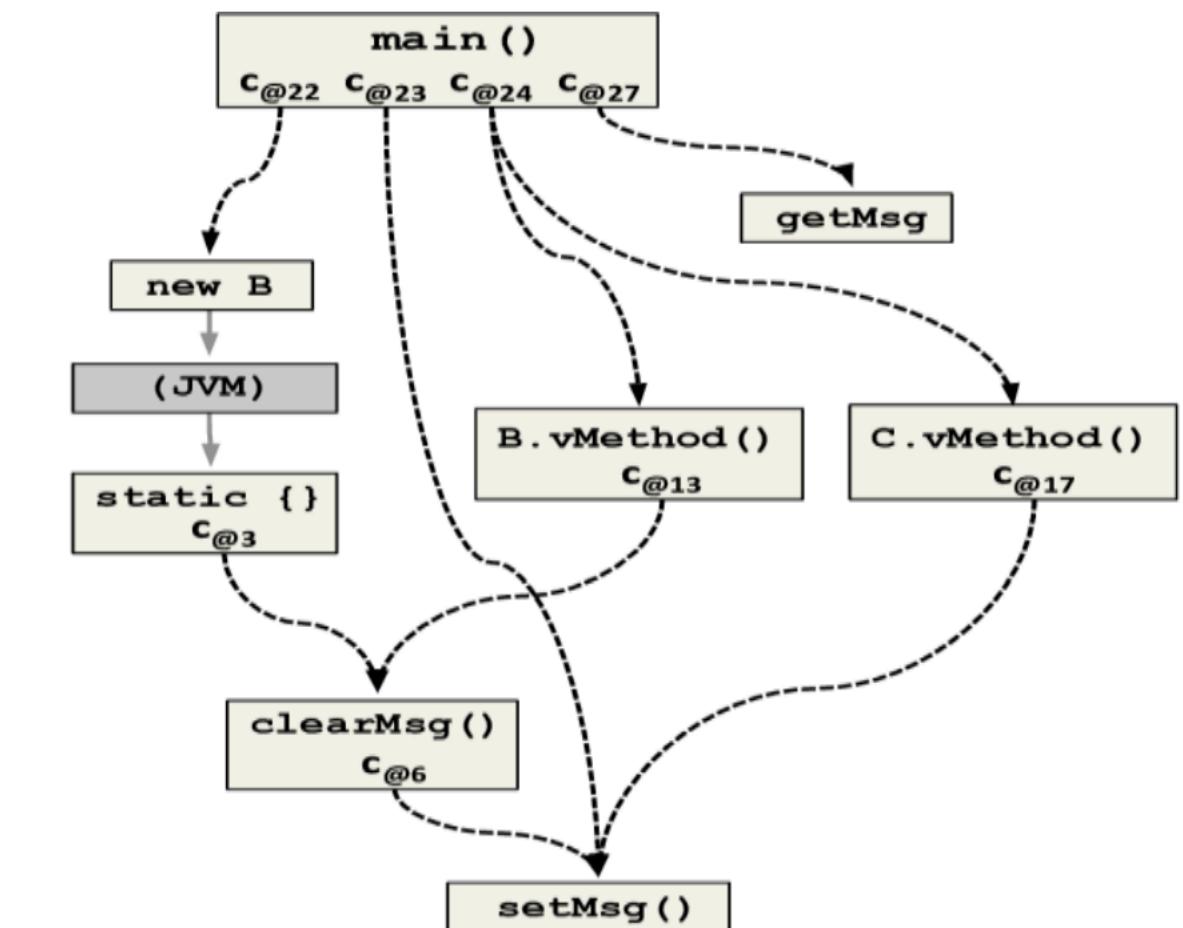
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Scene Graphs



Code Graphs



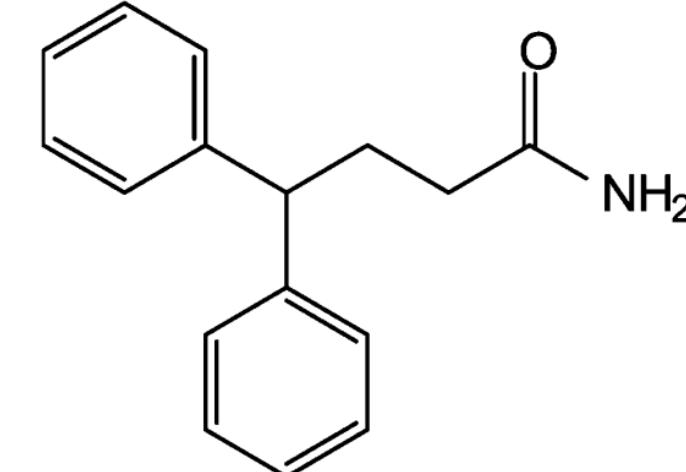
Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

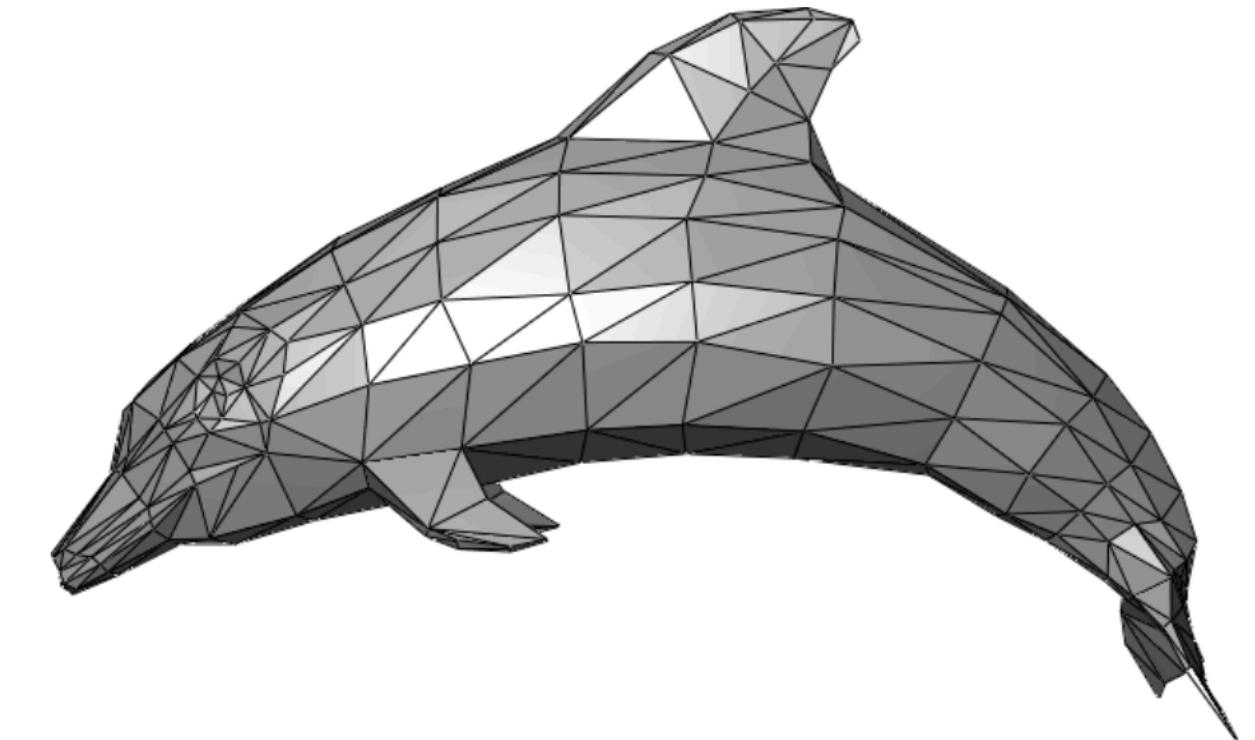
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Molecules



3D Shapes



Intro to Graph

Real Word Examples

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Kaliningrad: Islas y puentes



Intro to Graph

Real Word Examples

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Kaliningrad: Islas y puentes

- La ciudad de Kaliningrad (Rusia) tiene 2 islas y un puente que las conectan entre ellas y con el continente.
- Problema: Encontrar un camino que cruce todos los puentes una sola vez.
- Solución: Euler!



Intro to Graph

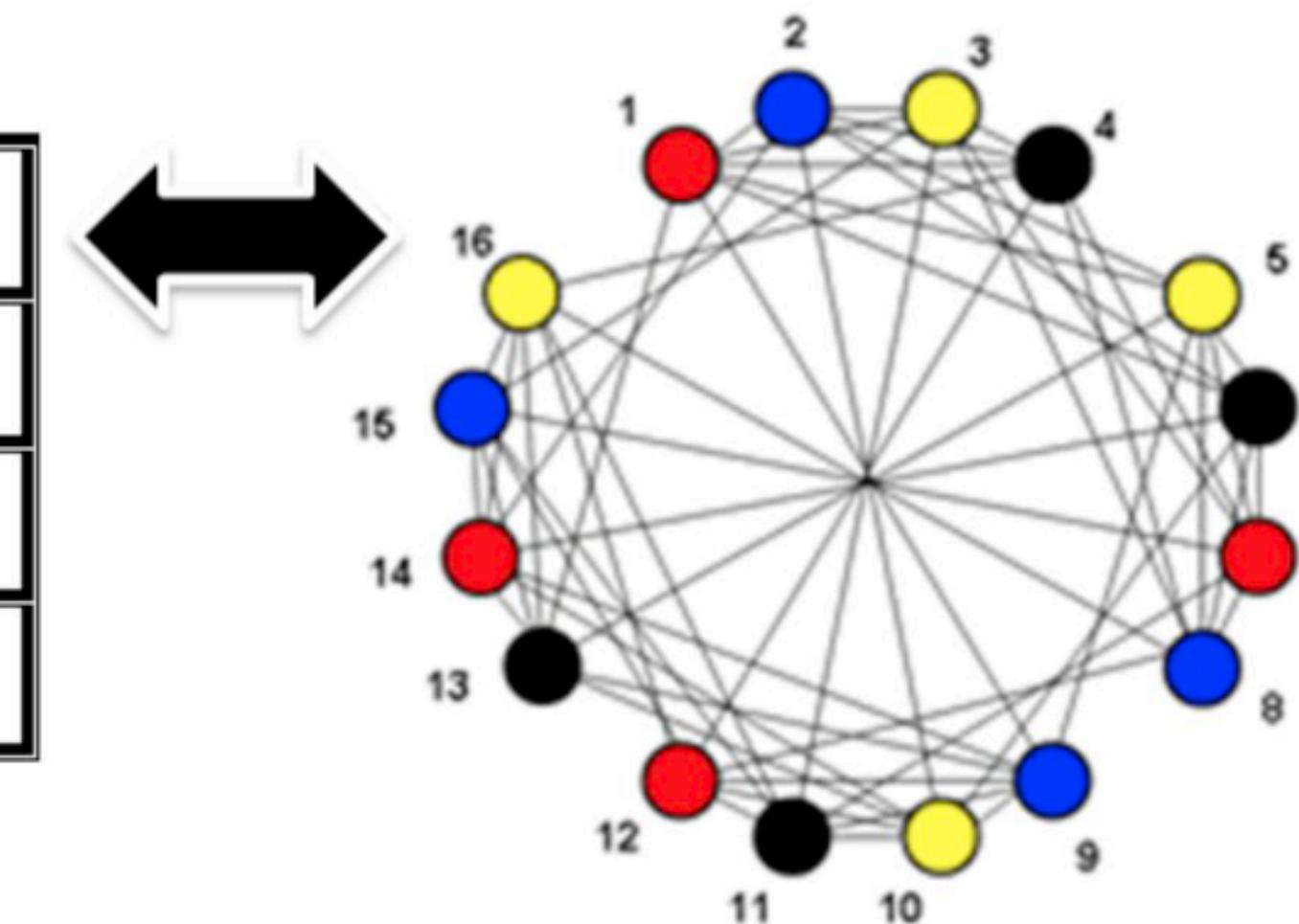
Real Word Examples

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Sudoku: coloración de grafos

1	2	3	4
3	4	1	2
2	3	4	1
4	1	2	3



Intro to Graph

Real Word Examples

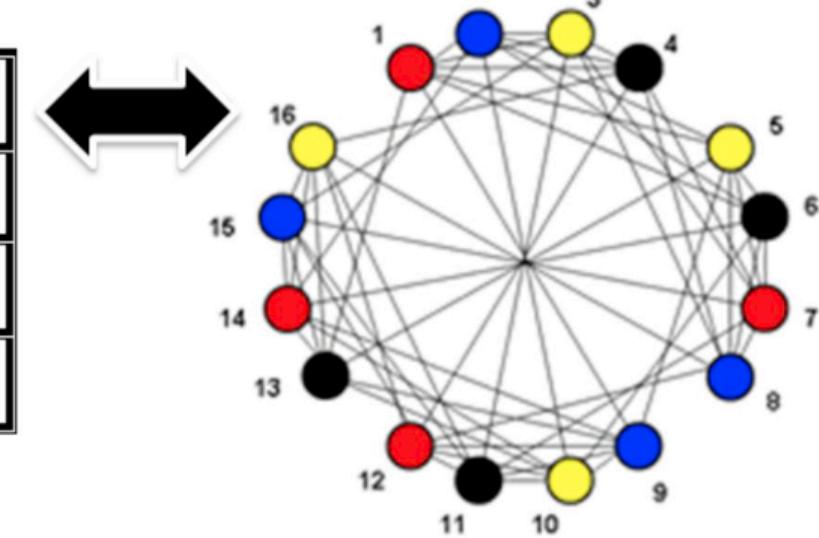
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Sudoku: coloración de grafos

- Un juego de Sudoku puede representarse con un grafo.
- La solución es equivalente al problema de coloración de grafos
- Ya existen algoritmos para resolver el problema

1	2	3	4
3	4	1	2
2	3	4	1
4	1	2	3



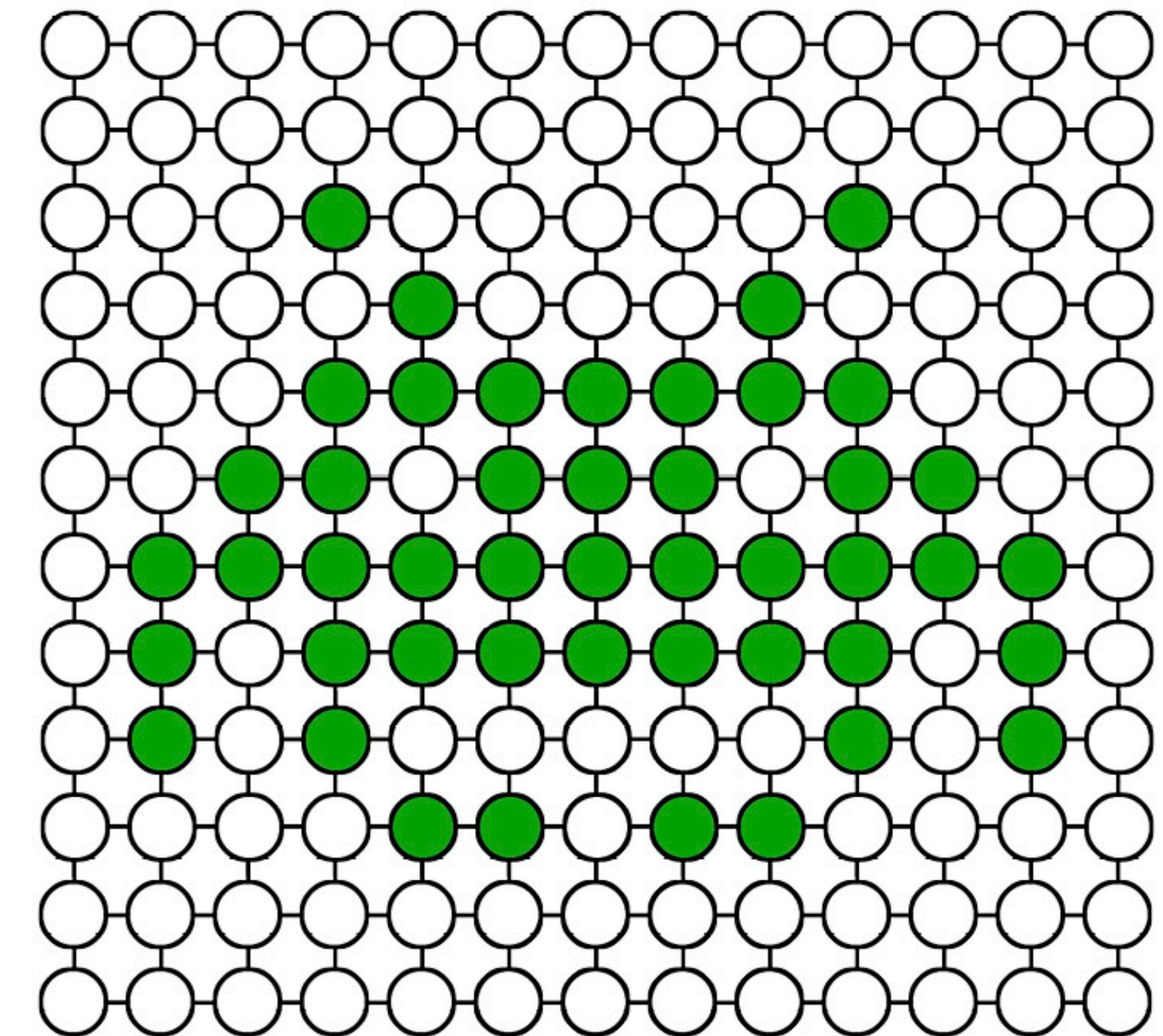
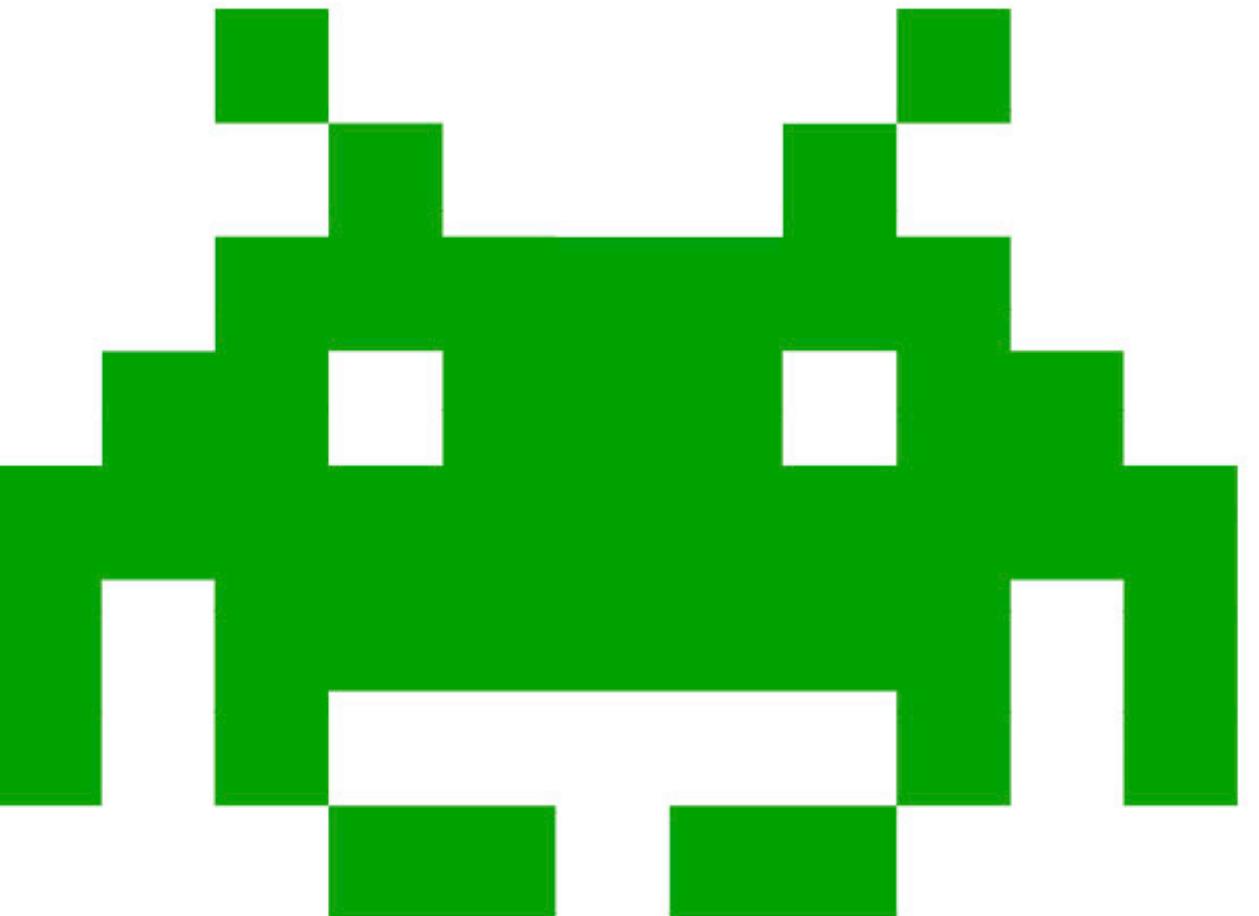
Intro to Graph

Many Types of Data are Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Versatilidad



Intro to Graph

Graphs and Relational Data

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Pregunta principal

¿Cómo aprovechamos la estructura relacional para una mejor predicción?

Intro to Graph

Graphs: Machine Learning

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Grafos y Relaciones con Data

Los dominios complejos tienen una rica estructura relacional, que se puede representar como un gráfico relacional.

¡Al modelar relaciones explícitamente logramos un mejor rendimiento!

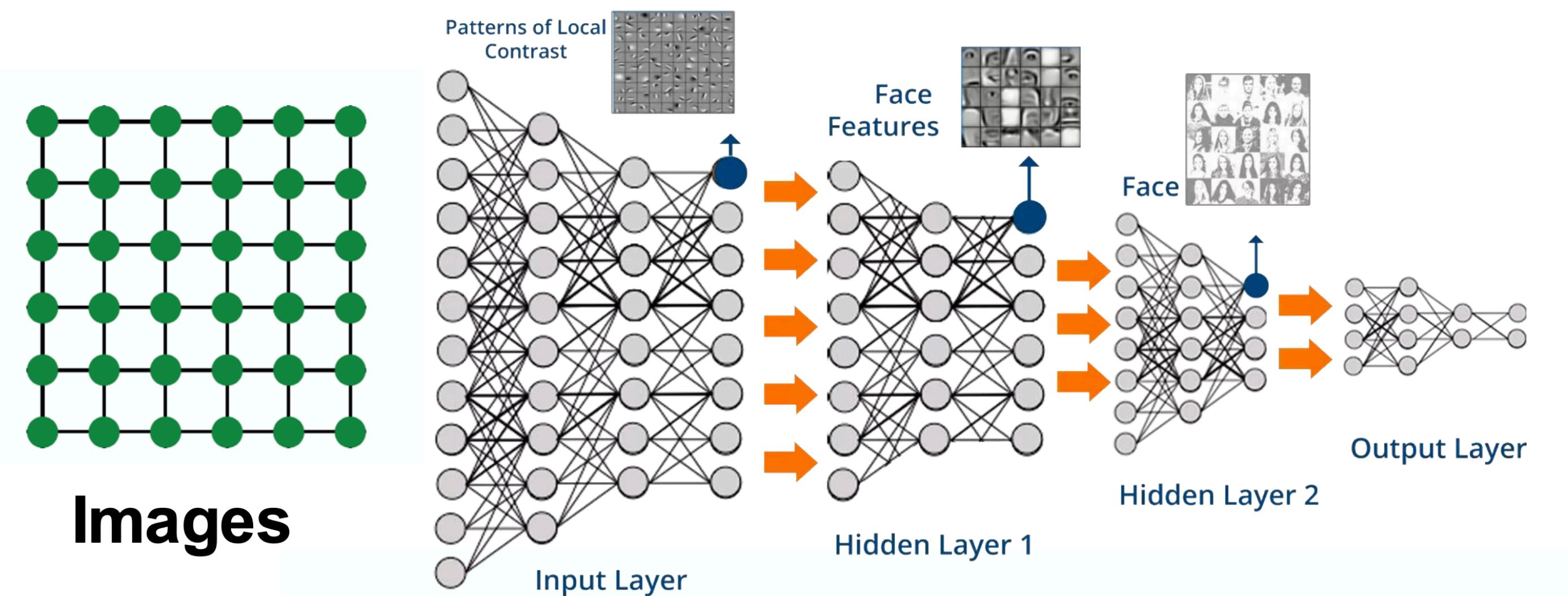
Intro to Graph

Modern Deep Learning Toolbox

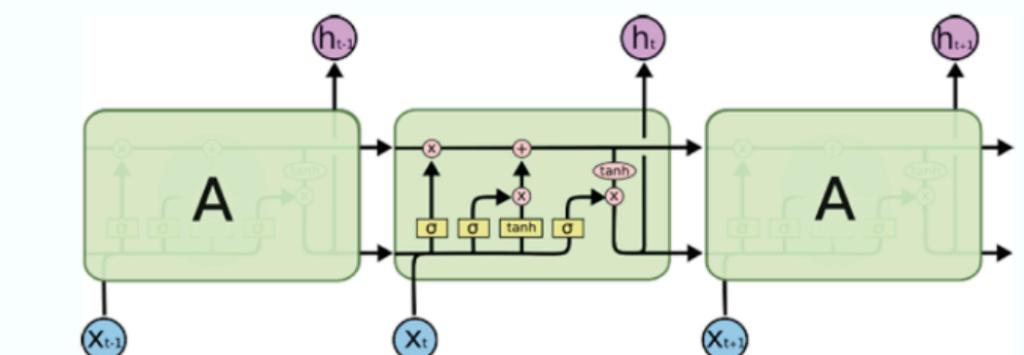
Graph

Los gráficos son un *lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.*

secuencias y cuadrículas



Text/Speech



Intro to Graph

Modern Deep Learning Toolbox

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Pregunta principal

No todo se puede representar como una secuencia o una cuadricula

Intro to Graph

Modern Deep Learning Toolbox

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Pregunta principal

¿Cómo podemos desarrollar redes neuronales que sean mucho más aplicables?

*Nuevas fronteras
más allá de las redes
neuronales clásicas*

Intro to Graph

Modern Deep Learning Toolbox

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Los grafos son la nueva frontera de deep learning

Los grafos conectan cosas.

