

Tema 2: Red Compleja como ejemplo de sistema complejo

12 de febrero de 2024

1. Introducción

Los grafos son objetos matemáticos constituidos por un conjunto de nodos (llamados vértices) conectados mediante uniones (aristas) formando una estructura más o menos compleja. La teoría de grafos es una rama de las matemáticas que comenzó a desarrollarse en el