Intro to Graph Subfield in Deep Learning

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

ICLR:
International Conference on Learning Representations

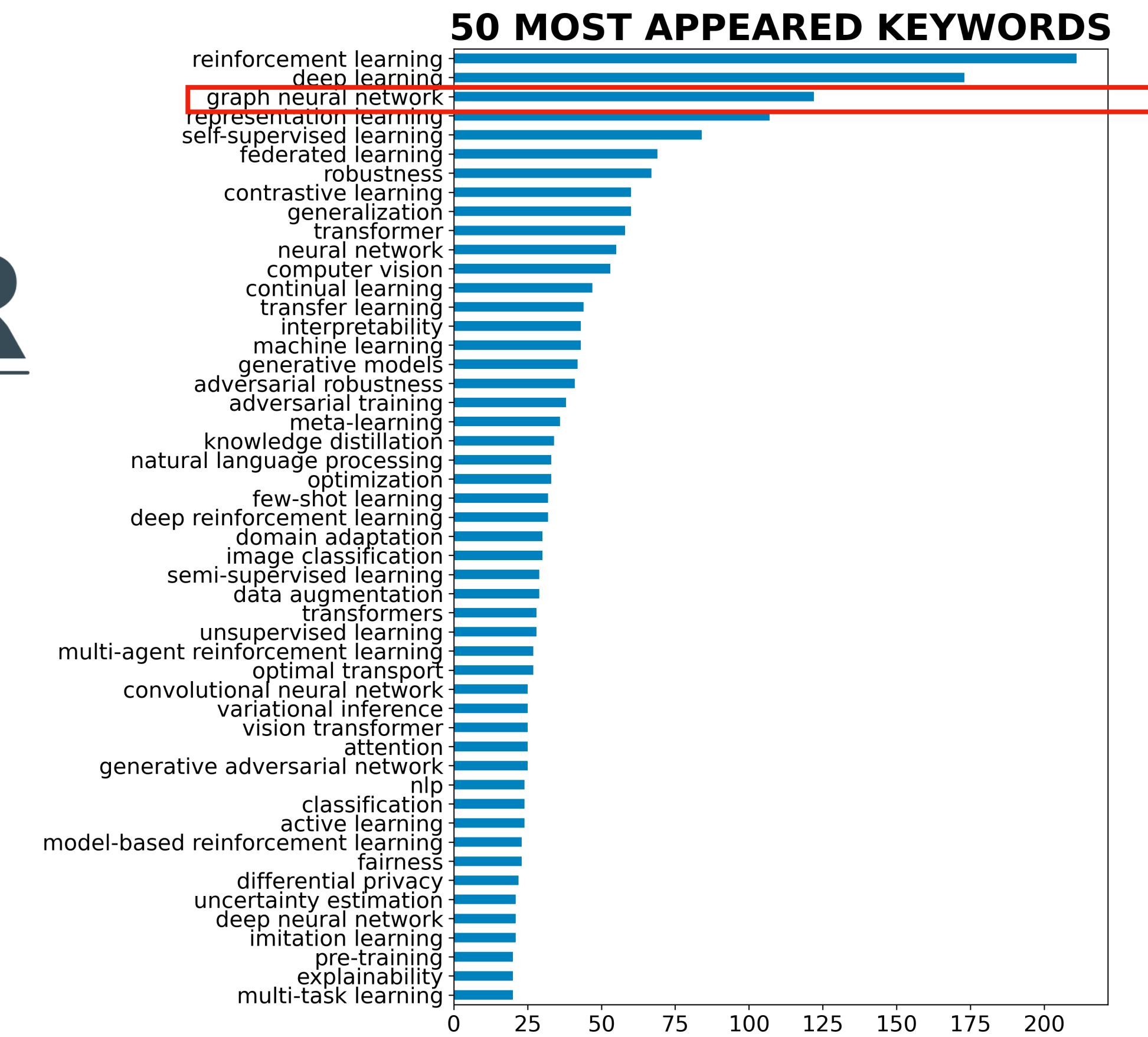


ICLR

Intro to Graph Subfield in Deep Learning

Graph

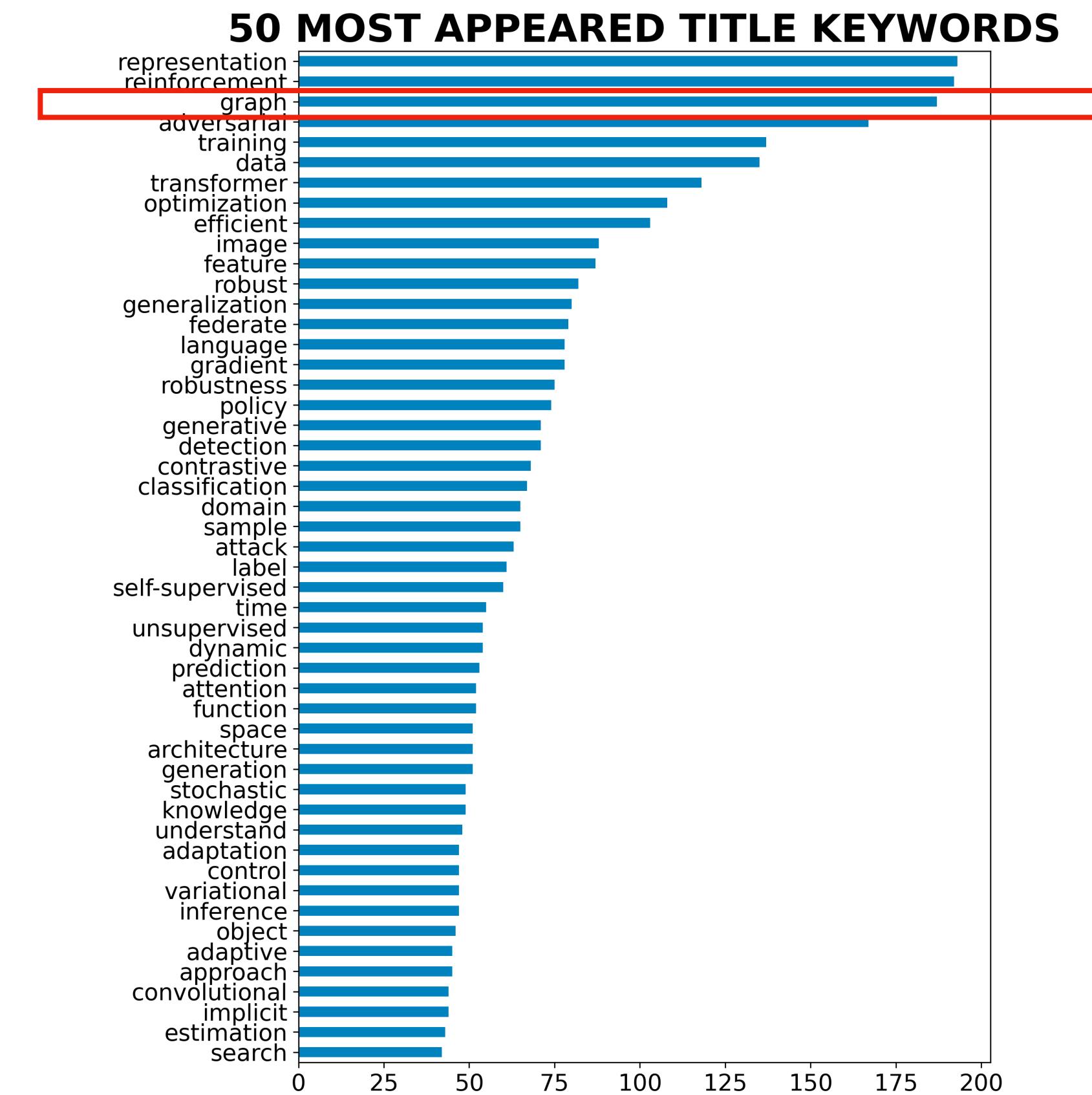
Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.



Intro to Graph Subfield in Deep Learning

Graph

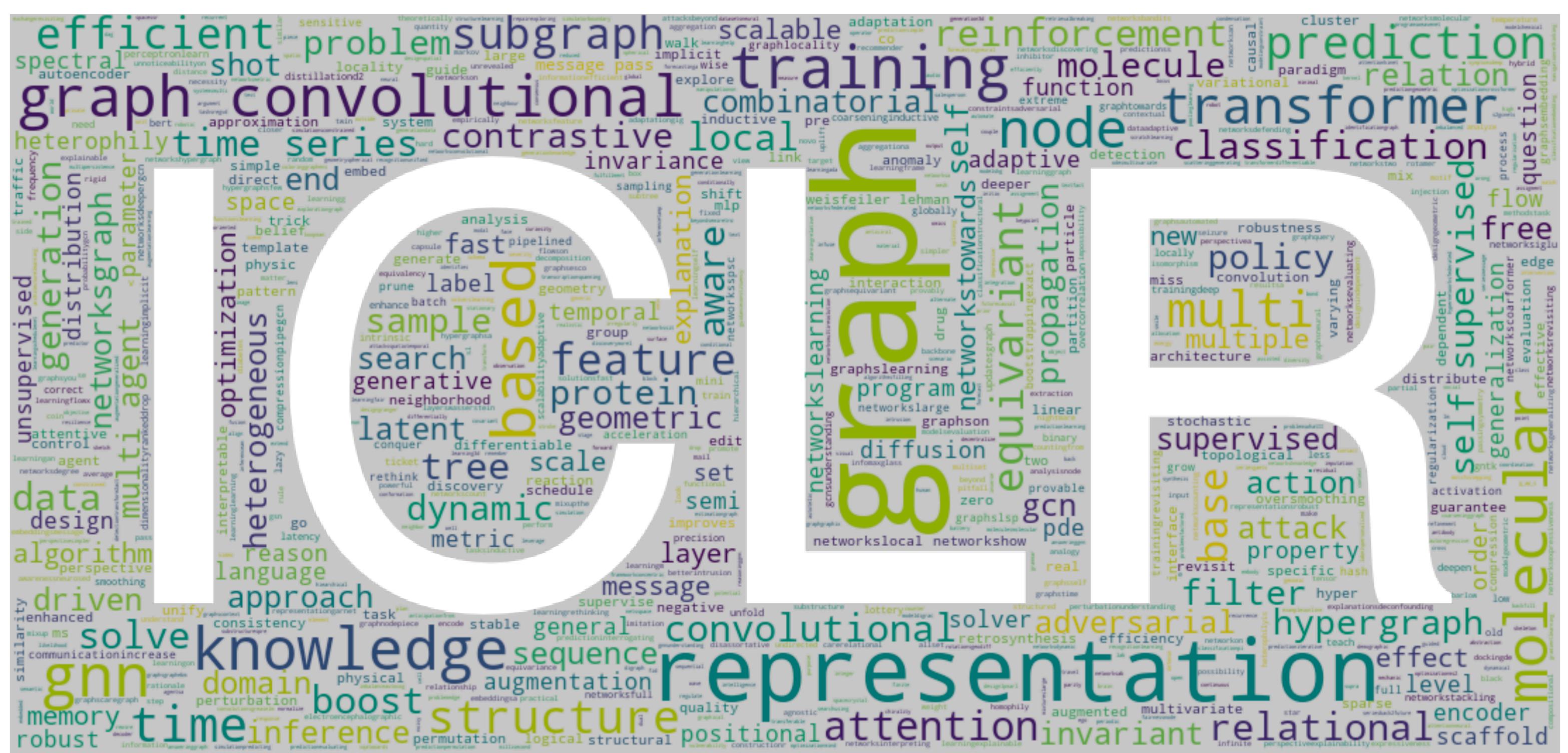
Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.



Intro to Graph Subfield in Deep Learning

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.



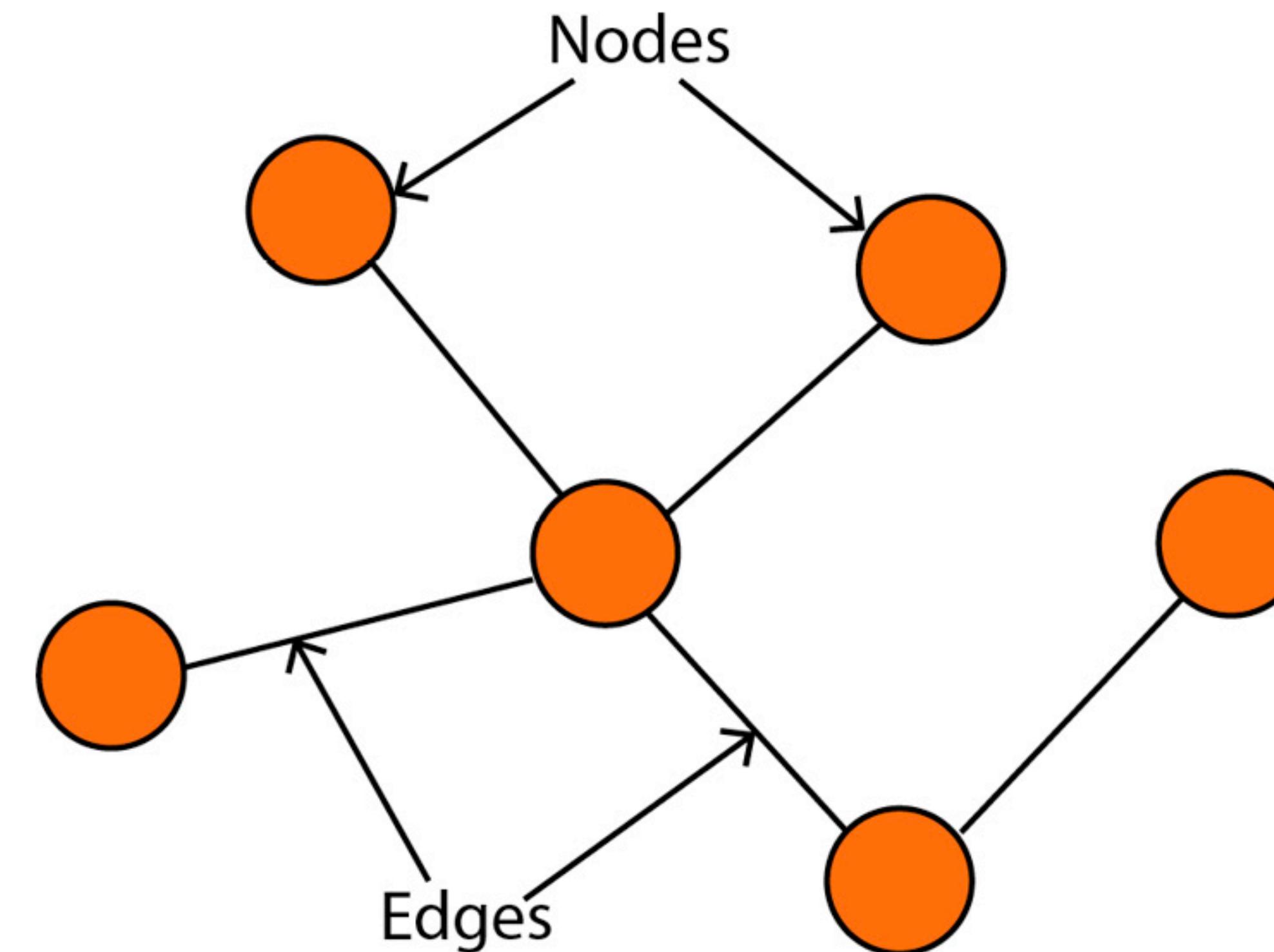
Intro to Graph

ML with Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas



Intro to Graph ML with Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas

Principales tareas

- Clasificación de nodos
- Clasificación de enlaces
- Clasificación de grafos
- Generación de grafos

Graph Learning

- Procesamiento de señales gráficas
- Factorización Matricial
- Paseo Aleatorio (Random Walk)
- Deep Learning

Intro to Graph ML with Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas

Principales tareas

- Clasificación de nodos
- Clasificación de enlaces
- Clasificación de grafos
- Generación de grafos

Graph Learning

- Procesamiento de señales gráficas
- Factorización Matricial
- Paseo Aleatorio (Random Walk)
- Deep Learning

Intro to Graph

ML with Graphs

Graph

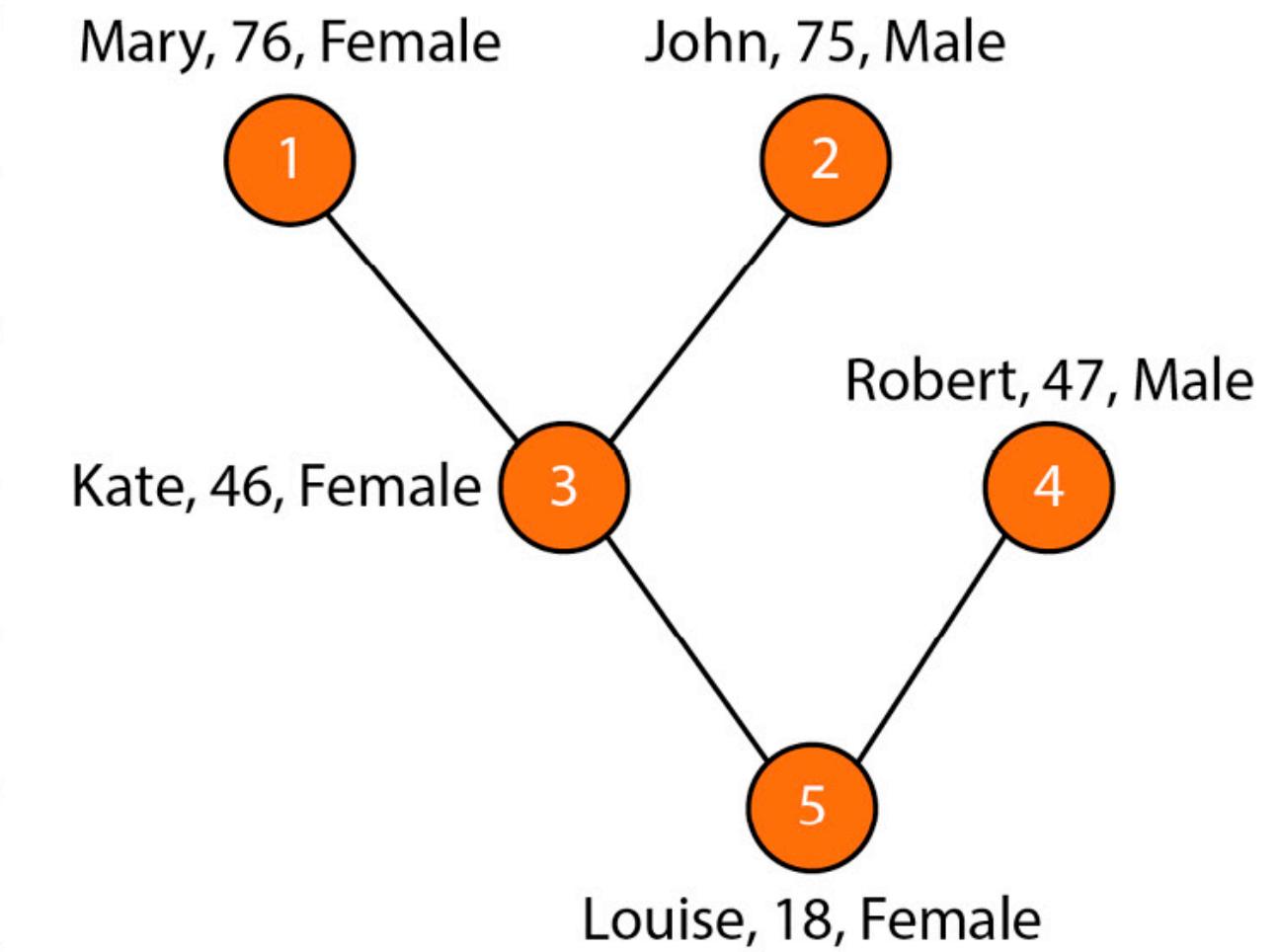
Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas

Graph representation

ID	Name	Age	Gender
1	Mary	76	Female
2	John	75	Male
3	Kate	46	Female
4	Robert	47	Male
5	Loise	18	Female

Graph dataset



Intro to Graph

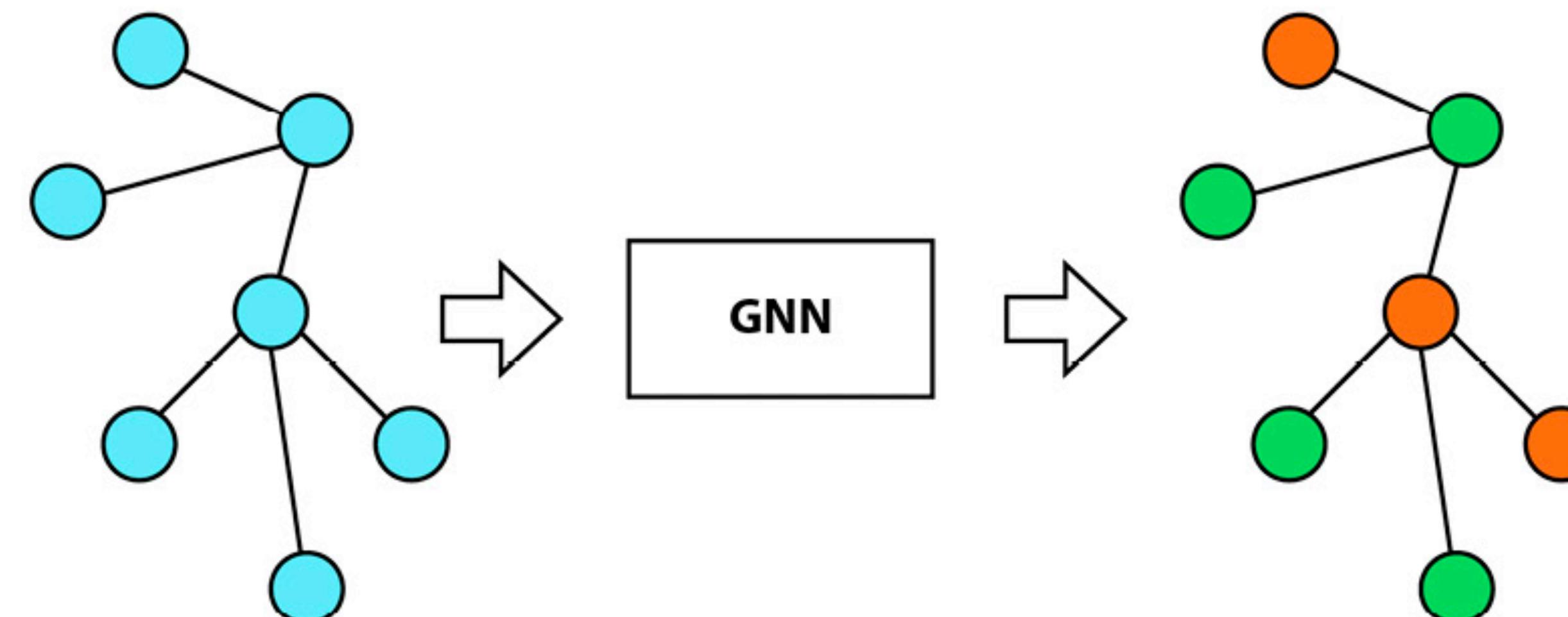
ML with Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas

a. Node classification



Principales tareas

Ej.: Usuarios fraudulentos/estafadores en una red social.

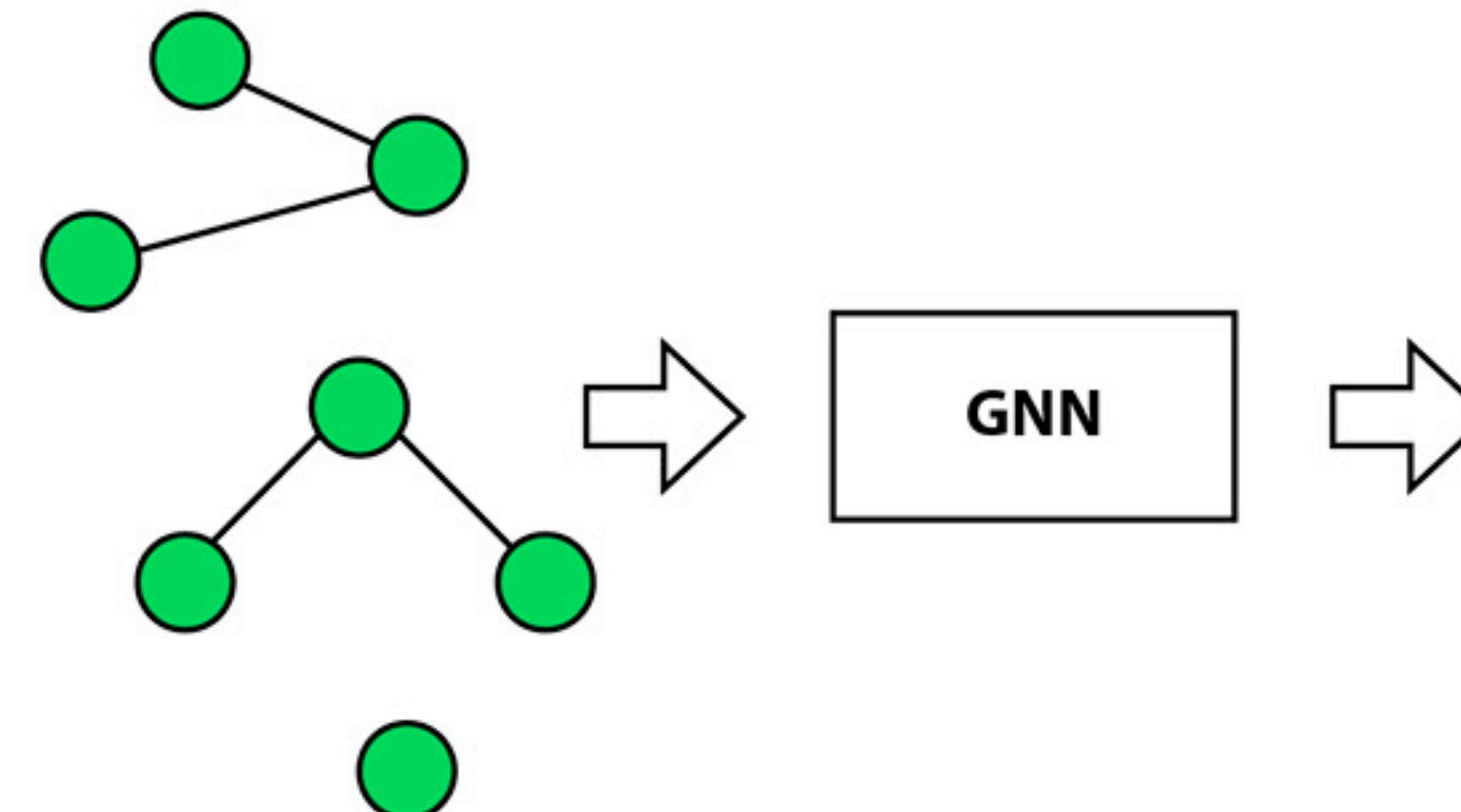
Intro to Graph ML with Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas

b. Link prediction



Ej.: Recomendaciones de amistad (amigos sugeridos) en una red social.

Principales tareas

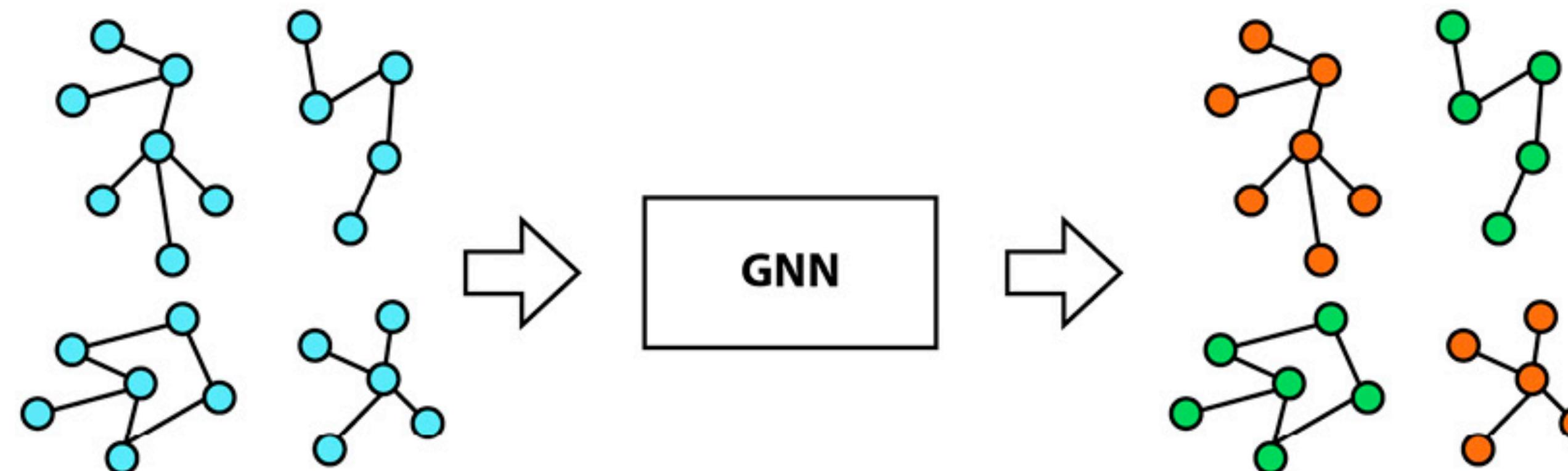
Intro to Graph ML with Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas

c. Graph classification



Ej.: Diseño de fármacos con grafos de estructuras moleculares.

Principales tareas

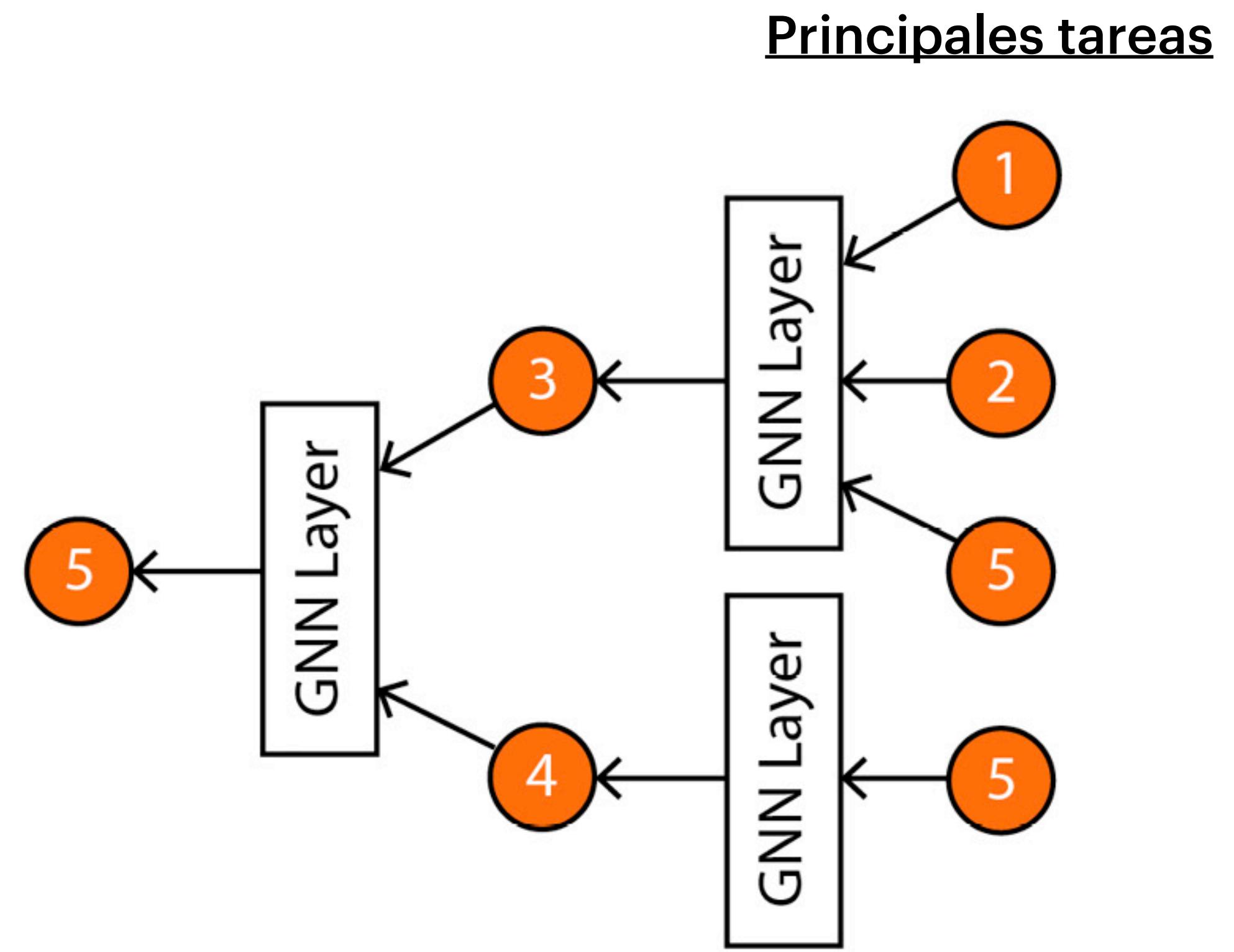
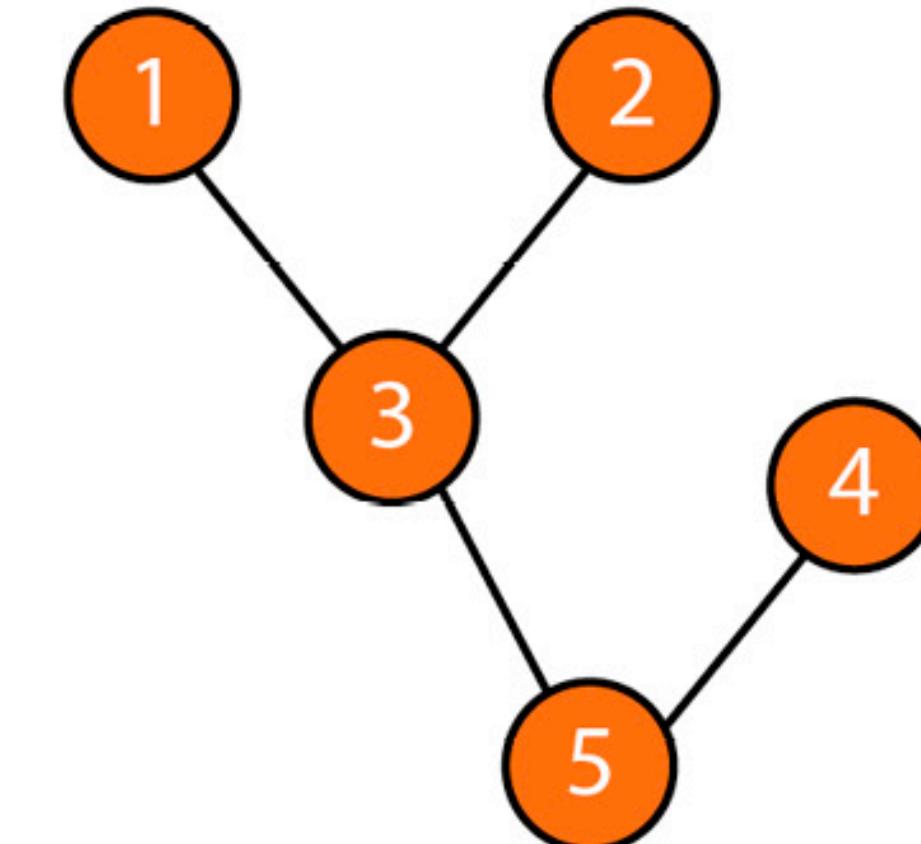
Intro to Graph

ML with Graphs

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Nuevas fronteras más allá de las redes neuronales clásicas



Intro to Graph

Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

$$G = (V, E)$$

Donde,

G : Es el grafo

$V = v_1, \dots, v_n \quad \forall v \in V$ Nodos o vértices

$E = [(v_k, v_w), \dots, (v_i, v_j)]$ Enlaces o aristas

Intro to Graph

Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

$$G = (V, E)$$

Donde,

G : Es el grafo

$V = v_1, \dots, v_n \quad \forall v \in V$ Nodos o vértices

$E = [(v_k, v_w), \dots, (v_i, v_j)]$ Enlaces o aristas

$$[v_k, v_w] \quad [v_w, v_k]$$

Representan el mismo enlace/borde

Intro to Graph

Graph Theory

Grafo no dirigido

$$[v_k, v_w] \quad [v_w, v_k]$$

Representan el mismo enlace/borde

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Donde,

G : Es el grafo

$V = v_1, \dots, v_n \quad \forall v \in V$ Nodos o vértices

$E = [(v_k, v_w), \dots, (v_i, v_j)]$ Enlaces o aristas

Intro to Graph

Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Vertices -> Nodos

Aristas -> Enlaces

Propiedades básicas:

Orden: Es el número de sus vértices $|V|$

Tamaño: Es el número de sus aristas $|E|$

Grado de vértice: Es el número de aristas adyacentes del vértice.

Vecinos: De un vértice V en un grafo G es un subconjunto de vértices V' inducido por los vértices de V

Neighborhood graph: a.k.a. ego graph. De un vértice en un grafo es un subgrafo de

Intro to Graph

Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Vertices -> Nodos

Aristas -> Enlaces

Propiedades básicas:

Neighborhood graph: a.k.a. *ego graph*. De un vértice v de un grafo G es un subgrafo G .

Se compone por los vértices adyacentes a v y todos los bordes que conectan los vértices adyacentes a v .

Intro to Graph

Graph Theory

Graph

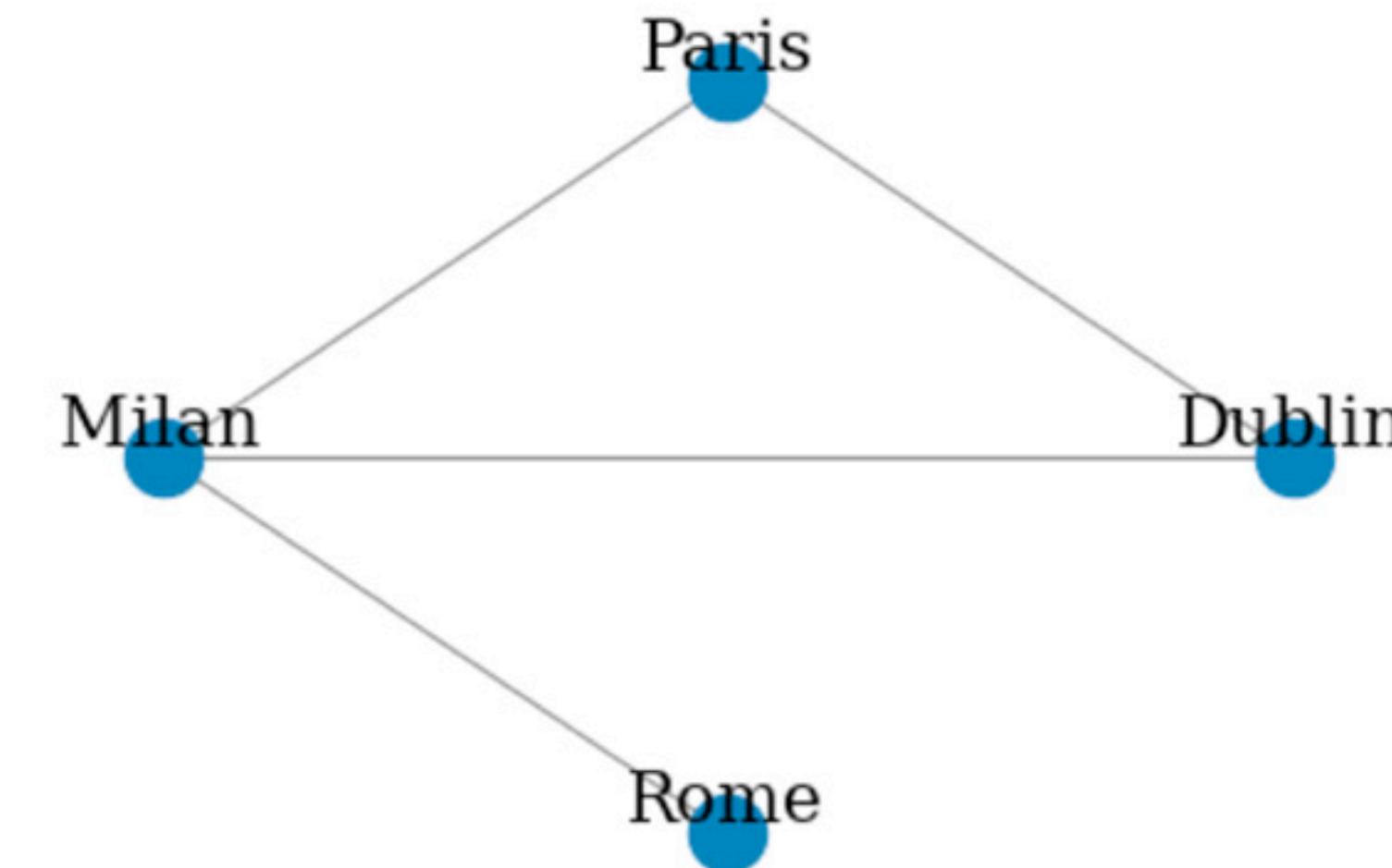
Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Graph Example

Grafo no dirigido

$$V = [\text{Paris}, \text{Milan}, \text{Dublin}, \text{Rome}]$$

$$E = [\{\text{Milan}, \text{Dublin}\}, \{\text{Milan}, \text{Paris}\}, \{\text{Paris}, \text{Dublin}\}, \{\text{Milan}, \text{Rome}\}]$$



Intro to Graph Graph Theory

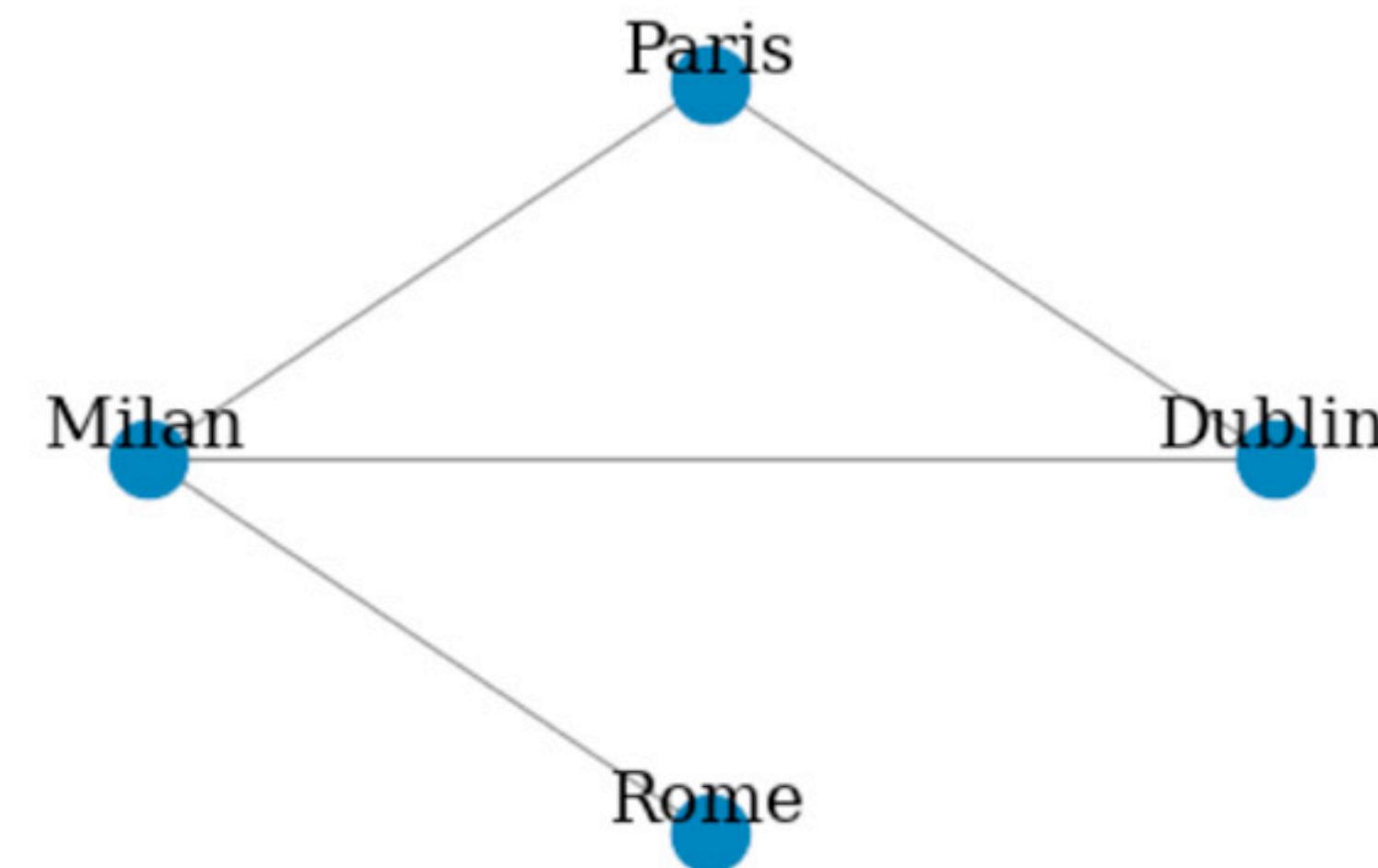
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Graph Example

Grafo no dirigido

Paris = {Milan, Dublin}
Milan = {Paris, Dublin, Rome}
Dublin = {Paris, Milan}
Rome = {Milan}



Intro to Graph

Graph Theory

Graph

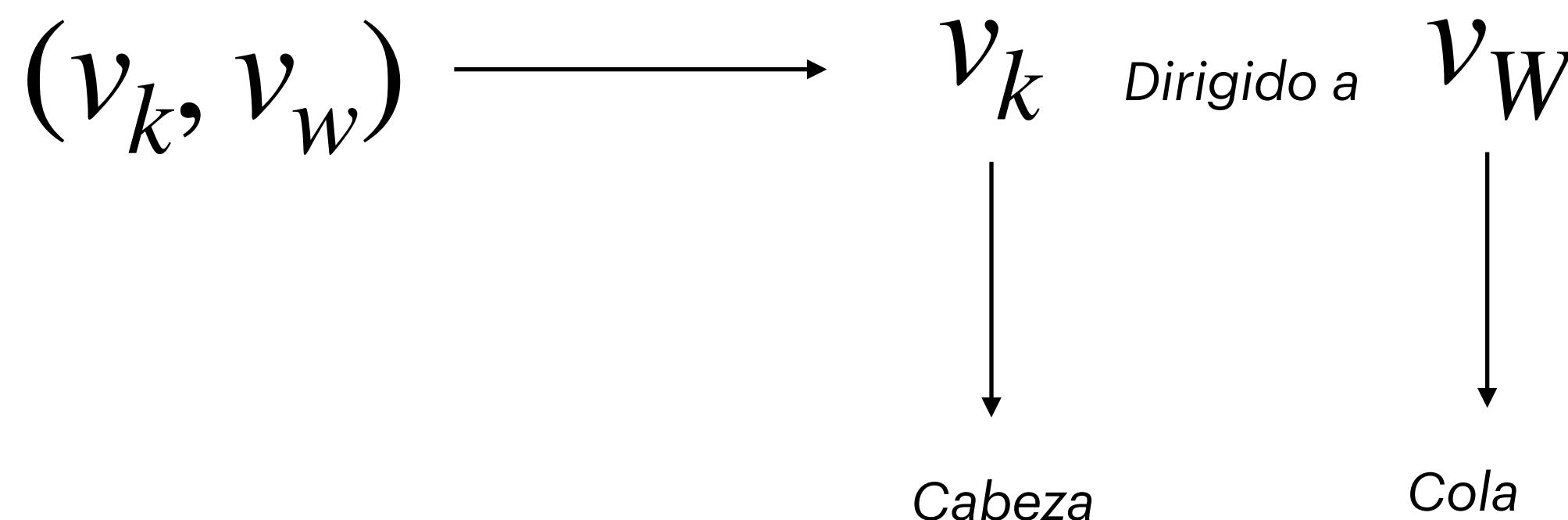
Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Graph Example

Grafo dirigido

$$E = [(v_k, v_w), \dots, (v_i, v_j)]$$

Enlaces o aristas



Intro to Graph

Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Grado Interno

$$\deg^-(v)$$



Cantidad de cabezas adyacentes/entrantes

Grado Externo

$$\deg^+(v)$$



Cantidad de colas adyacentes/salientes

Intro to Graph

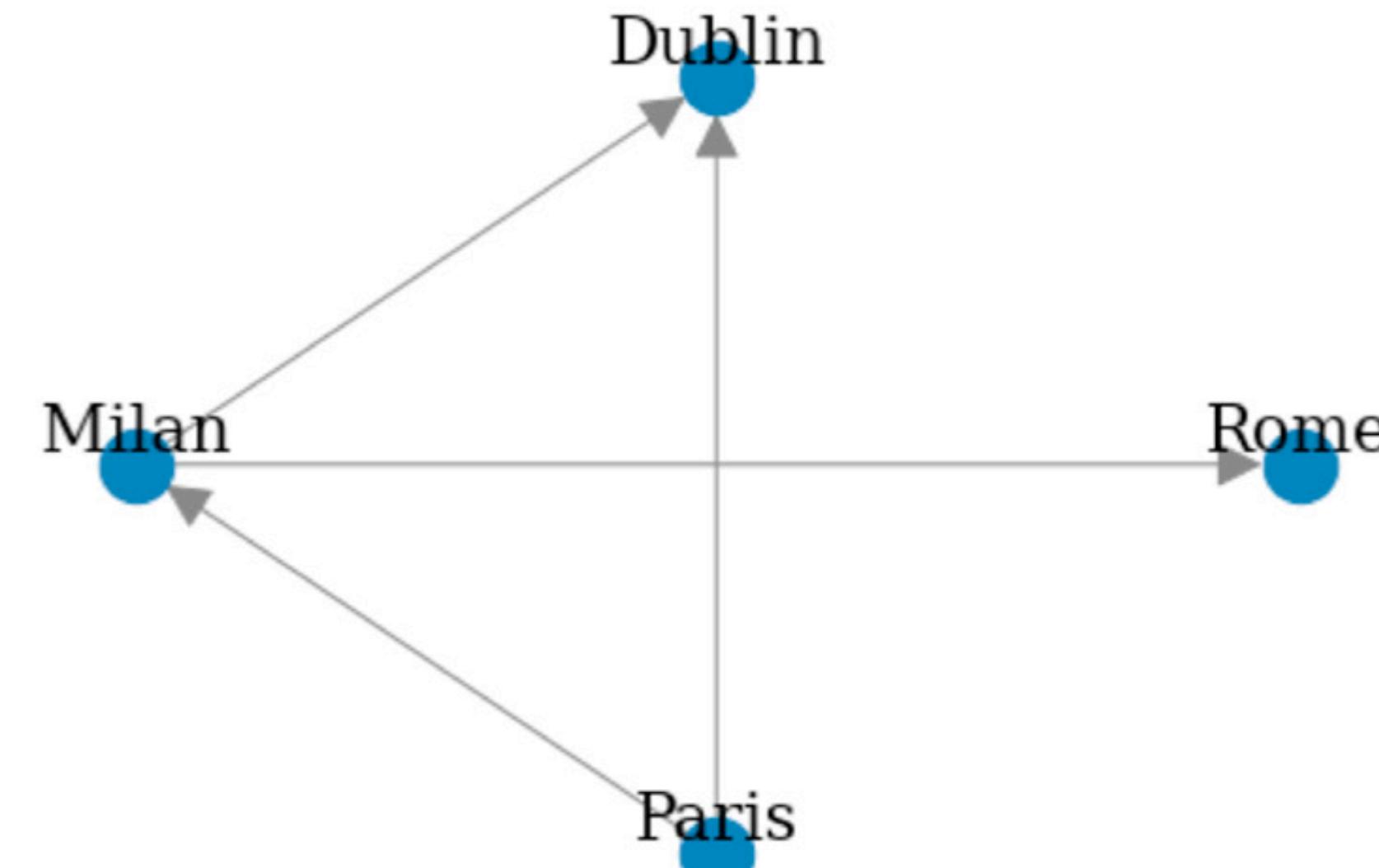
Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

$$V = [\text{Paris}, \text{Milan}, \text{Dublin}, \text{Rome}]$$

$$E = [(\text{Milan}, \text{Dublin}), (\text{Paris}, \text{Milan}), (\text{Paris}, \text{Dublin}), (\text{Milan}, \text{Rome})]$$



Intro to Graph Graph Theory

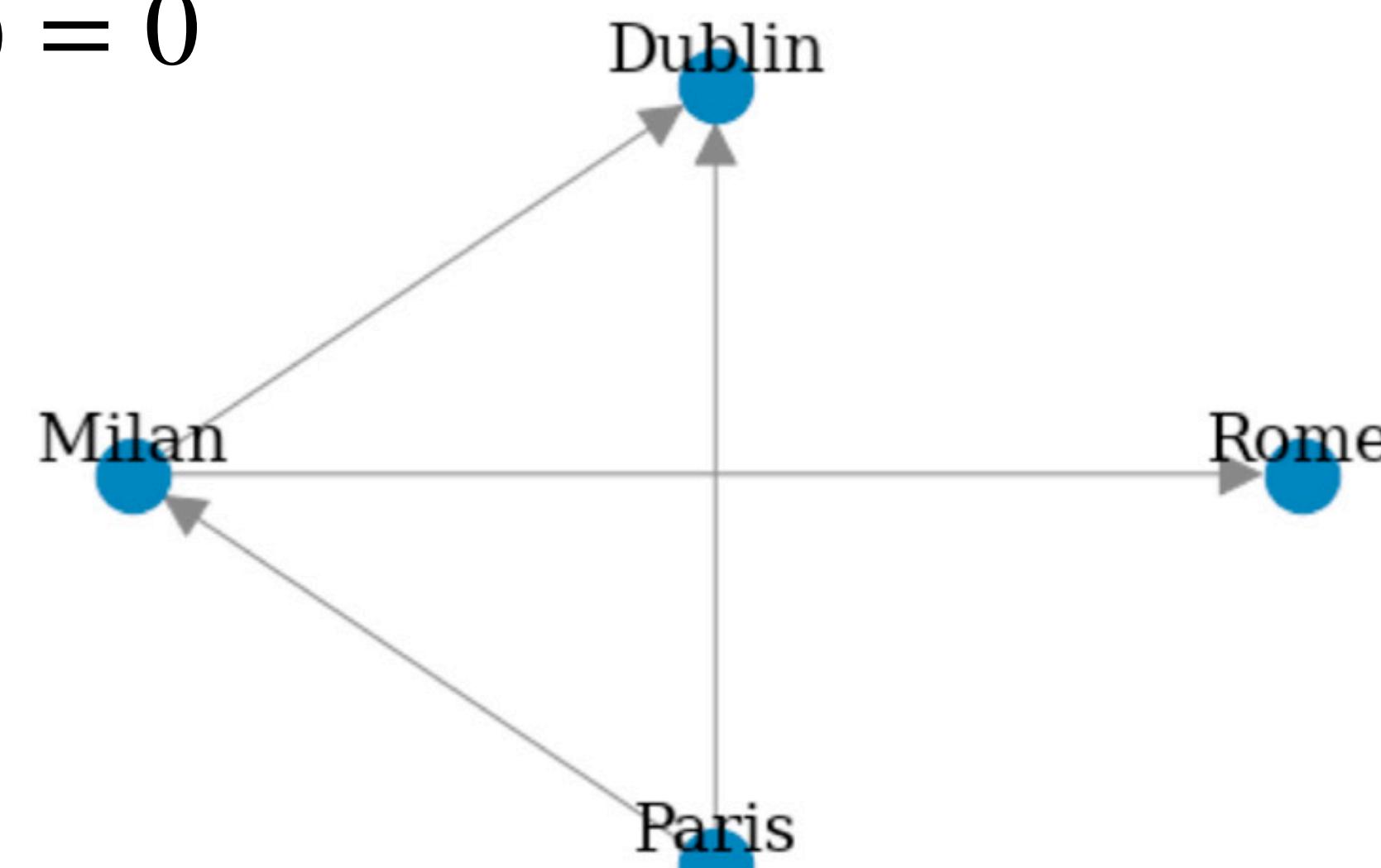
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Dublin

$$\deg^-(v) = 2$$

$$\deg^+(v) = 0$$



Intro to Graph

Graph Theory

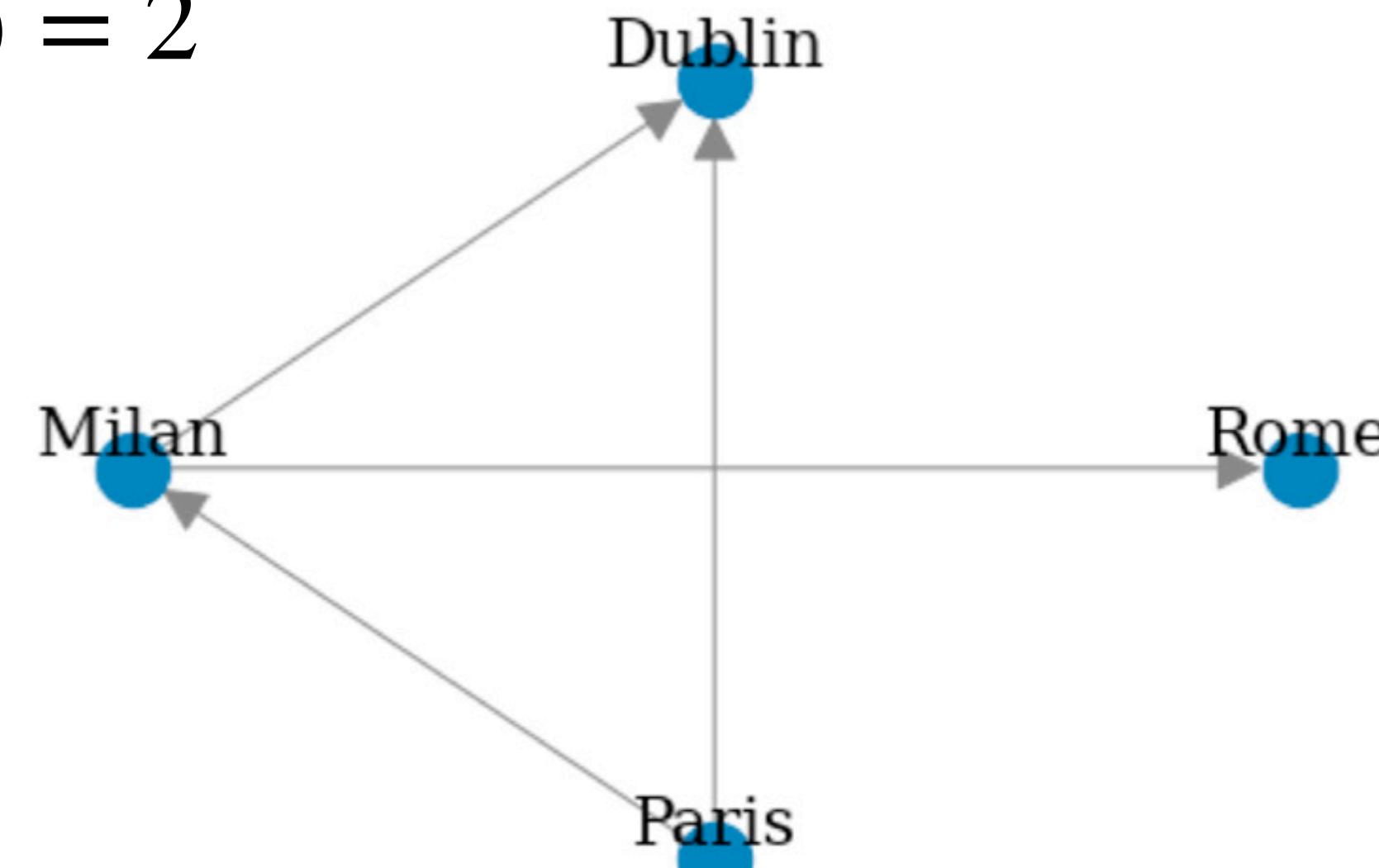
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Paris

$$\deg^-(v) = 0$$

$$\deg^+(v) = 2$$



Intro to Graph Graph Theory

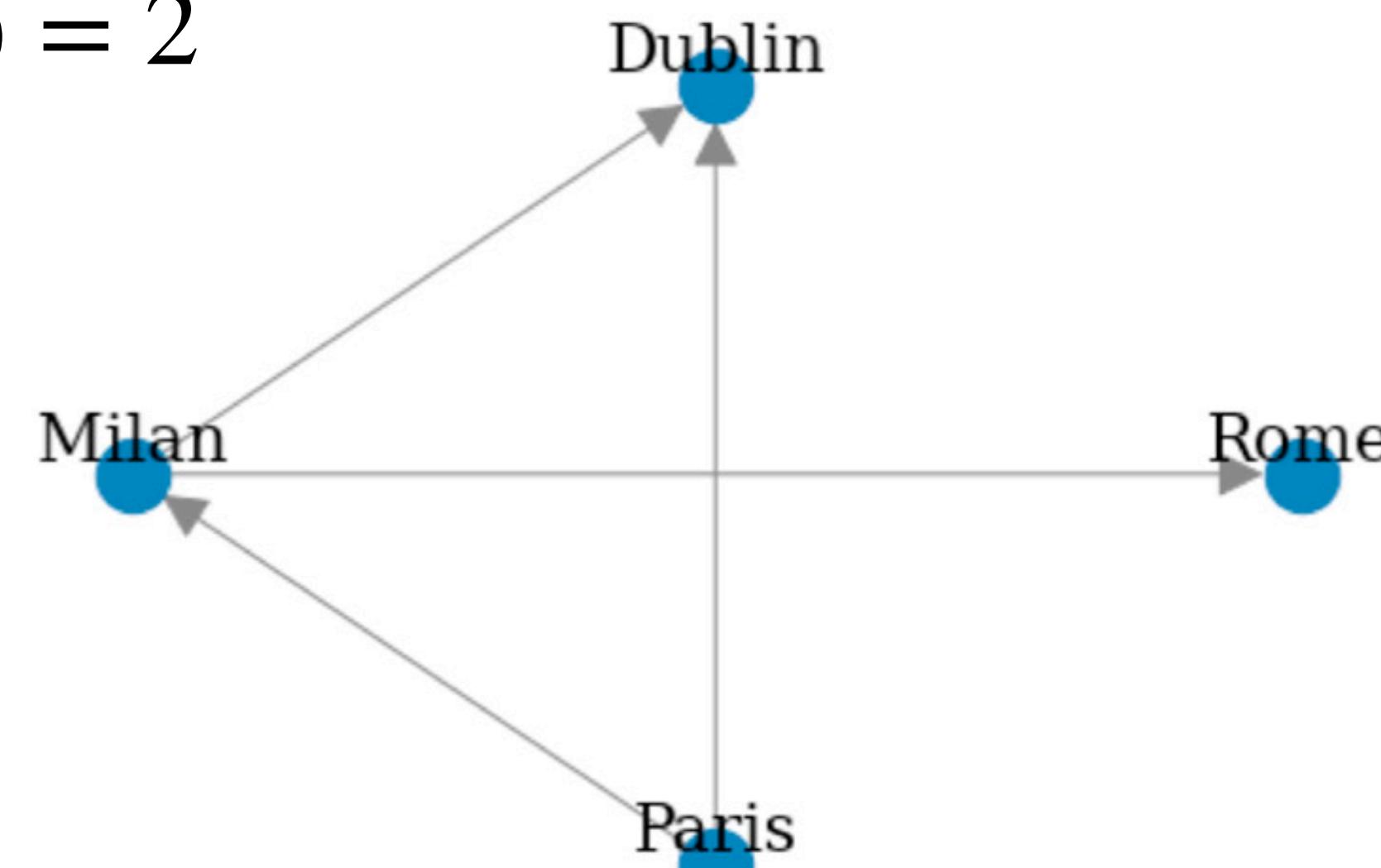
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Milán

$$\deg^-(v) = 1$$

$$\deg^+(v) = 2$$



Intro to Graph

Graph Theory

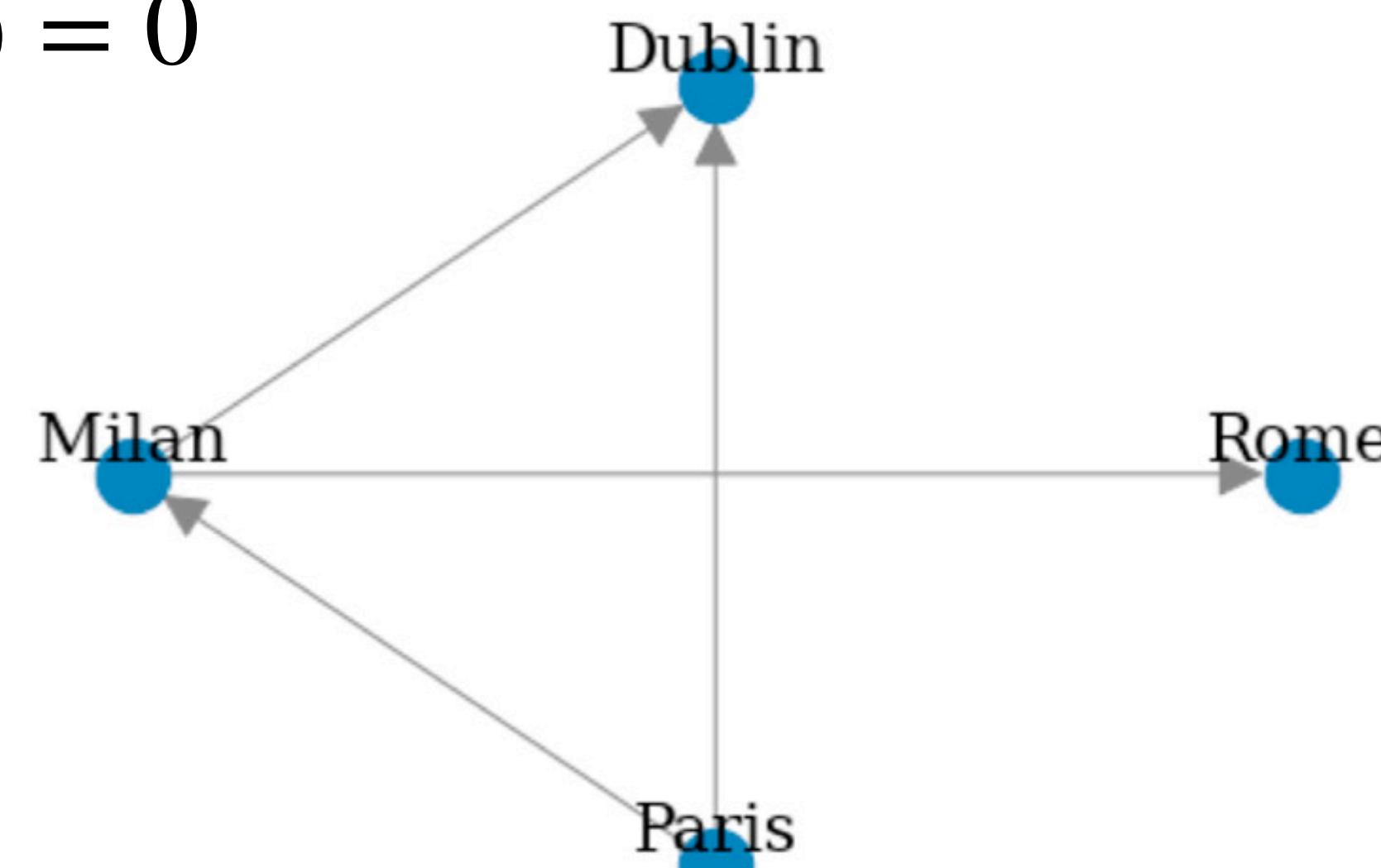
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Roma

$$\deg^-(v) = 1$$

$$\deg^+(v) = 0$$



Intro to Graph

Graph Theory

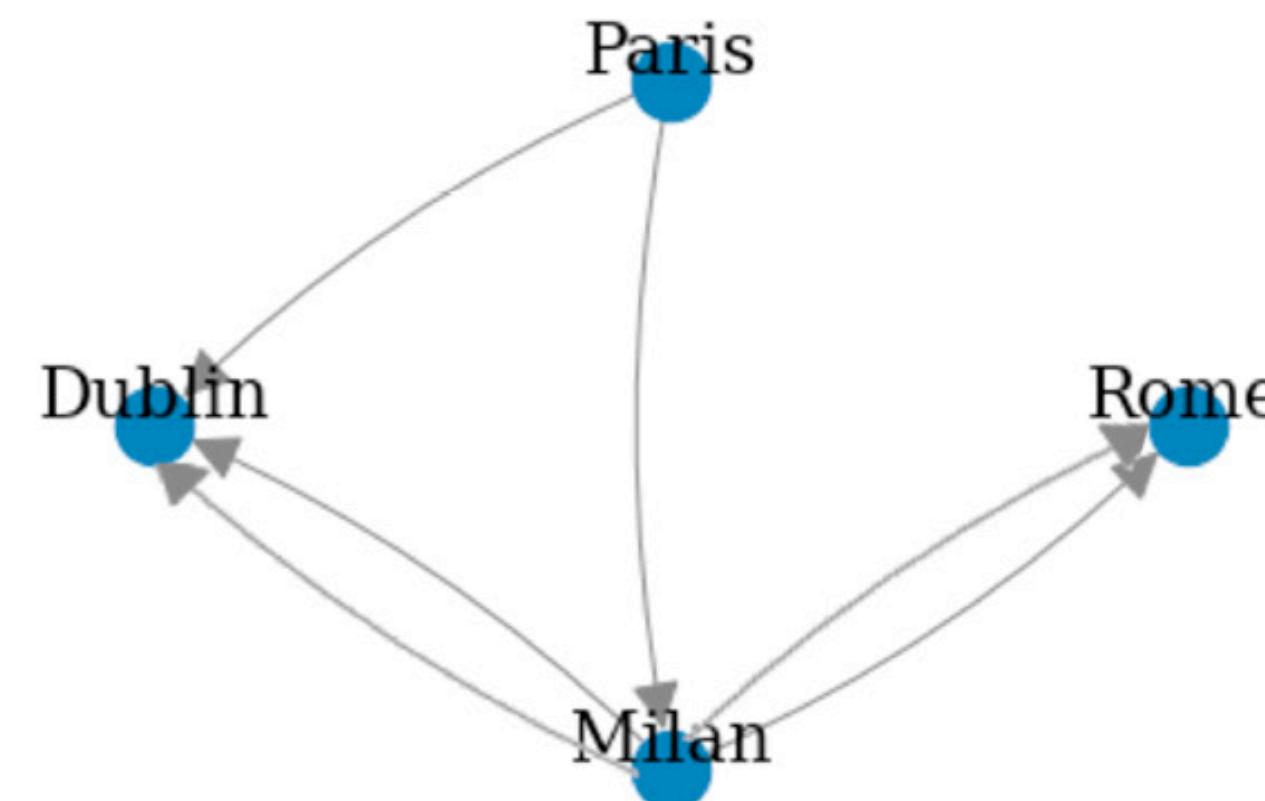
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Multigrafos

$$V = [\text{Paris}, \text{Milan}, \text{Dublin}, \text{Rome}]$$

$$E = [(\text{Milan}, \text{Dublin}), (\text{Milan}, \text{Dublin}), (\text{Paris}, \text{Milan}), (\text{Paris}, \text{Dublin}), (\text{Milan}, \text{Rome}), (\text{Milan}, \text{Rome})]$$



Multigrafos

- *Dirigidos*
- *No dirigidos*

Intro to Graph

Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Grafos Ponderados
por bordes

$$G = (V, E, w)$$

donde:

$$w: E \rightarrow \mathbb{R}$$

arista $e \in E$

Grafos Ponderados
por nodos

$$G = (V, E, w)$$

donde:

$$w: V \rightarrow \mathbb{R}$$

nodo $v \in V$

Intro to Graph

Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

- Sí E es un conjunto de pares ordenados. → **Grafos Ponderados dirigido**
- Sí E es un conjunto de pares no ordenados. → **Grafos Ponderados no dirigido**
- Sí E es un conjunto de multiple ordenado. → **Multigrafo Ponderados dirigido**
- Sí E es un conjunto de multiple no ordenado. → **Multigrafo Ponderados No dirigido**

Intro to Graph

Graph Theory

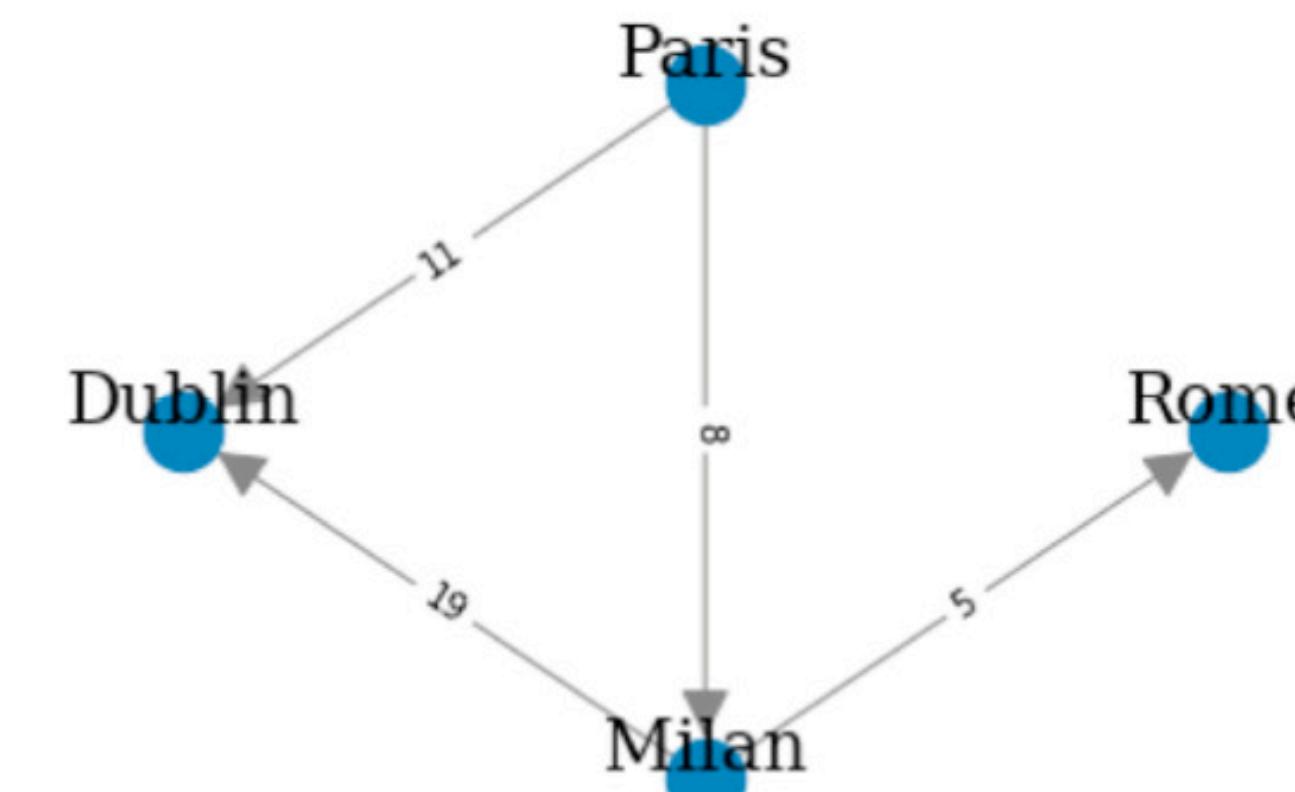
Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Multigrafos

$$V = [\text{Paris}, \text{Milan}, \text{Dublin}, \text{Rome}]$$

$$E = [(\text{Milan}, \text{Dublin}, 19), (\text{Paris}, \text{Milan}, 8), (\text{Paris}, \text{Dublin}, 11), (\text{Milan}, \text{Rome}, 5)]$$



Intro to Graph

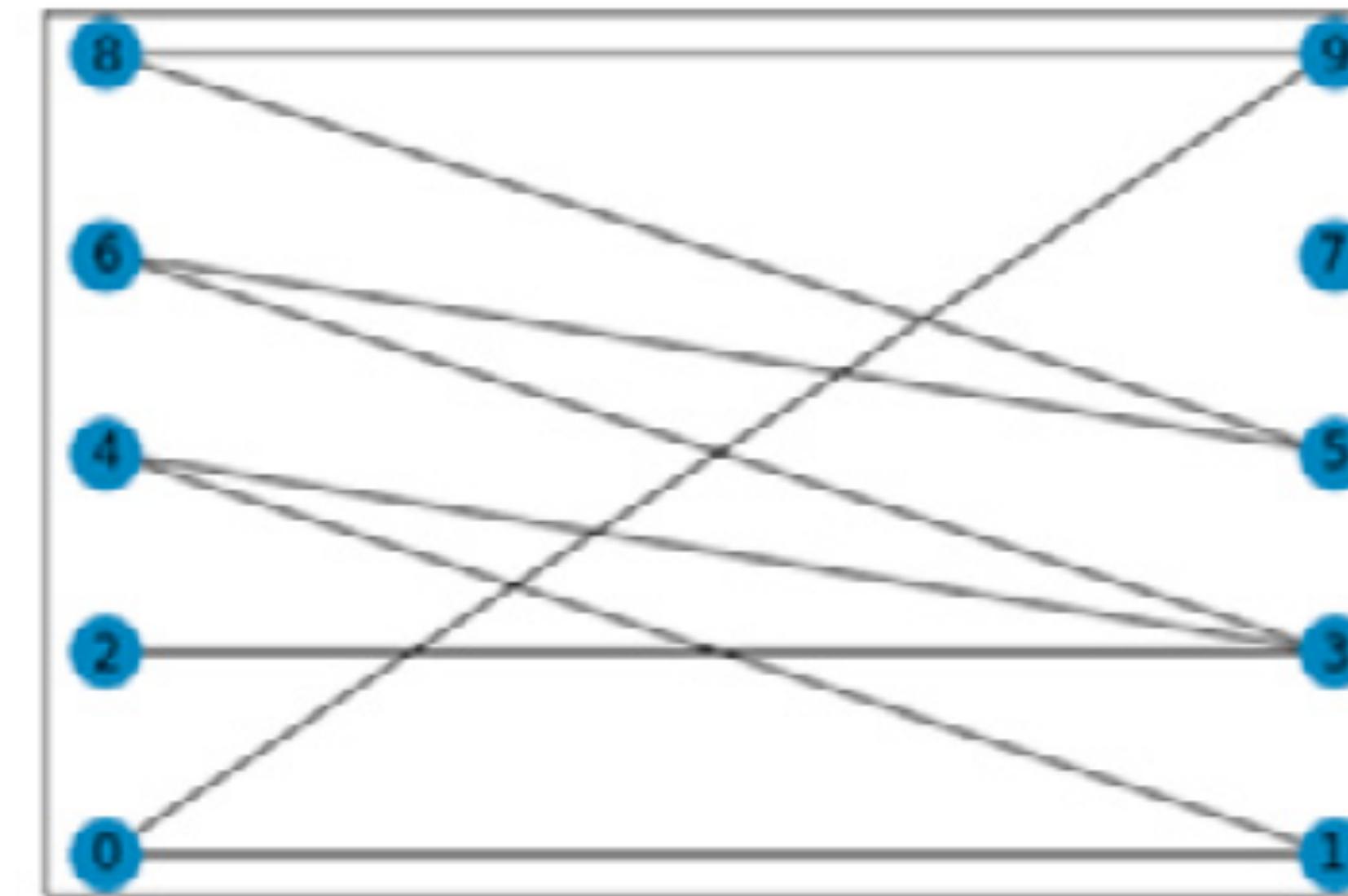
Graph Theory

Graph

Los gráficos son un lenguaje general para describir y analizar entidades con relaciones/interacciones.

Grafos bipartitos (tripartitos, ..., k-ésimos).

- Vertices divisibles
- No se permite que un nodo este en más de un vértice



Intro to Graph

Graph Representation

Representaciones Gráficas

Definir y manipular un grafo utilizando objetos de nodo y borde.

Matriz de
Adyacencia

Lista de aristas

Graph embeddings

→ *Next class*

Intro to Graph

Graph Representation

Matriz de Adyacencia
Representación matricial de un grafo.

Matriz de adyacencia M

$$G = (V, E)$$

Matriz de cuadrada
($|V| \cdot |V|$)

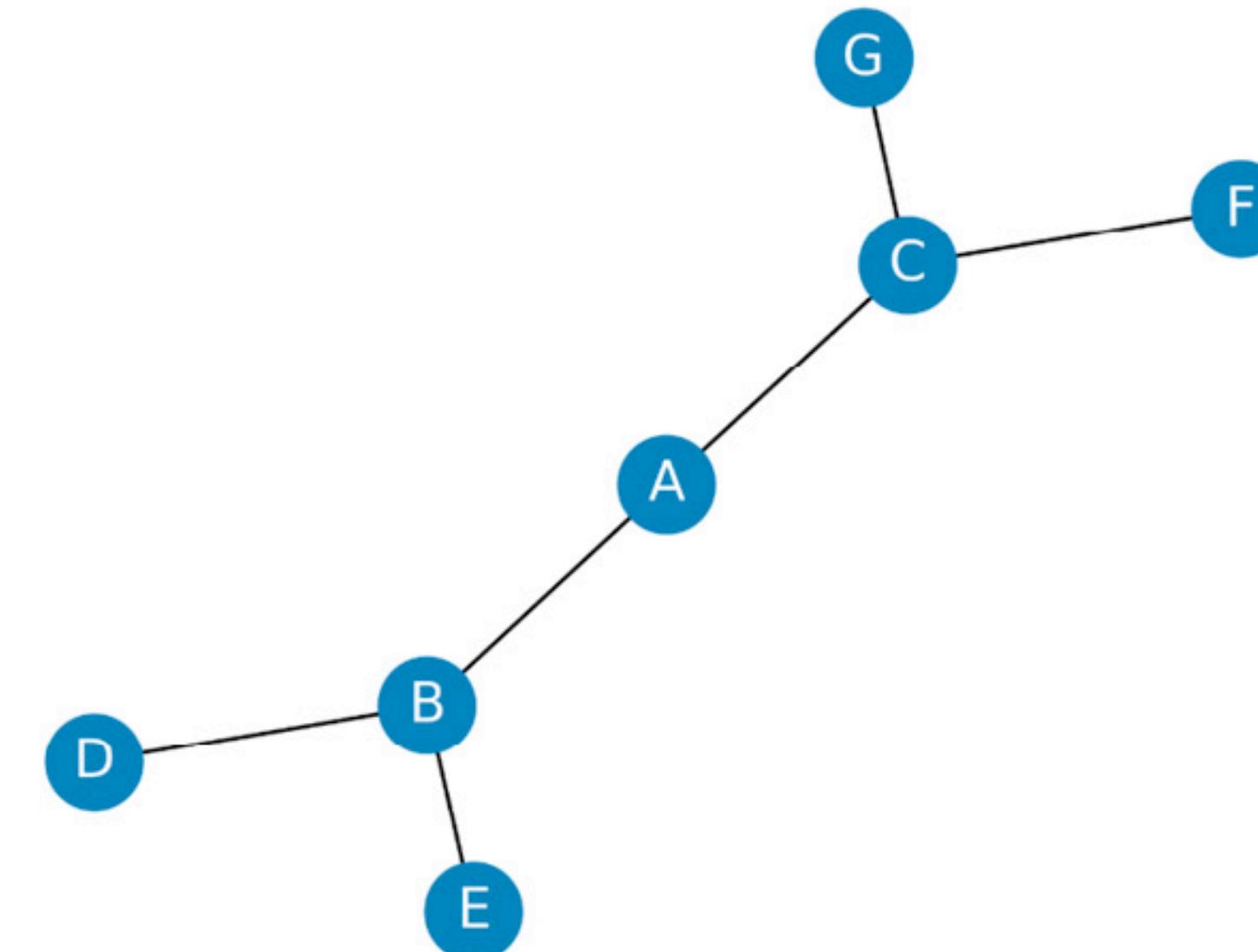
Tal que:

- $M_{ij} = 1 \longrightarrow$ Cuando tenemos una arista del nodo i al nodo j .
- $M_{ij} = 0 \longrightarrow$ Cuando no tenemos una arista del nodo i al nodo j .

Intro to Graph

Graph Representation

**Matriz de
Adyacencia**
Representación
matricial de un grafo.



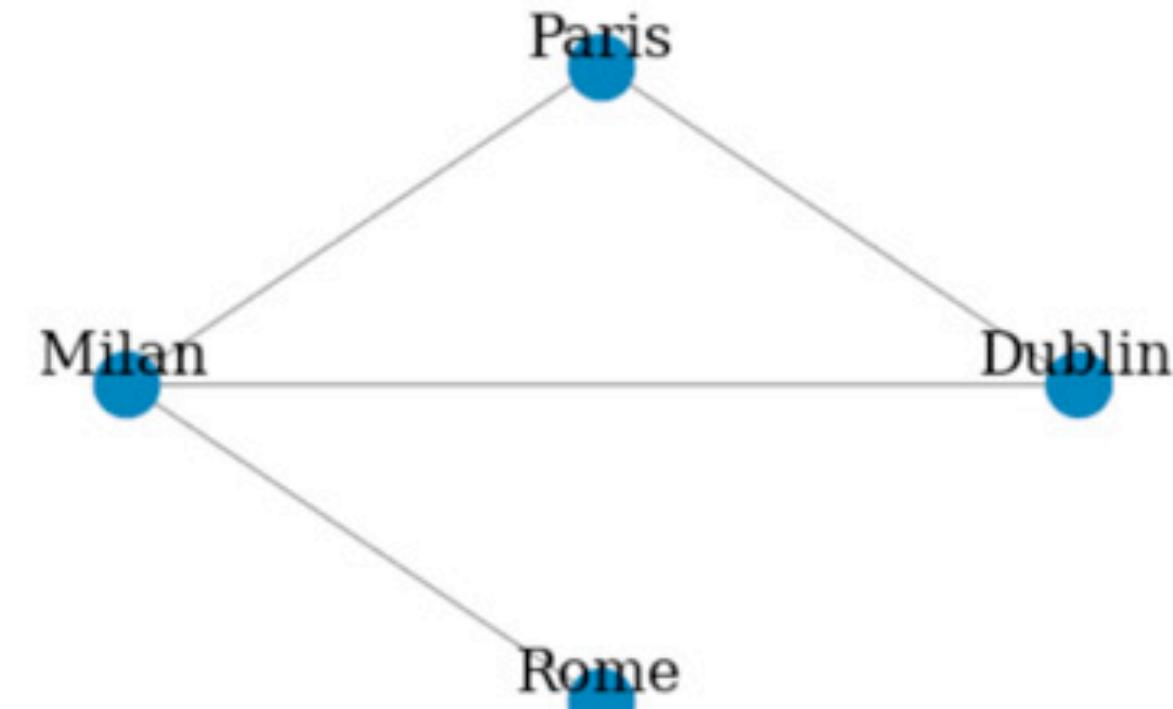
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Intro to Graph

Graph Representation

Matriz de Adyacencia
Representación matricial de un grafo.

Matriz de Adyacencia
Grafo No Dirigido:



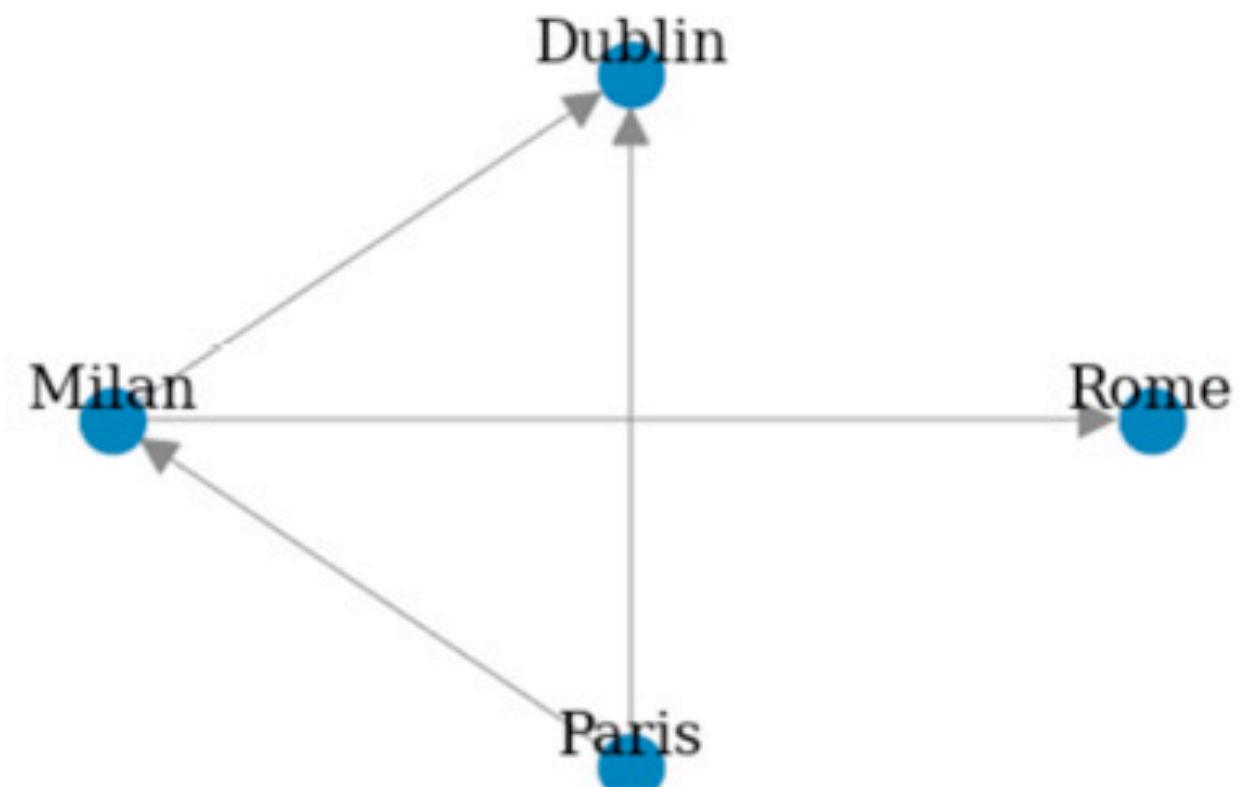
	Milan	Paris	Dublin	Rome
Milan	0	1	1	1
Paris	1	0	1	0
Dublin	1	1	0	0
Rome	1	0	0	0

Intro to Graph

Graph Representation

Matriz de Adyacencia
Representación matricial de un grafo.

Matriz de Adyacencia
Grafo Dirigido:



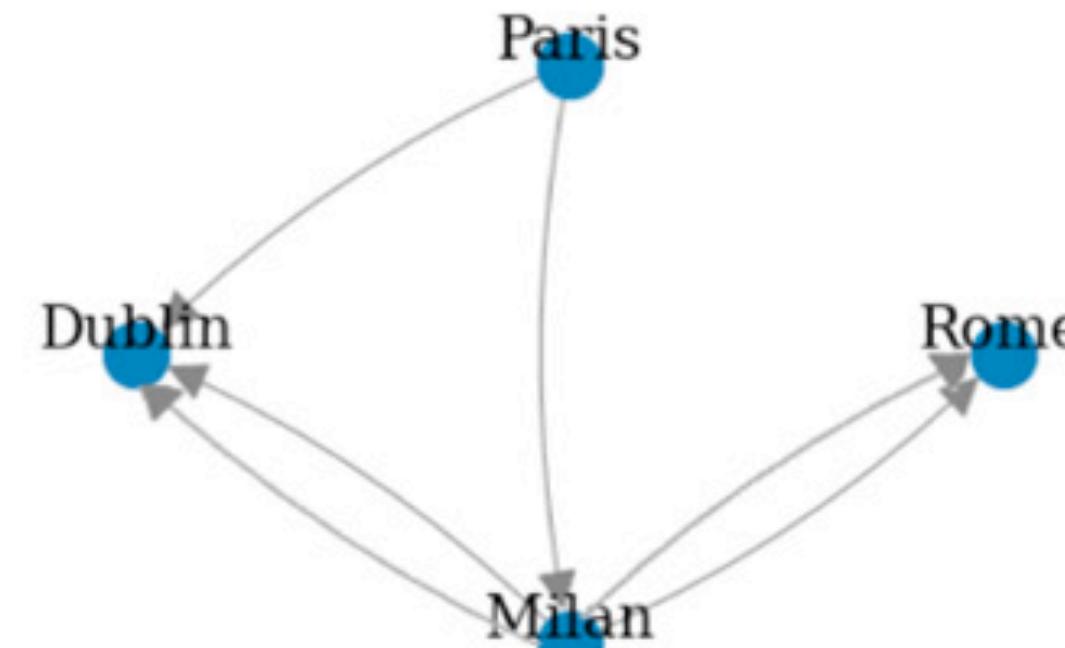
	Milan	Paris	Dublin	Rome
Milan	0	0	1	1
Paris	1	0	1	0
Dublin	0	0	0	0
Rome	0	0	0	0

Intro to Graph

Graph Representation

Matriz de Adyacencia
Representación matricial de un grafo.

Matriz de Adyacencia
Multigrafo:



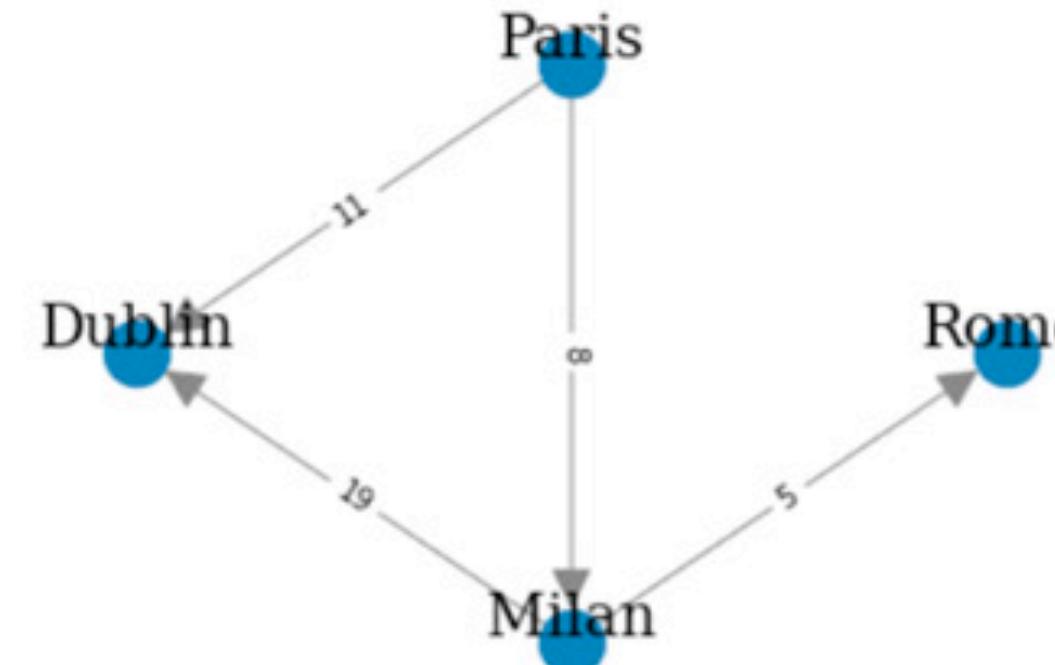
	Milan	Paris	Dublin	Rome
Milan	0	0	2	2
Paris	1	0	1	0
Dublin	0	0	0	0
Rome	0	0	0	0

Intro to Graph

Graph Representation

**Matriz de
Adyacencia**
*Representación
matricial de un grafo.*

Matriz de Adyacencia
Grafo Ponderado:



	Milan	Paris	Dublin	Rome
Milan	0	0	19	5
Paris	8	0	11	0
Dublin	0	0	0	0
Rome	0	0	0	0

Intro to Graph

Graph Representation

Matriz de Adyacencia
Representación matricial de un grafo.

Matriz de Adyacencia
Ejercicio: *Dibujar el grafo de la matriz adyacente*

$$A = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & X & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & X & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 1 & X & 1 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 1 & X & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & X \\ \hline \end{array}$$

1 2 3 4 5 6

? ?

Intro to Graph

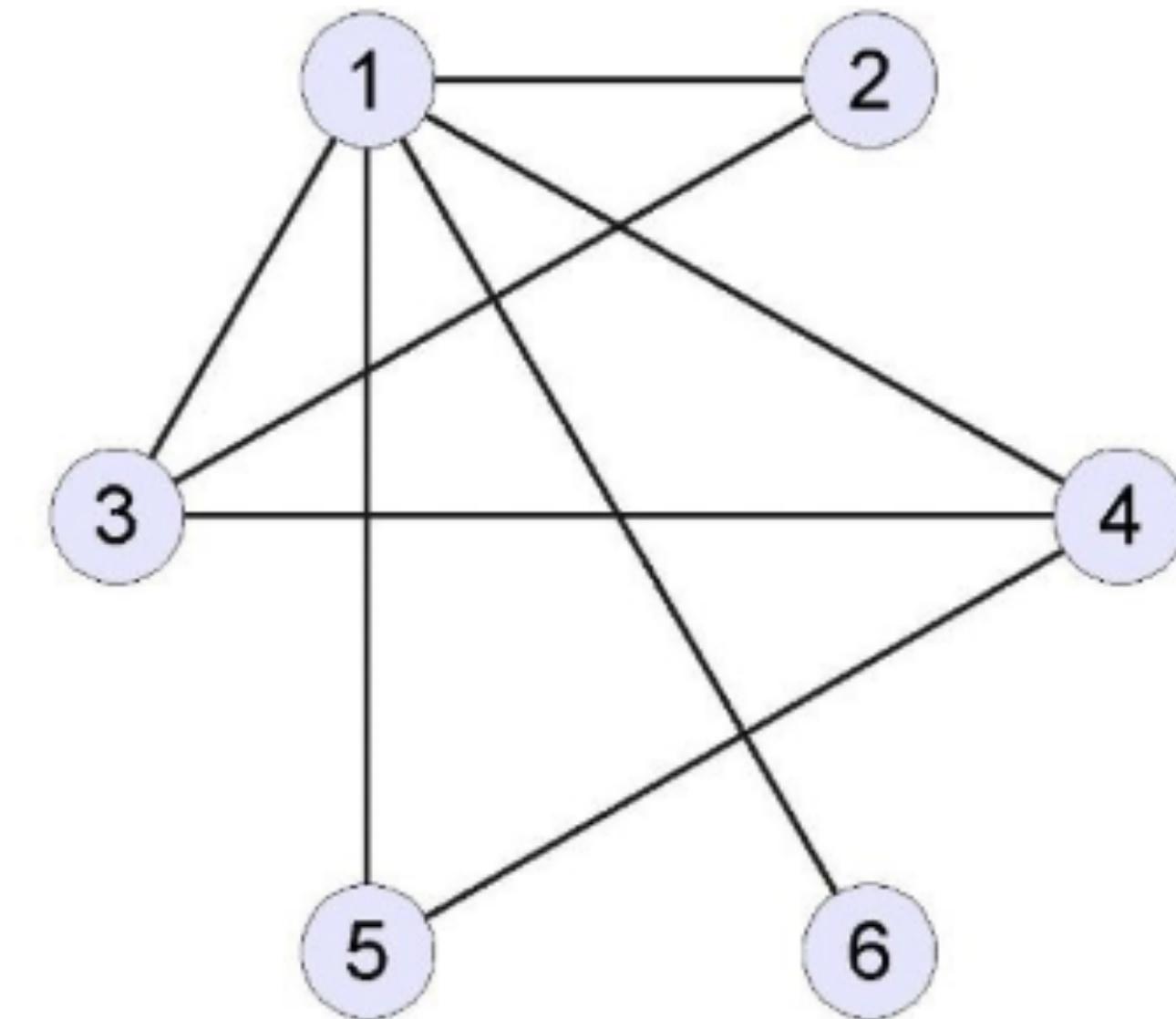
Graph Representation

Matriz de Adyacencia
Representación matricial de un grafo.

Matriz de Adyacencia
Ejercicio: *Dibujar el grafo de la matriz adyacente*

$$A = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|} \hline & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & X & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & X & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 1 & X & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 1 & X & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & X & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & X \\ \hline \end{array}$$

1 2 3 4 5 6



Intro to Graph

Graph Representation

**Lista de bordes/
aristas**
*Forma compacta de
representar grafos.*

Lista de bordes o aristas

L *Lista de aristas (bordes)*

Tamaño de la lista $|E|$

L_i *Es una pareja de cola y nodo final del borde i*

$$G = (V, E)$$

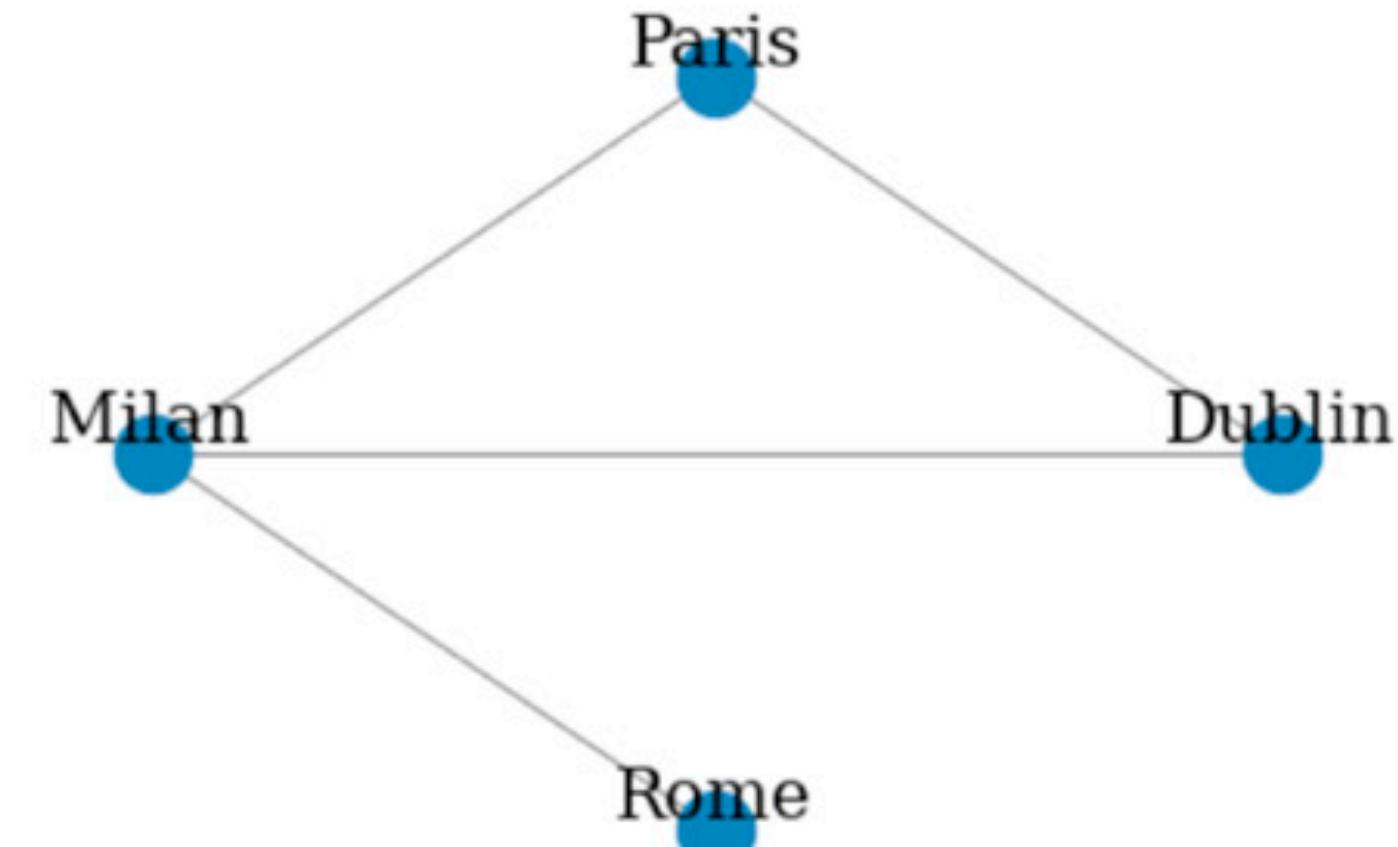
Intro to Graph

Graph Representation

**Lista de bordes/
aristas**

*Forma compacta de
representar grafos.*

Lista de bordes o aristas



Grafo no dirigido

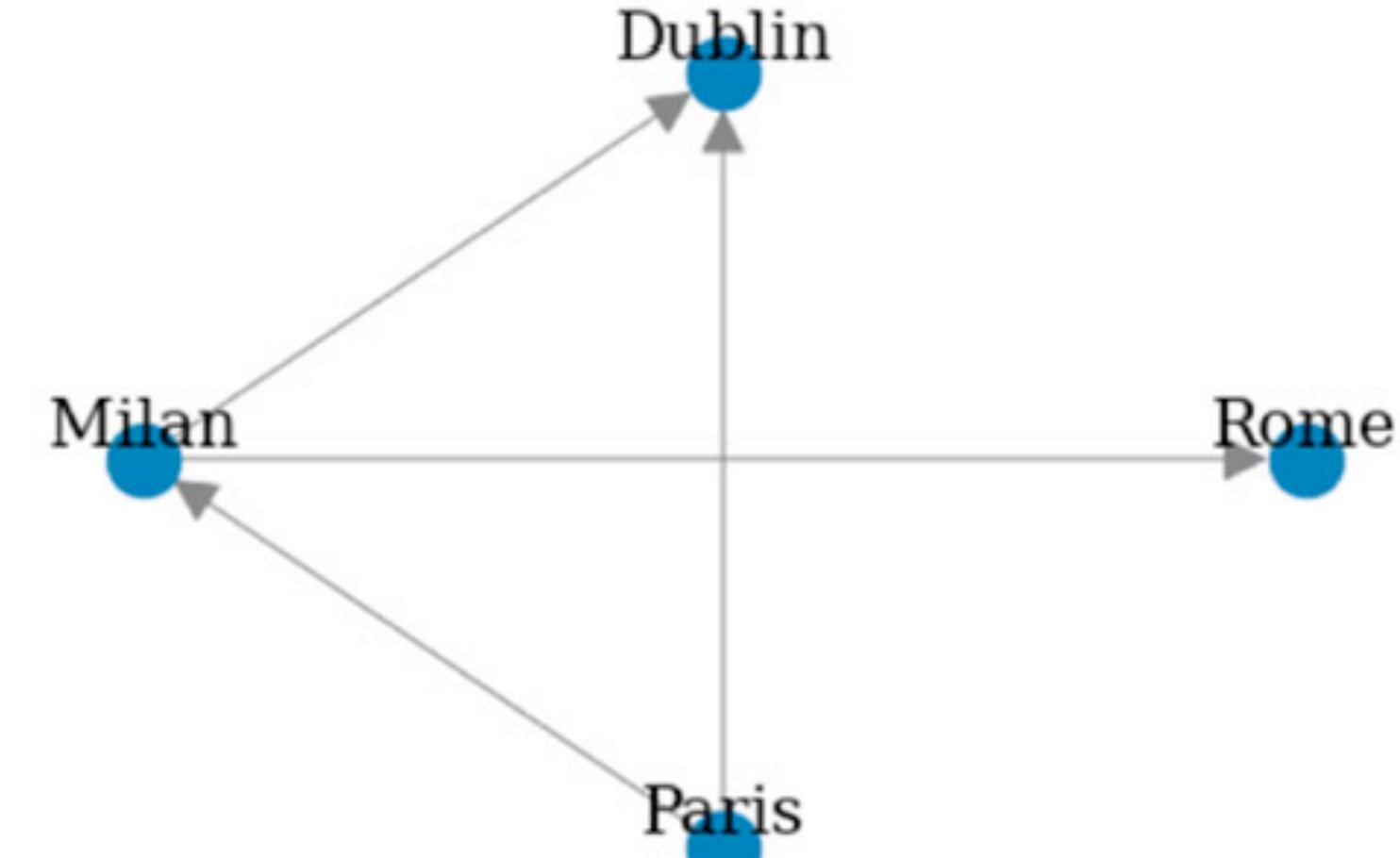
1	Edge
2	{Milan, Dublin}
2	{Milan, Paris}
3	{Paris, Dublin}
4	{Milan, Rome}

Intro to Graph

Graph Representation

**Lista de bordes/
aristas**
*Forma compacta de
representar grafos.*

Lista de bordes o aristas



Grafo dirigido

	Edge
1	(Milan, Dublin)
2	(Paris, Milan)
3	(Paris, Dublin)
4	(Milan, Rome)

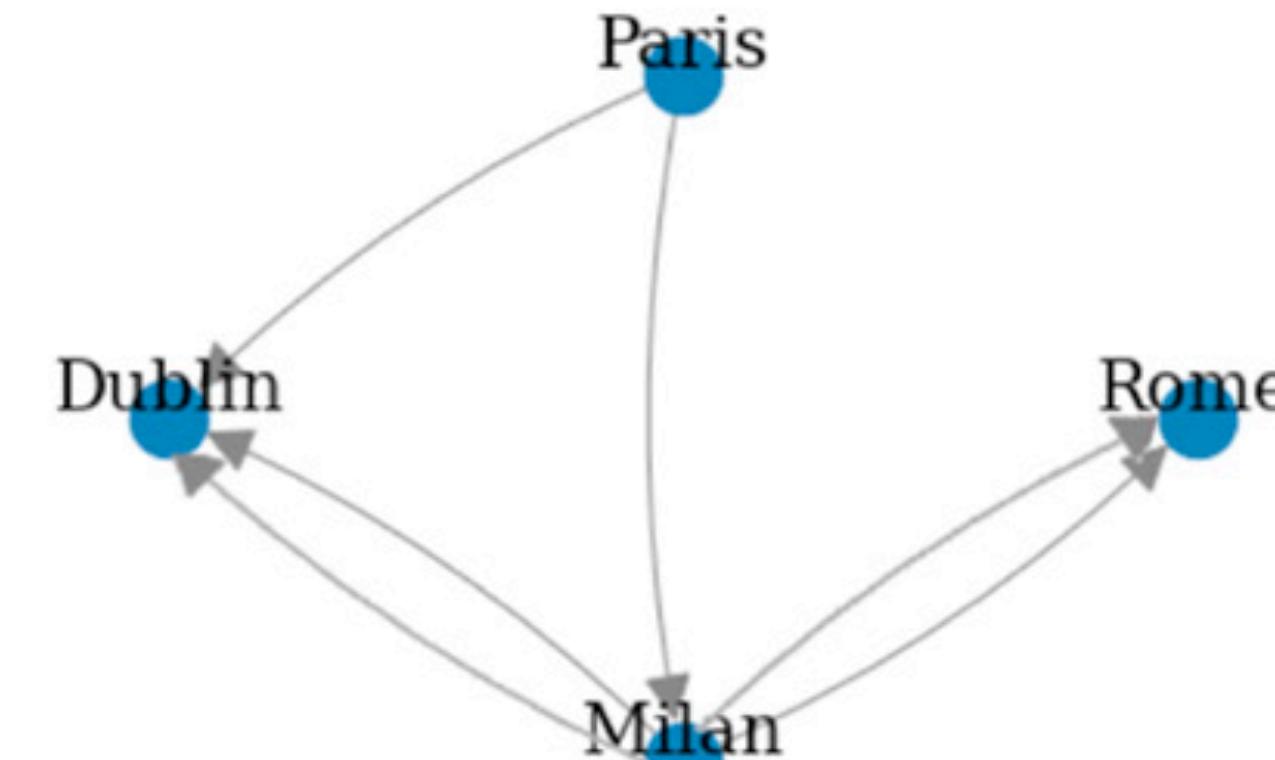
Intro to Graph

Graph Representation

**Lista de bordes/
aristas**

*Forma compacta de
representar grafos.*

Lista de bordes o aristas Multigrafo



Edge

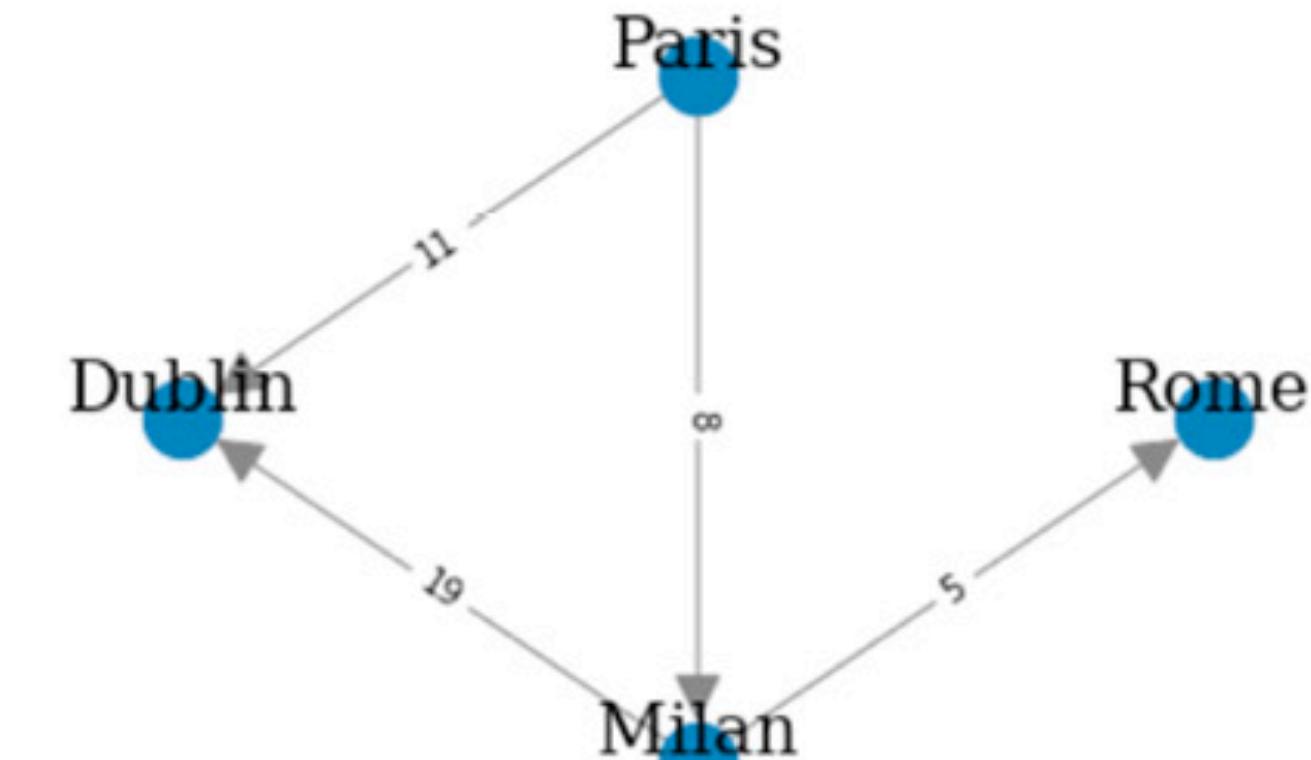
- | | |
|---|-----------------|
| 1 | (Milan, Dublin) |
| 2 | (Milan, Dublin) |
| 3 | (Milan, Rome) |
| 4 | (Milan, Rome) |
| 5 | (Paris, Dublin) |
| 6 | (Paris, Milan) |

Intro to Graph

Graph Representation

**Lista de bordes/
aristas**
*Forma compacta de
representar grafos.*

Lista de bordes o aristas



Grafo ponderado

Edge	Weight
1 (Milan, Dublin)	19
2 (Paris, Milan)	8
3 (Paris, Dublin)	11
4 (Milan, Rome)	5

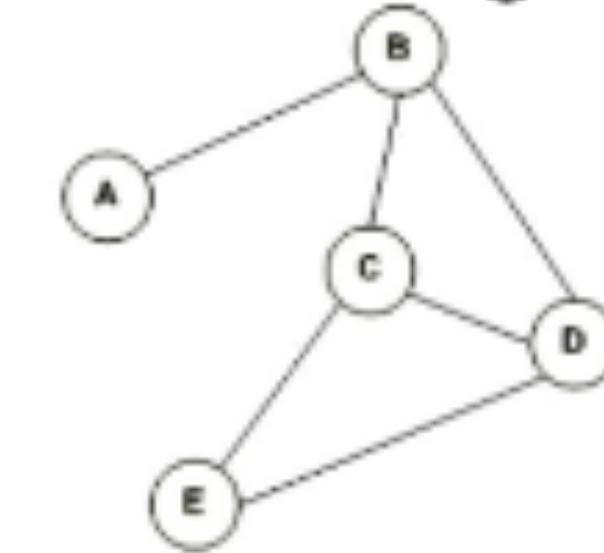
Intro to Graph

Graph Types

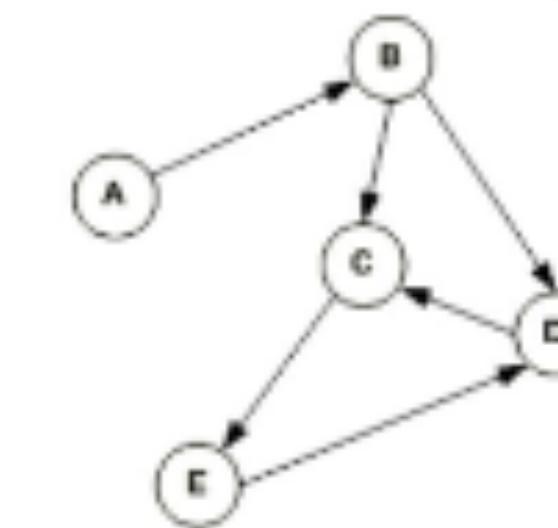
Tipos de grafos

Existen muchas formas de grafos..

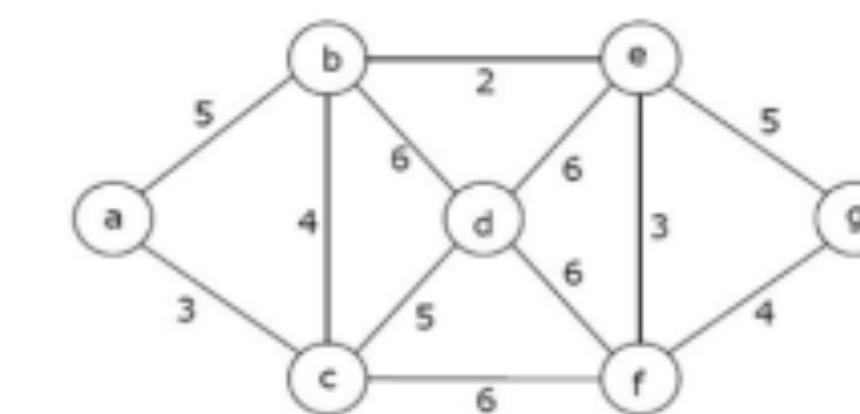
Grafo no dirigido



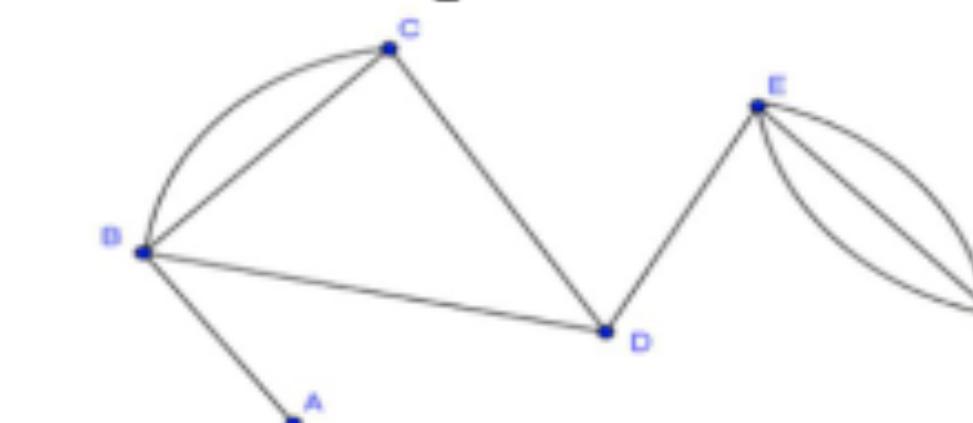
Grafo dirigido



Grafo con pesos



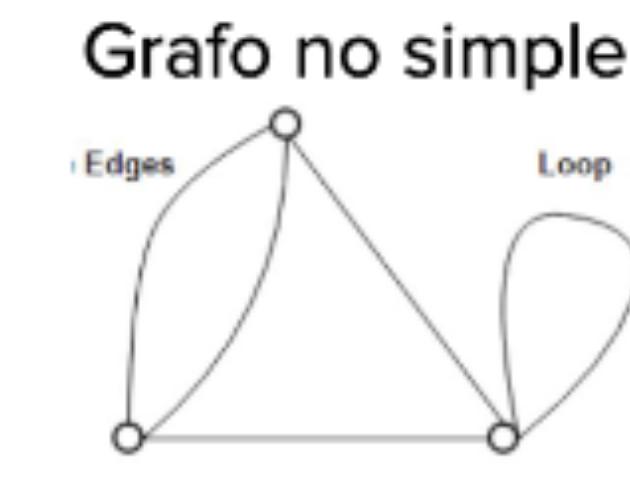
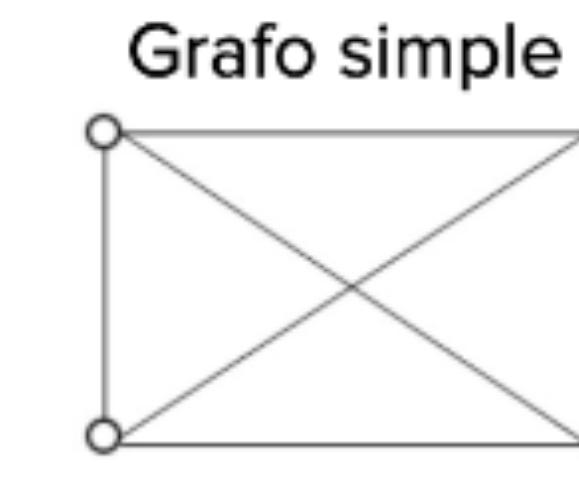
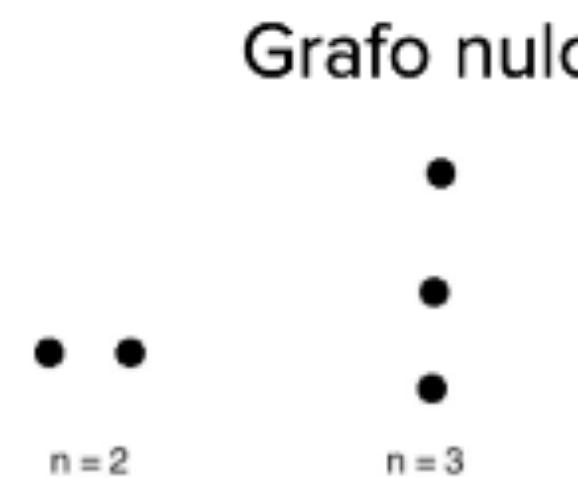
Multigrafo



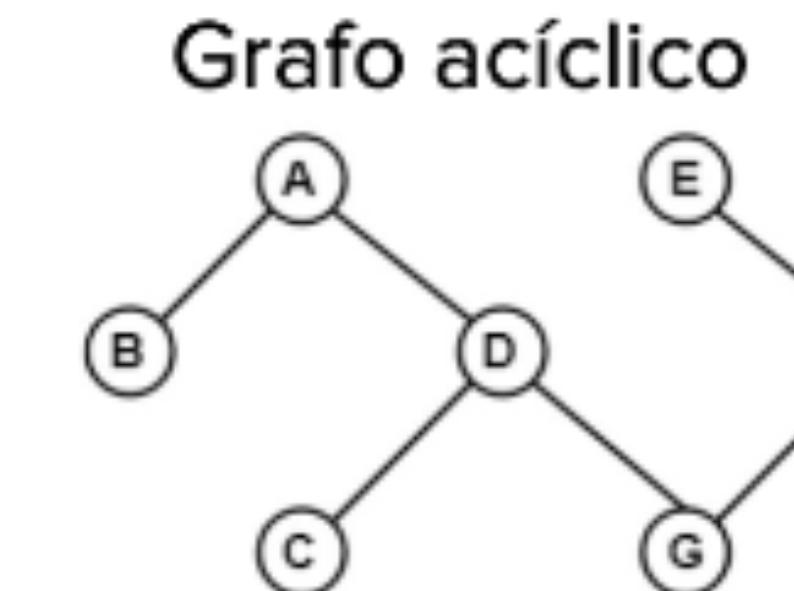
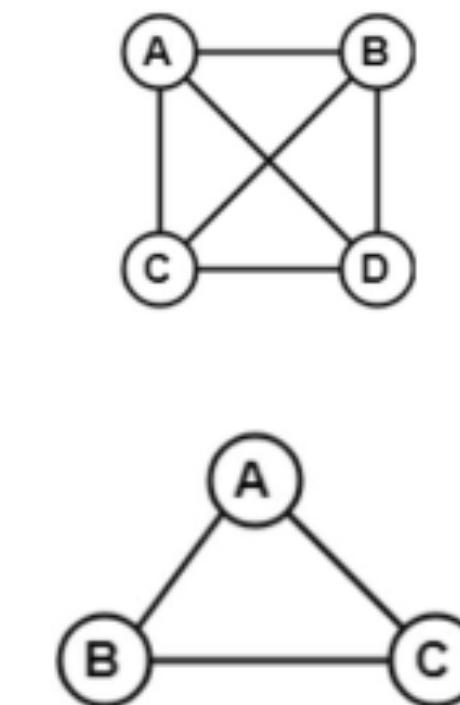
Intro to Graph

Graph Types

Tipos de grafos
Existen muchas formas de grafos..



Grafo completo



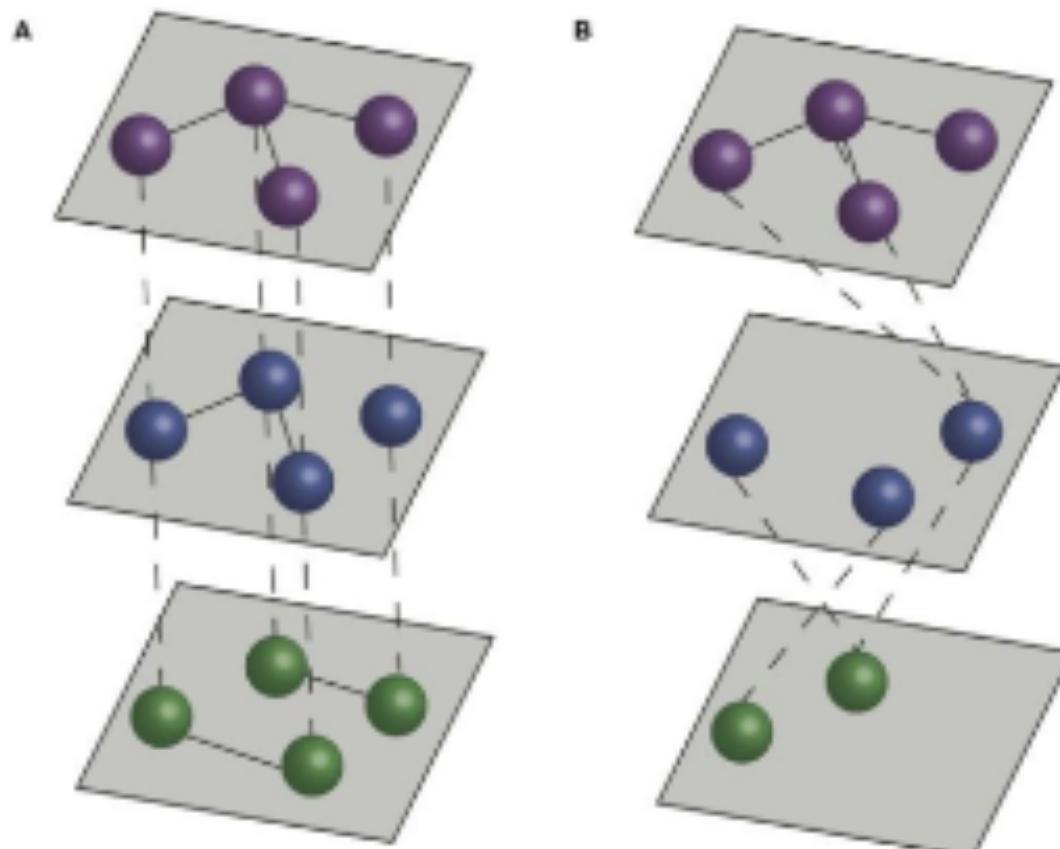
Intro to Graph

Graph Types

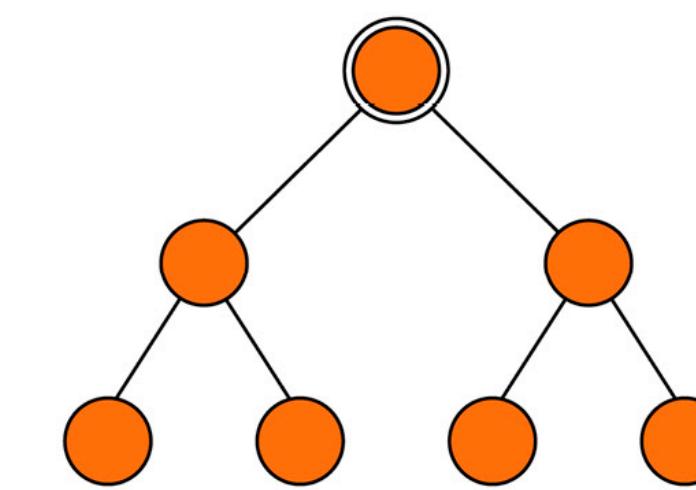
Tipos de grafos

Existen muchas formas de grafos..

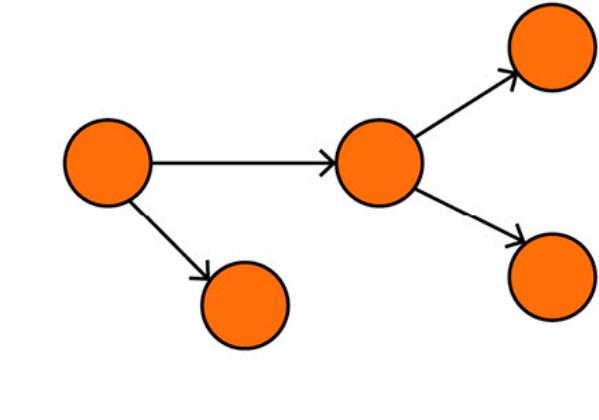
Grafos multi-capas (multi-layer networks)



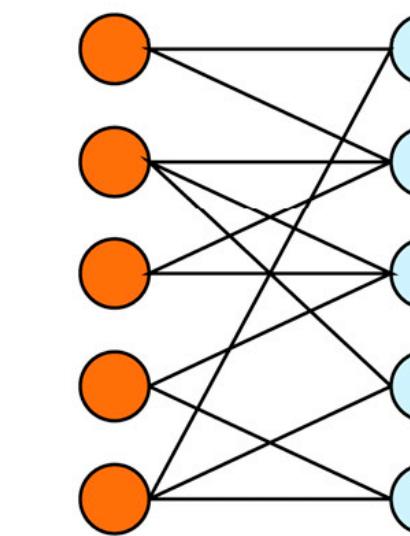
Rooted tree/tree



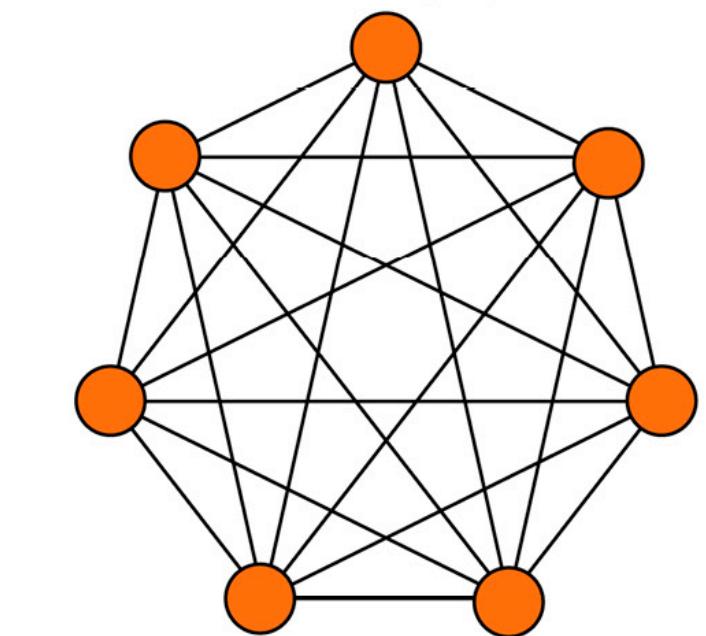
Directed acyclic graph



Bipartite graph



Complete graph

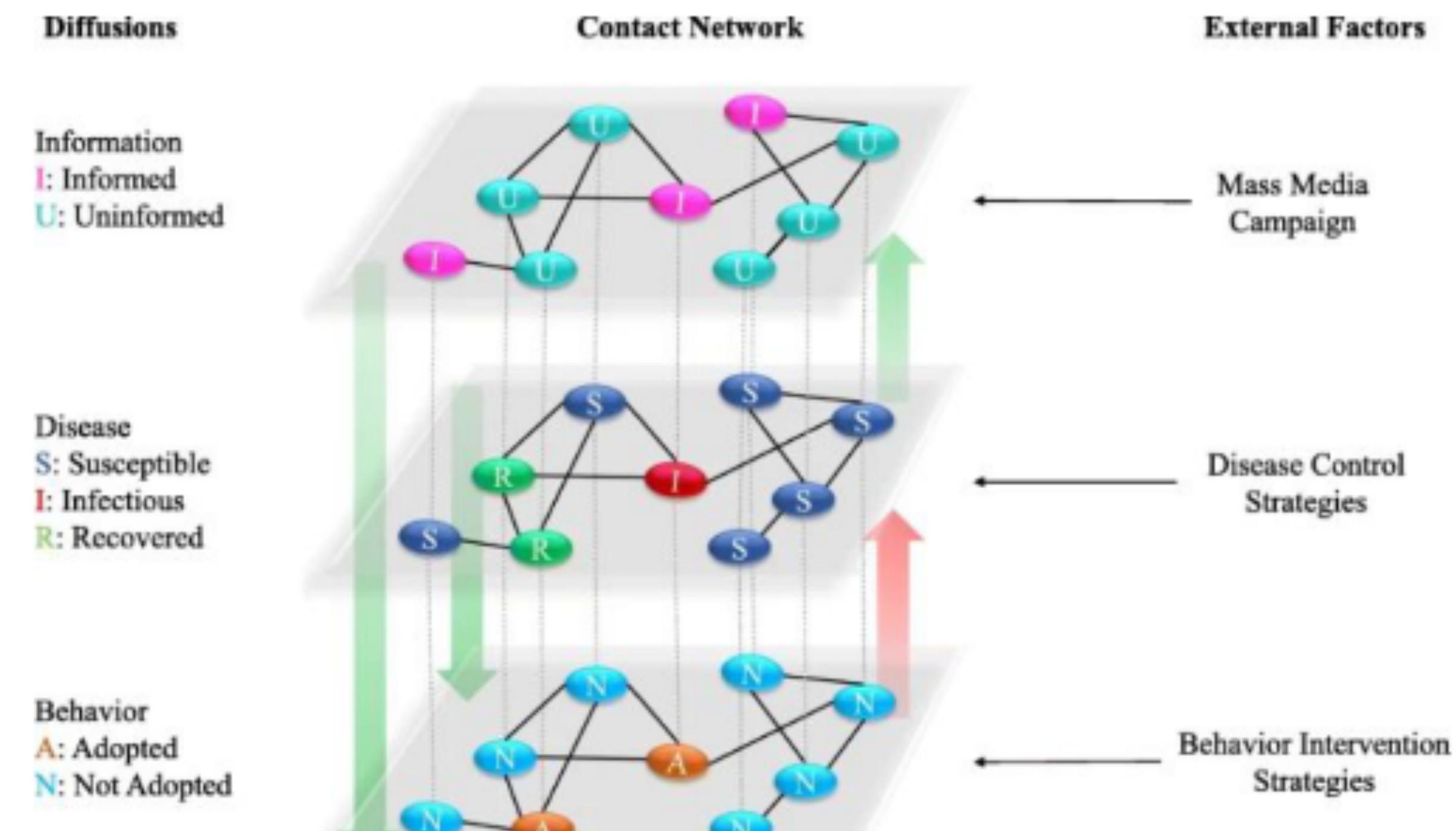


Intro to Graph

Graph Types

Grafos Multicapa

Agrupación por capas

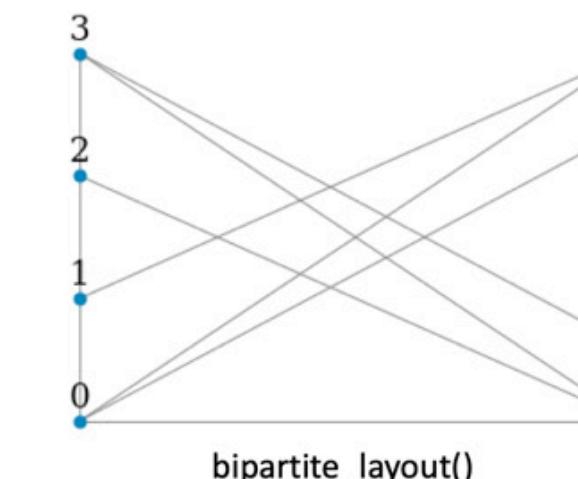


Intro to Graph

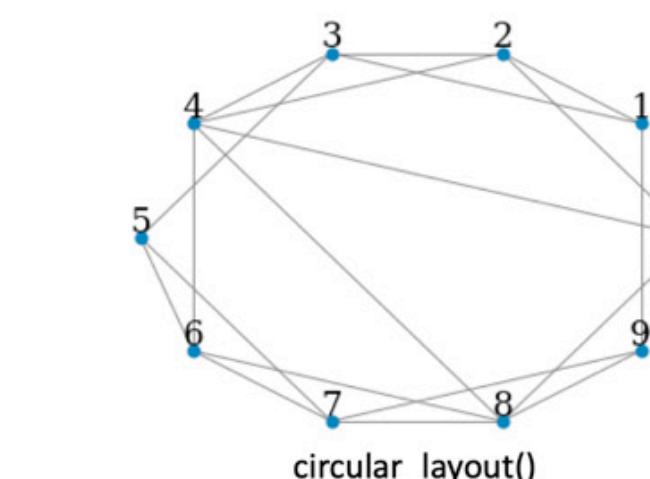
Graph Plot

Grafos visualización

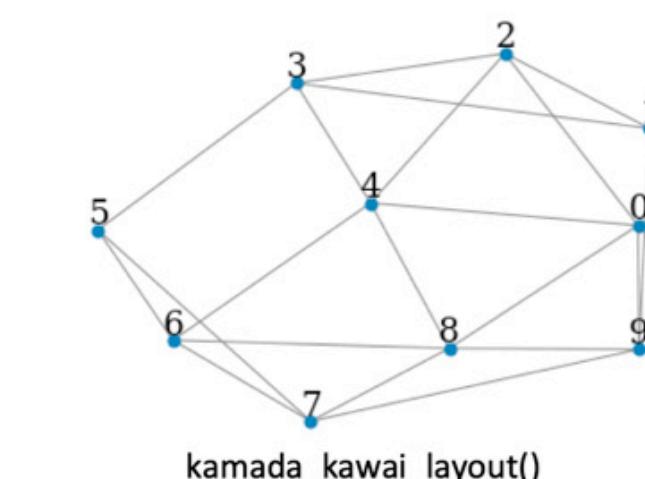
*Existen muchas formas
de visualizar los grafos.*



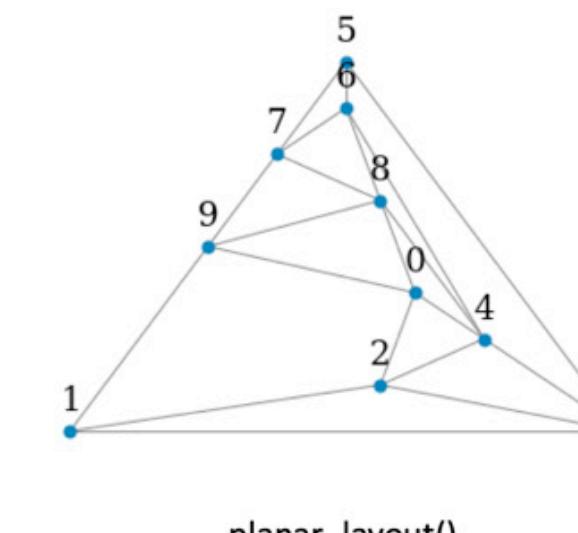
bipartite_layout()



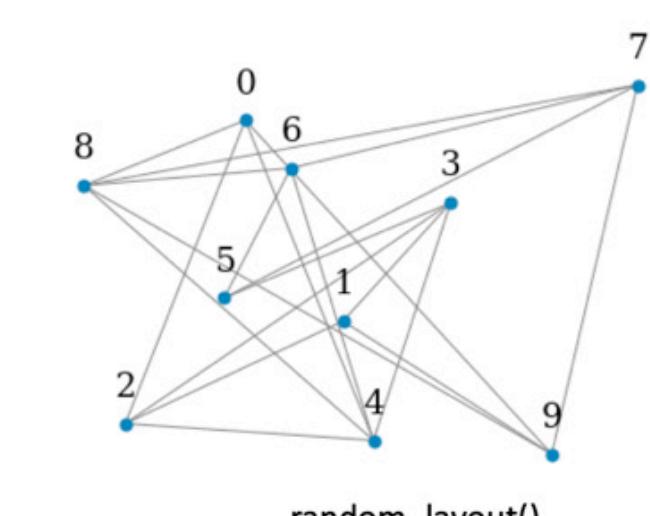
circular_layout()



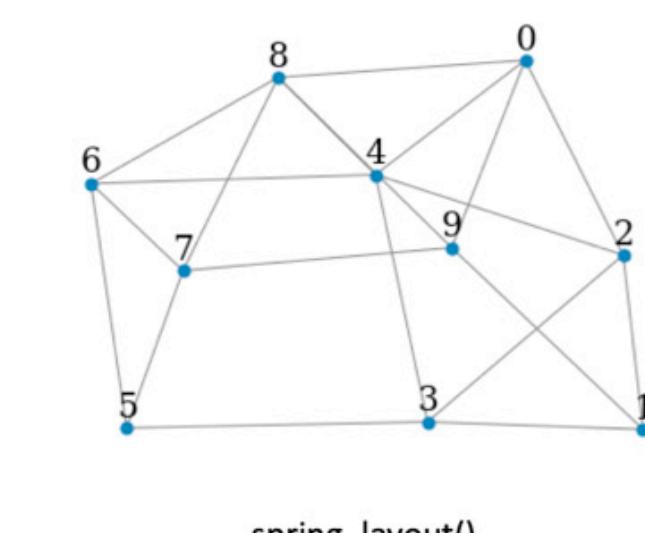
kamada_kawai_layout()



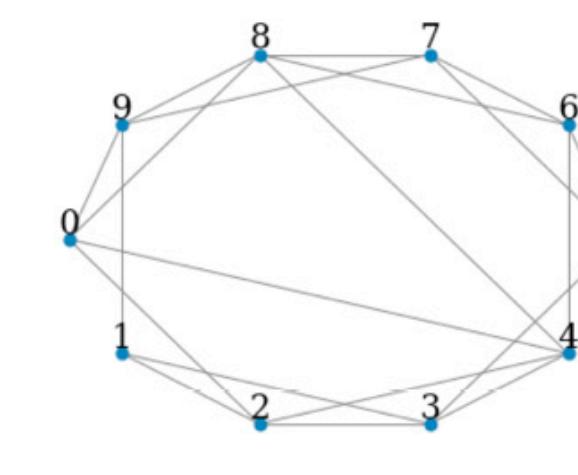
planar_layout()



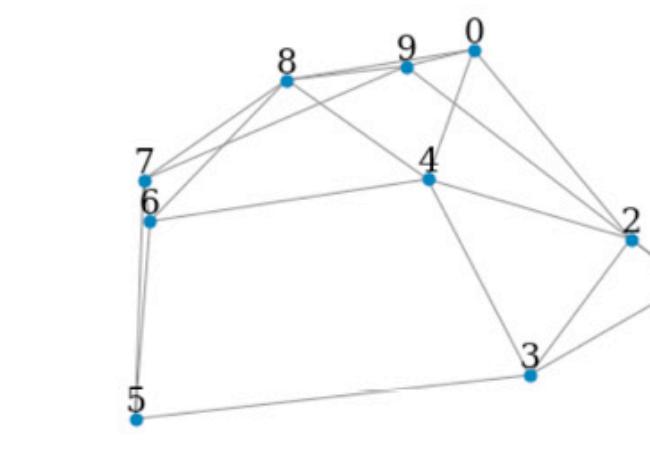
random_layout()



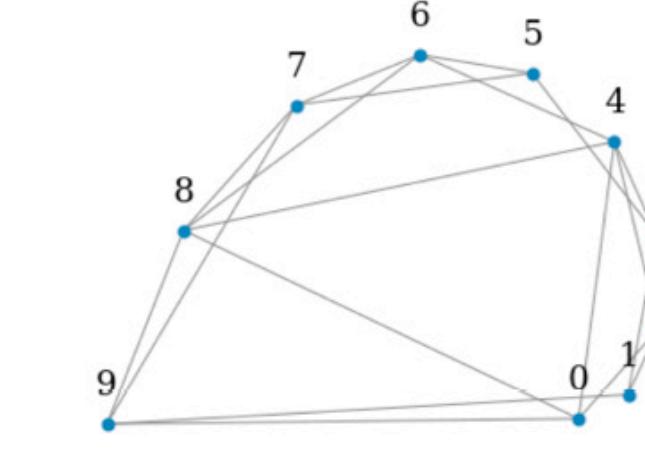
spring_layout()



shell_layout()



spectral_layout()



spiral_layout()

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas Globales

expresan una medida de una red general.

Métricas Locales

Miden valores de elementos individuales de la red (nodos o bordes).

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Métricas de Centralidad

Métricas de Segregación

Métricas de Resiliencia

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Métricas de Centralidad

Métricas de Segregación

Métricas de Resiliencia

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Métricas de Centralidad

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Métricas de Resiliencia

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Métricas de Centralidad

Evaluá la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Métricas de Resiliencia

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Métricas de Centralidad

Evaluá la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Distancia - camino - camino más corto:

Distancia: *Cantidad de nodos para atravesar para alcanzar el nodo objetivo desde un nodo fuente.*

Camino: *Conjunto de aristas que conectan al nodo i con otro nodo j*

$i \longrightarrow$ Nodo de origen
 $j \longrightarrow$ Nodo destino

Camino más corto: *La ruta más corta entre el nodo de origen i y el nodo destino j es la ruta que tiene el menor número de bordes en comparación con todas las rutas posibles entre i y j .*

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Camino más corto:



- $i \longrightarrow$ Tokio: nodo de origen
- $j \longrightarrow$ Dublín: nodo destino

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Average Shortest Path Length:

$$\frac{1}{q(q-1)} \sum_{i \in V} l_i$$

Donde:

l_i Es el promedio del tamaño de caminos entre el nodo i y todos los demás nodos.

V Es el conjunto de nodos en el grafo y $q = |V|$ representa ese orden.

Entre más pequeño el 'tamaño del camino más corto promedio' promueve la transferencia rápido de conocimiento/información.

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Average Shortest Path Length:

$$\frac{1}{q(q - 1)} \sum_{i \in V} l_i$$

- Entre más pequeño el 'tamaño del camino más corto promedio' promueve la transferencia rápido de conocimiento/información.
- Esta métrica no siempre se puede definir, ya que no es posible calcular una ruta entre nodos en un grafo desconectado.

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Eficiencia Global:

l_i *Es el camino más corto entre un nodo i y un nodo j*

$$\frac{1}{q(q-1)} \sum_{i \in V} \frac{1}{l_{ij}}$$

El promedio de la longitud inversa del camino más corto para todos los pares de nodos.

La eficiencia es máxima cuando un gráfico está completamente conectado

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Eficiencia Global:

l_i *Es el camino más corto entre un nodo i y un nodo j*

$$\frac{1}{q(q-1)} \sum_{i \in V} \frac{1}{l_{ij}}$$

- La eficiencia es máxima cuando un gráfico está completamente conectado
- La eficiencia es mínima para gráficos completamente desconectados
- Intuitivamente, cuanto más corto es el camino, menor es la medida

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Eficiencia Global:

l_i *Es el camino más corto entre un nodo i y un nodo j*

$$\frac{1}{q(q-1)} \sum_{i \in V} \frac{1}{l_{ij}}$$

Eficiencia Local:

Se calcula considerando la vecindad del nodo.

Intro to Graph

Graph Properties

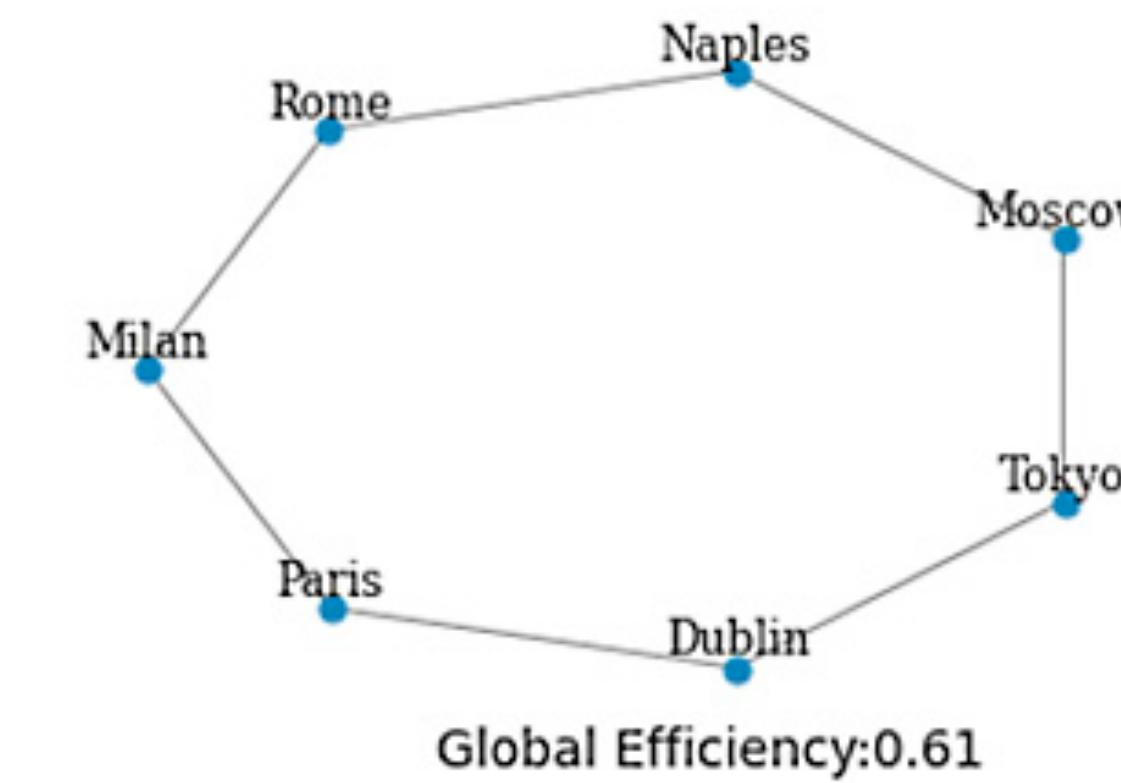
Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Eficiencia Global:



Grafo completamente conectados



Grafo circular

Intro to Graph

Graph Properties

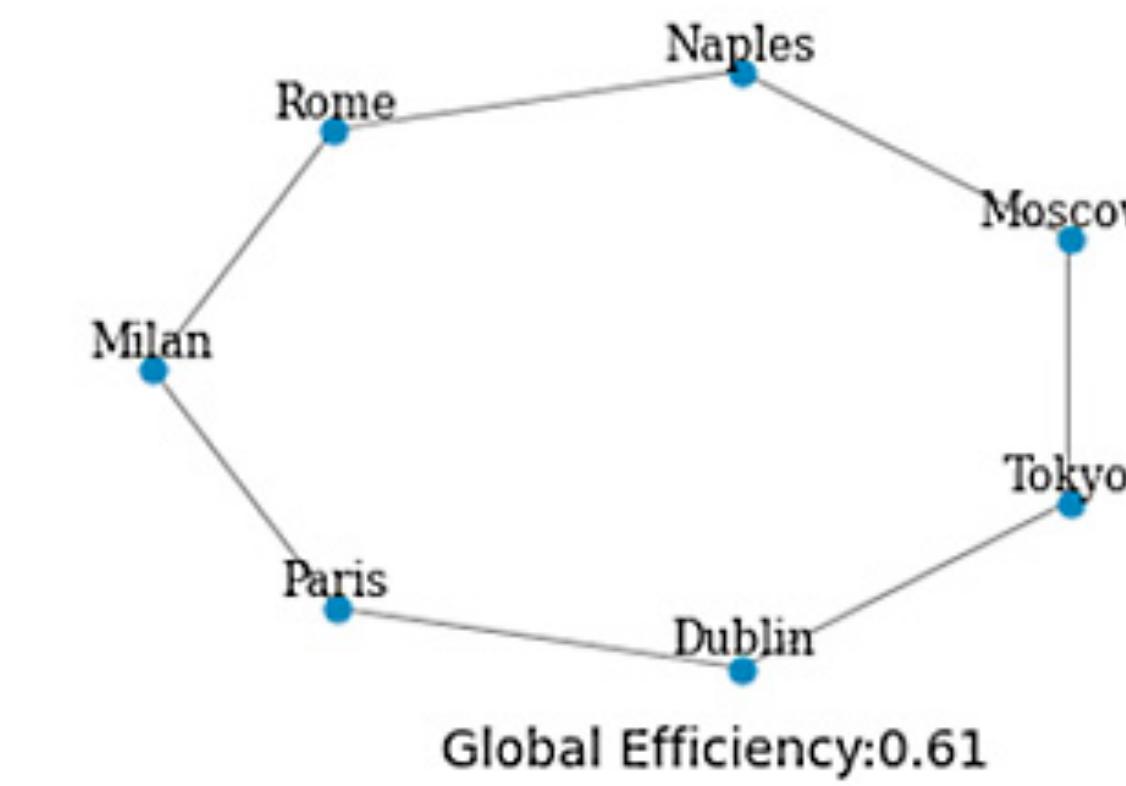
Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.

Eficiencia Global:



Grafo completamente conectados



Grafo circular

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.



Métricas de Centralidad

Evaluá la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Coeficiente de Agrupación

- Mide como cuento se agrupan los nodos

- Se define como fracción de triángulos alrededor de un nodo

- Equivale a la fracción de los vecinos del nodo que son vecinos entre sí.



subgrafo completo de tres nodos y tres aristas.



Probabilidad de un triangulo de sus vecinos.

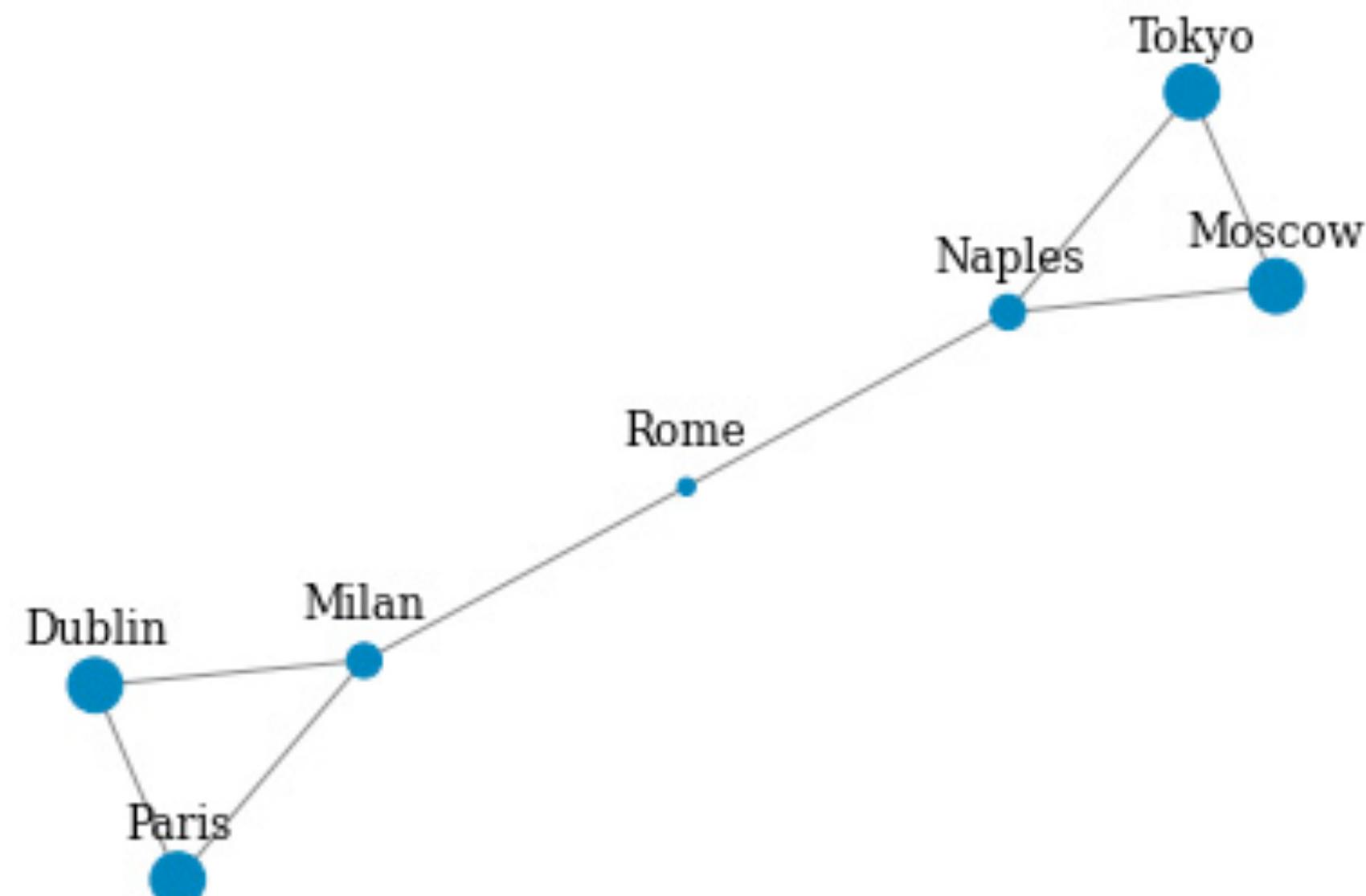
Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Coeficiente de Agrupación



{1: 1.0,
2: 1.0,
3: 0.3,
4: 0,
5: 0.3,
6: 1.0,
7: 1.0}

Intro to Graph

Graph Properties

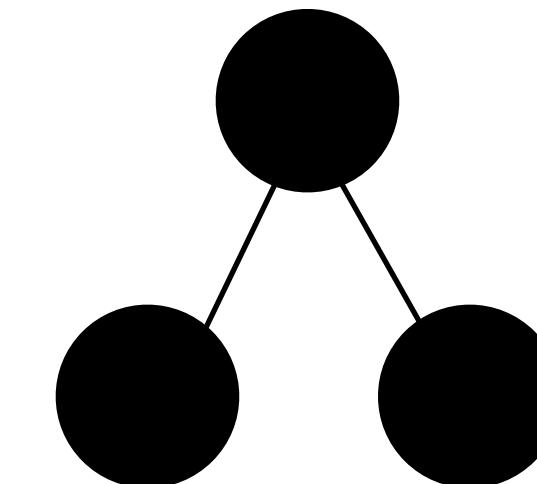
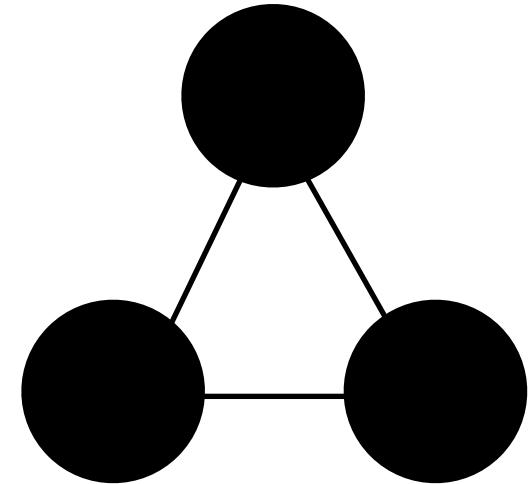
Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Transitividad

- Número observado de tripletas cerradas.

- máximo número posible de tripletas en el grafo.



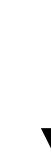
Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.

Modularidad



Usualmente computada por medios algoritmos de optimización.

Modularidad

Diseñada para cuantificar la división de una red/grafo en conjuntos agregados de altas nodos interconectados.

- Modulos

- Comunidades

- Grupos

- Clusters

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.



Métricas de Centralidad

Evalúa la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.



Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Centralidad

Evalúa la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

Grado de centralidad (Degree centrality)

- Número de aristas incidentes en un determinado nodo i
- Cuanto más nodo esté conectado a otro nodo, más alto será su grado de centralidad

Centralidad de grado de entrada

Centralidad de grado de salida

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Centralidad

Evalúa la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

Centralidad de cercanía (Closeness centrality)

Intenta cuantificar qué tan cerca (bien conectado) está un nodo de otros nodos distancia promedio de un nodo i a todos los demás nodos de la red

$$\frac{1}{\sum_{i \in V, i \neq j} l_{ij}}$$

V Conjunto de nodos de un grafo.

l_i Camino más corto entre el nodo i y j

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Centralidad

Evalúa la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

Centralidad de intermediación (Betweenness centrality)

Evalúa en qué medida un nodo actúa como puente entre otros nodos.

$$\sum_{w \neq i \neq j} \frac{L_{wj}(i)}{L_{wj}}$$

L_{wj} Es el número total de caminos más cortos entre nodo w y nodo j

$L_{wj}(i)$ Es el número total de caminos más cortos entre nodo w y nodo j y que pasan por el nodo i

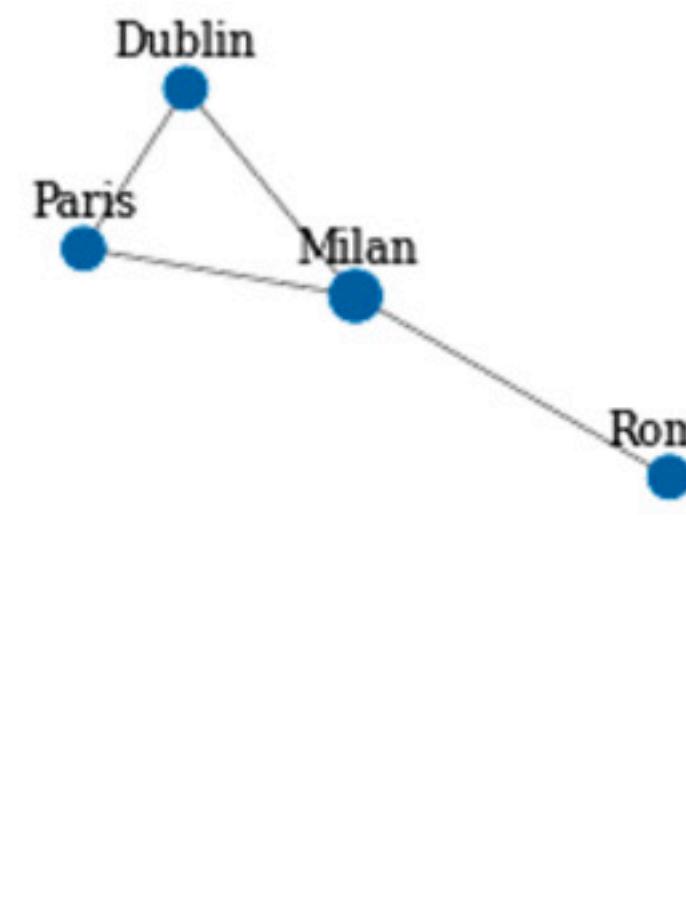
Intro to Graph

Graph Properties

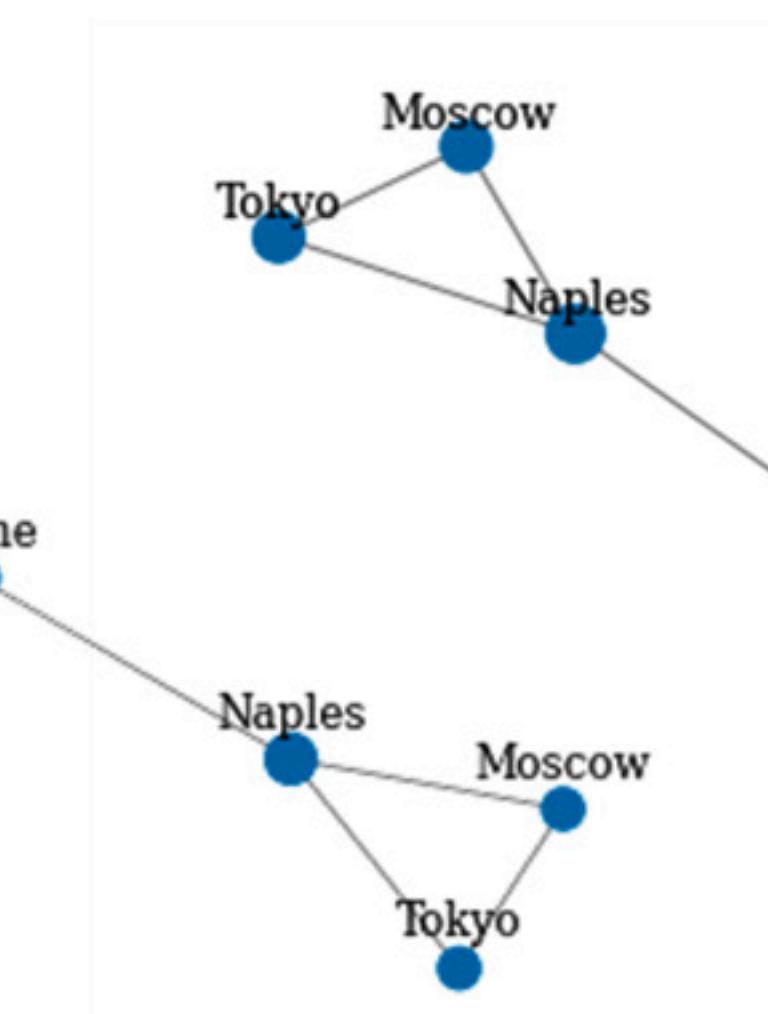
Métricas de Centralidad

Evalúa la importancia de los nodos individuales dentro de una red.

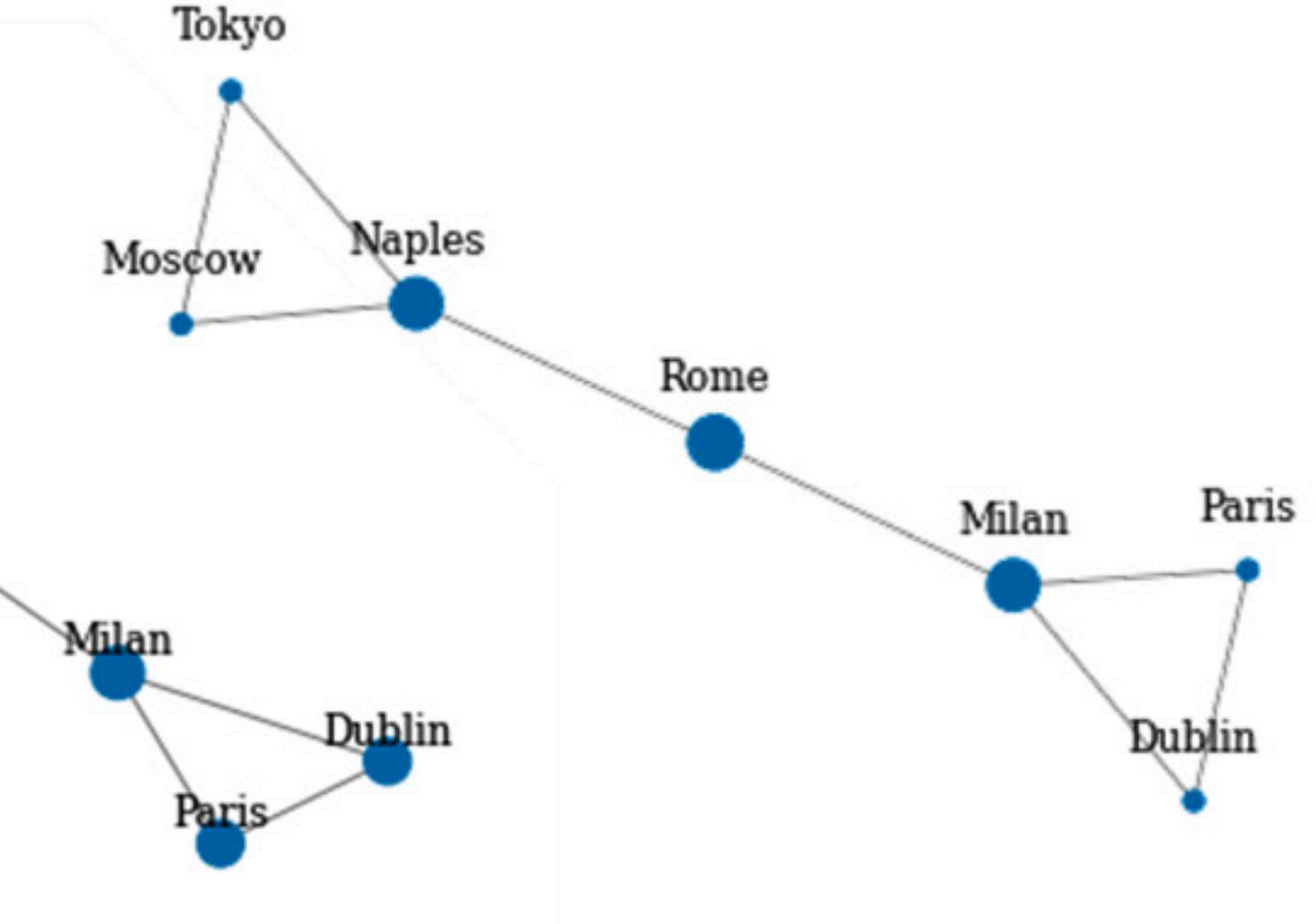
Centralidad de grado



Centralidad de cercanía



Centralidad de intermediación



Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.



Métricas de Centralidad

Evaluá la importancia de los nodos individuales dentro de una red.



Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.



Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

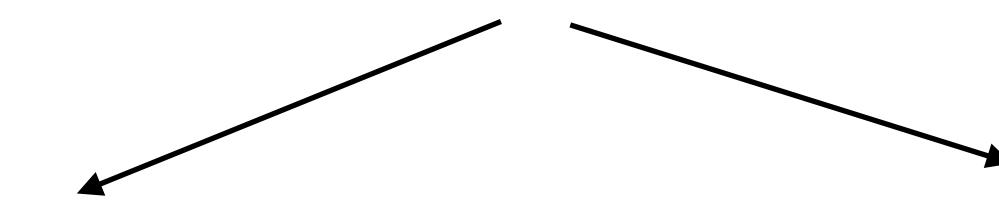
Coeficiente de Asortatividad (Assortativity coefficient)

Medir tendencia de los nodos a conectarse a nodos similares.



coeficiente de correlación de Pearson

Entre los grados de conexión directa de los nodos.



nodos en dos extremos opuestos de un enlace

Intro to Graph

Graph Properties

Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

Coeficiente de Asortatividad (Assortativity coefficient)

Medir tendencia de los nodos a conectarse a nodos similares.

El coeficiente asume valores positivos cuando existe correlación entre nodos de grado similar

El coeficiente asume valores negativos cuando existe correlación entre nodos de diferente grado

Intro to Graph

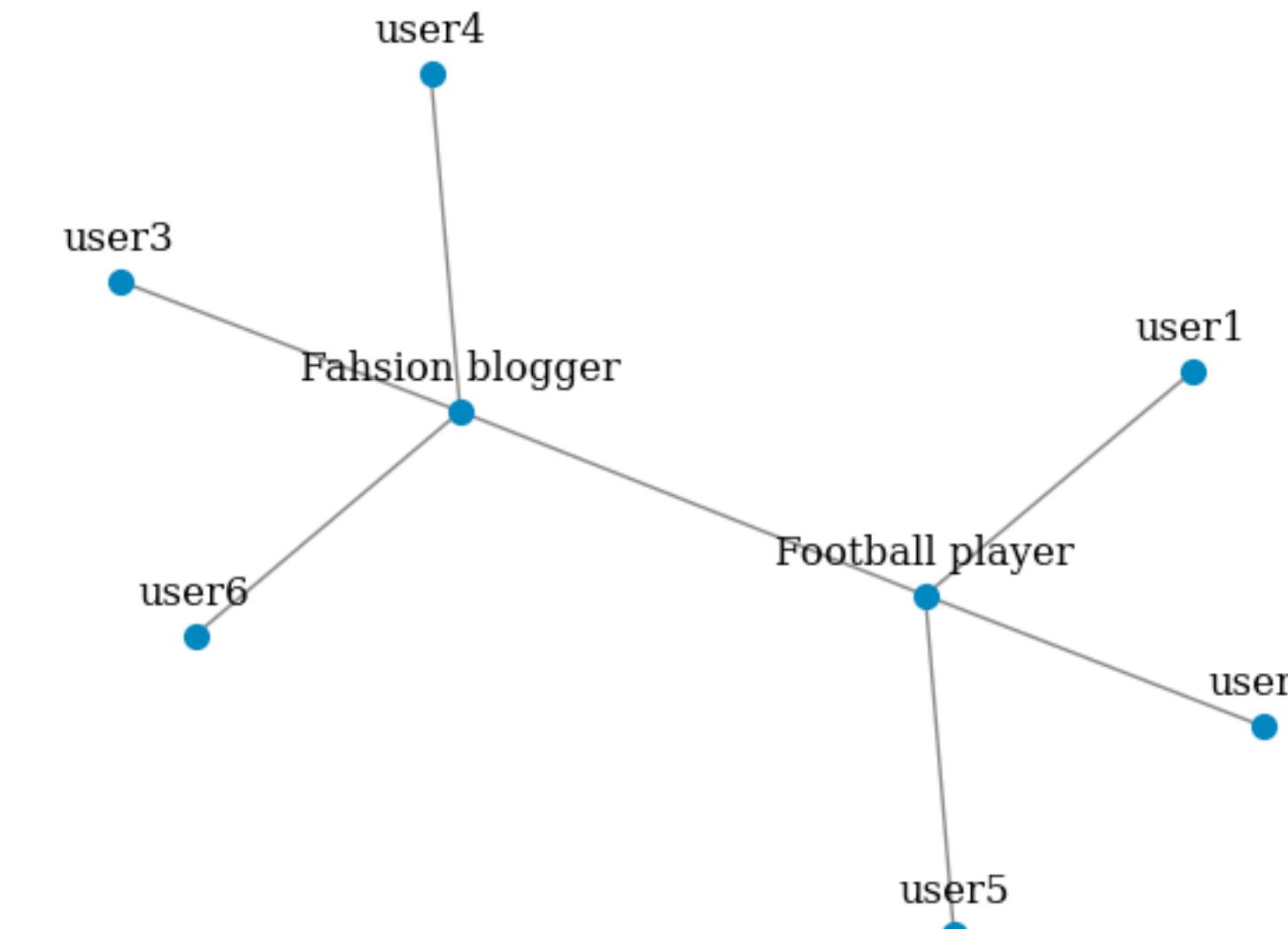
Graph Properties

Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

Coeficiente de Asortatividad (Assortativity coefficient)

Medir tendencia de los nodos a conectarse a nodos similares.



Intro to Graph

Graph Properties

Métricas

Las propiedades de un grafo se pueden medir y cada una expresa aspectos locales o globales.

Métricas de Integración

Mide cómo los nodos tienden a interconectarse entre sí.



Métricas de Centralidad

Evaluá la importancia de los nodos individuales dentro de una red.



Métricas de Segregación

Cuantifica la presencia de grupos de nodos interconectados, conocidos como comunidades o módulos, dentro de una red.



Métricas de Resiliencia

Medida de hasta qué punto una red es capaz de mantener y adaptar su rendimiento operativo cuando se enfrenta a fallos u otras condiciones adversas

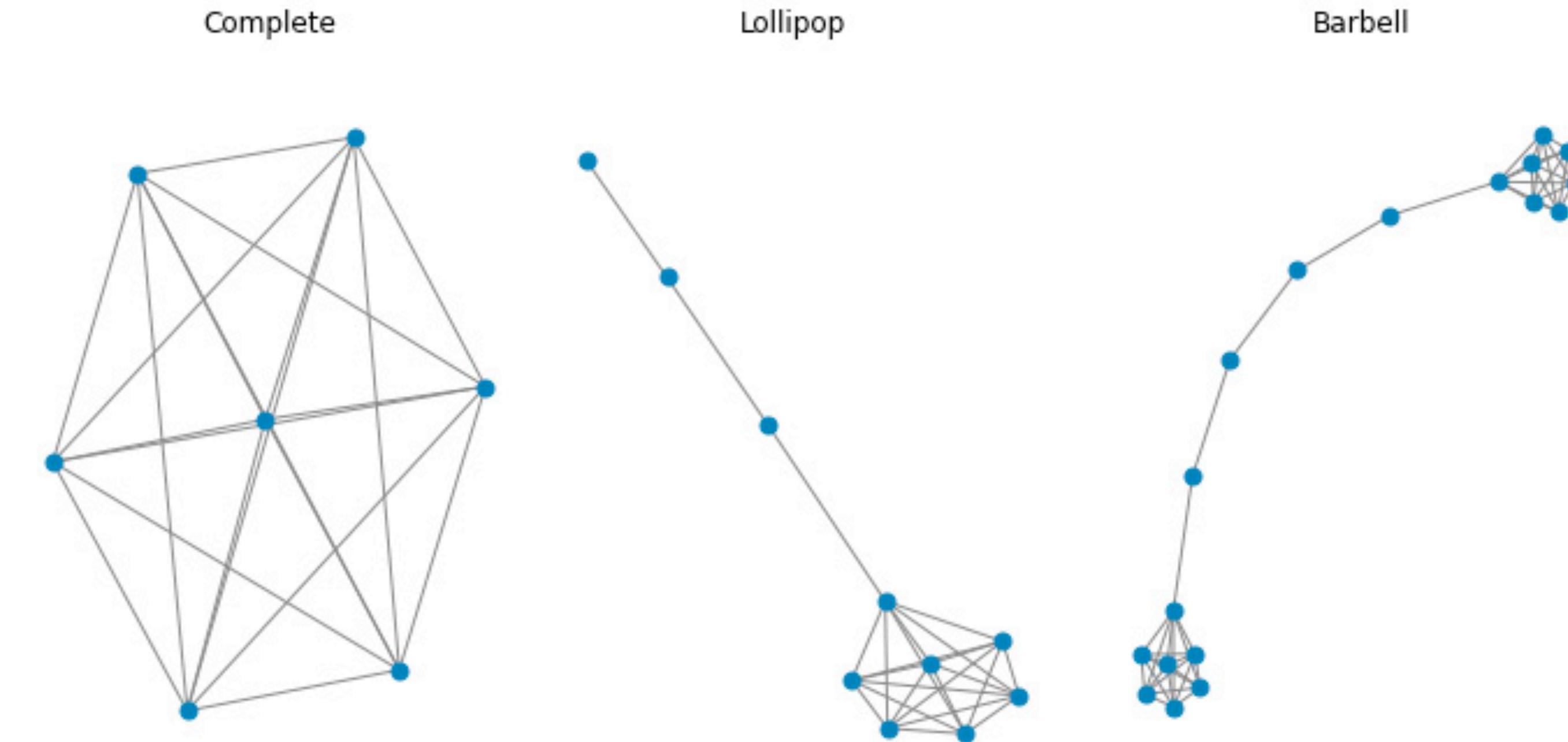


Intro to Graph

Simple Graph

Ejemplos

Algunos ejemplos
muy simples de
redes

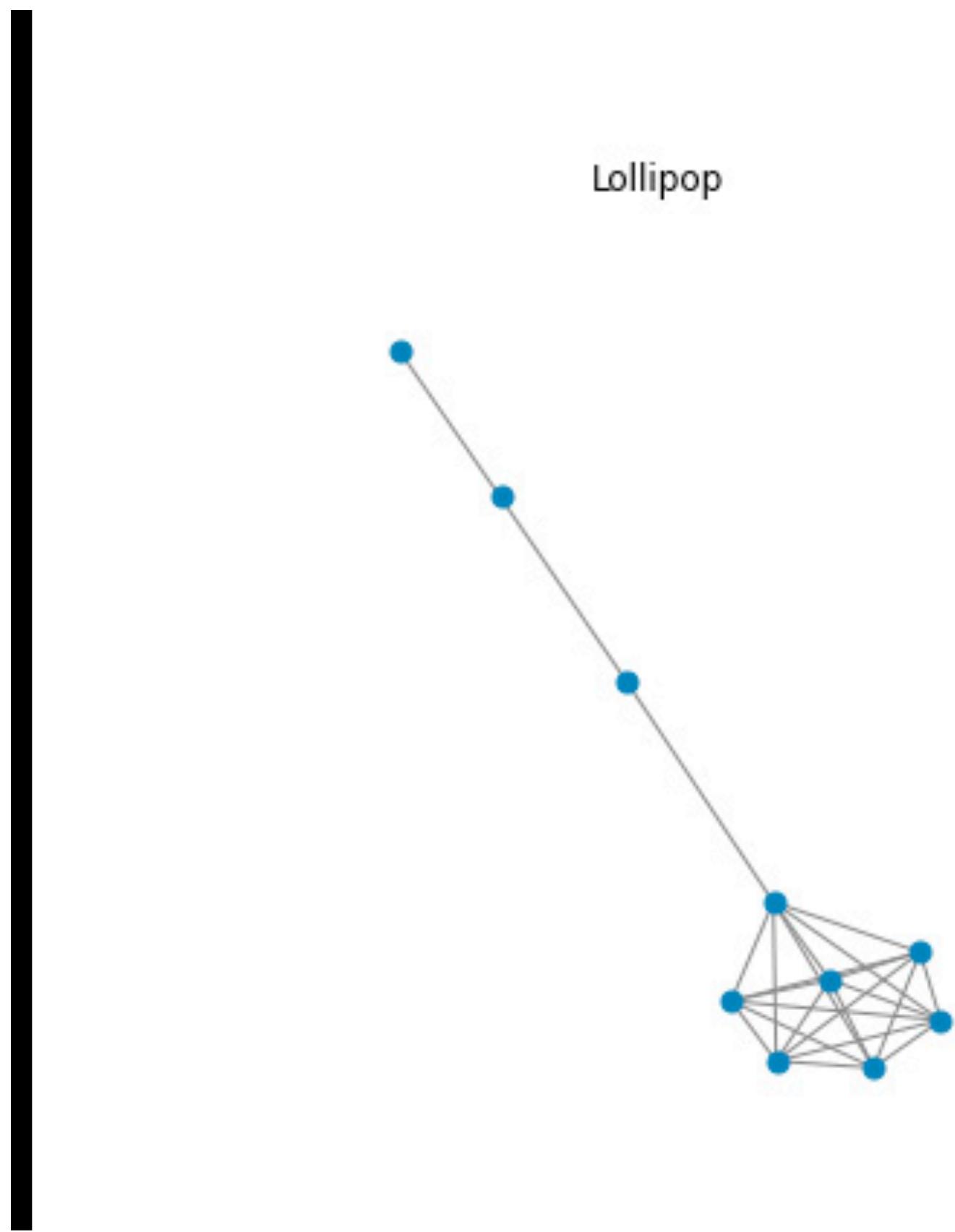


Intro to Graph

Simple Graph

Ejemplos

*Algunos ejemplos
muy simples de
redes*



Parametros

$$m = 7$$

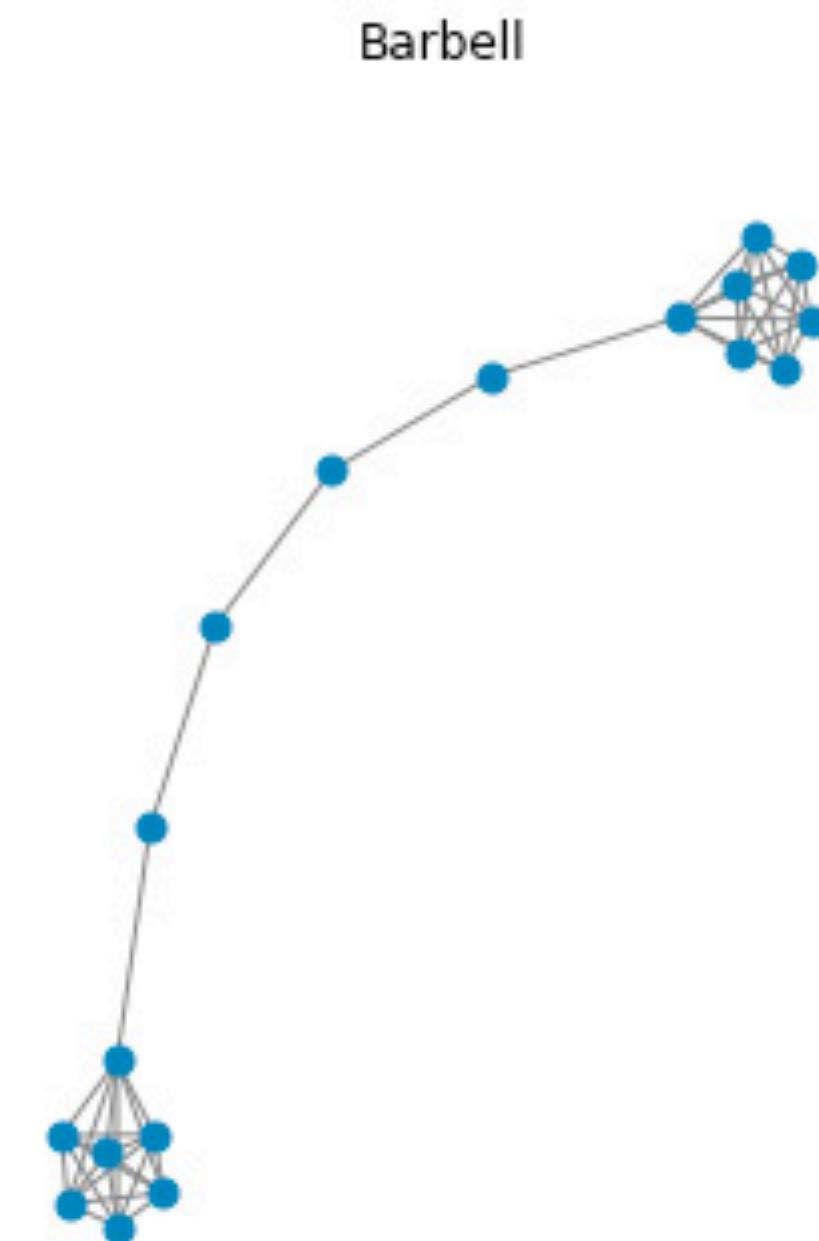
$$n = 3$$

Intro to Graph

Simple Graph

Ejemplos

Algunos ejemplos
muy simples de
redes



Parametros

$$m_1 = 7$$

$$m_2 = 4$$

Intro to Graph

Generative Graph

Ejemplos

Algunos ejemplos
muy simples de
redes

Albert Barabási
(1999)

$$p_i = \frac{k_i}{\sum k_j}$$

este modelo es que la probabilidad de que un nuevo nodo se conecte a un nodo i existente depende del grado del i -ésimo nodo

esquema de apego preferencial
Conexión de un nuevo nodo a un nodo ya existente.

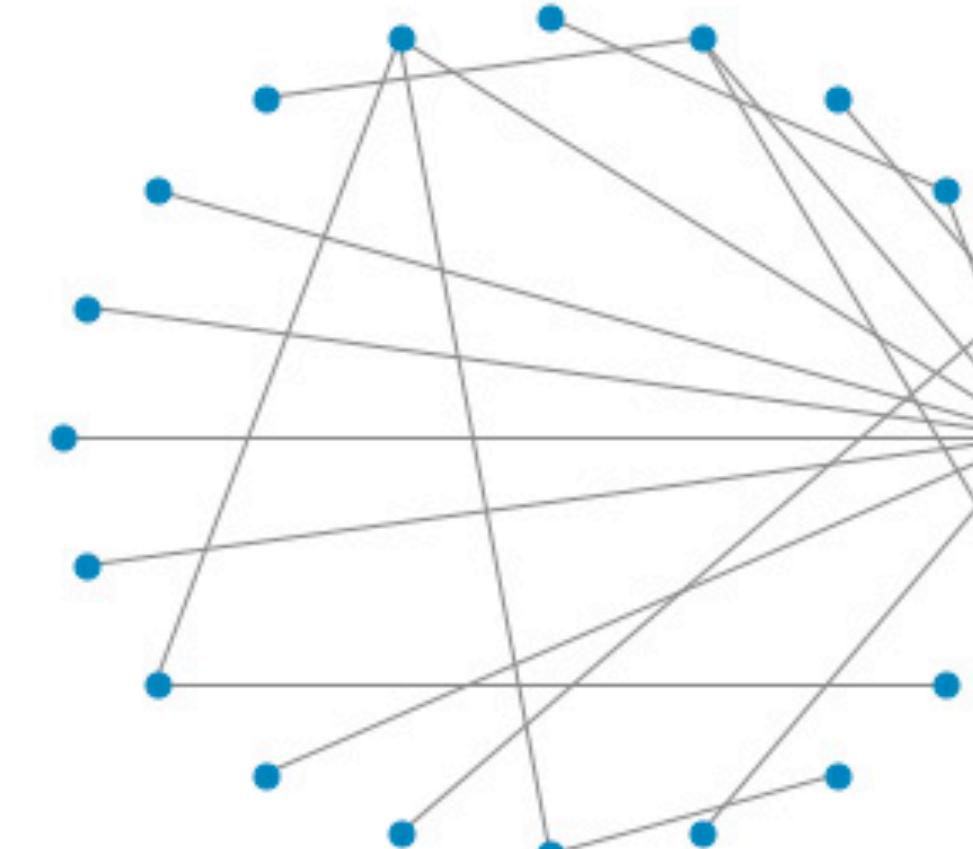
Intro to Graph

Generative Graph

Ejemplos

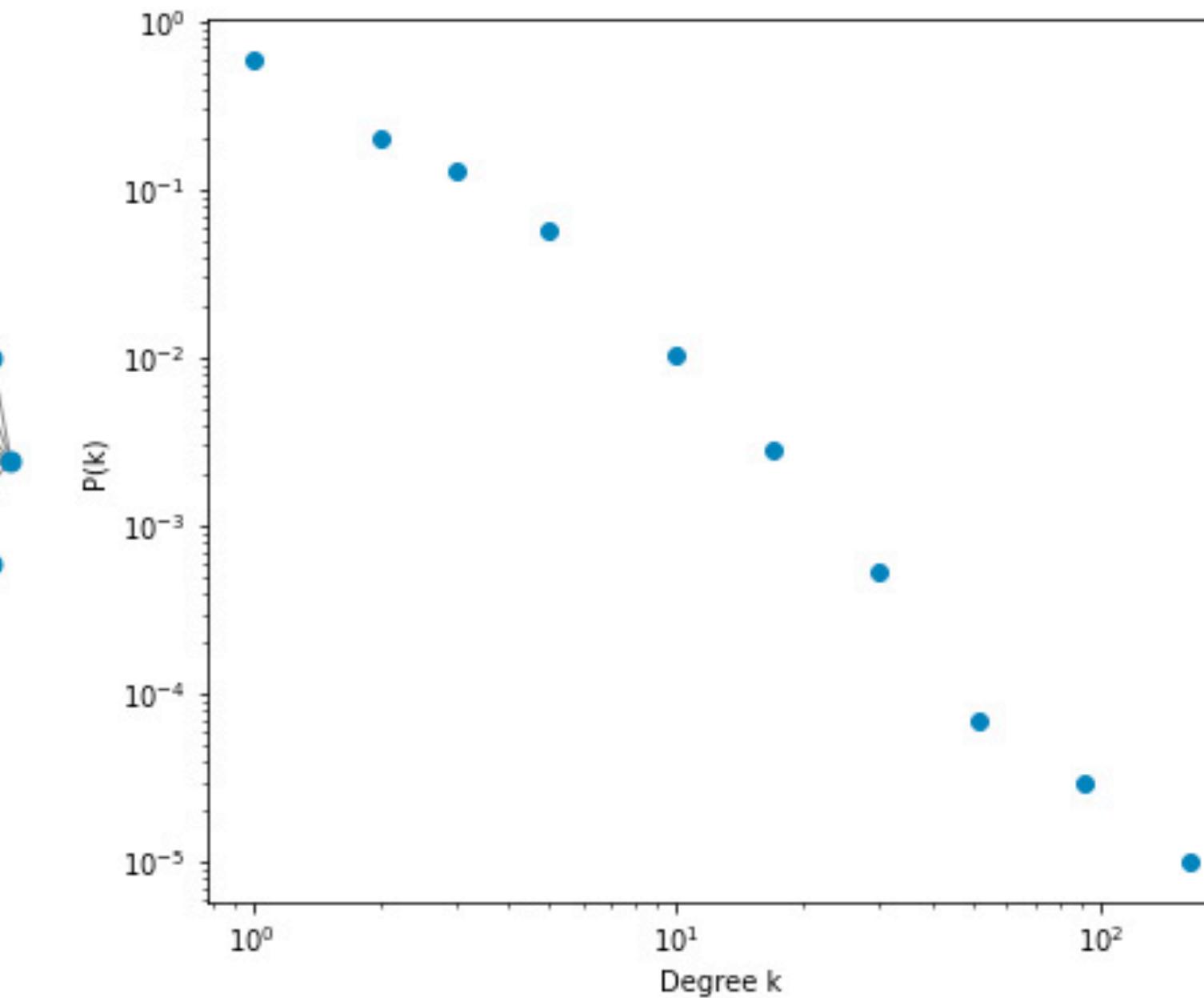
Algunos ejemplos
muy simples de
redes

Albert Barabási
(1999)



Modelo de Barabási-Albert

distribución de conectividad de 20 nodos con $n=100.000$ nodos



Distribución de ley de potencia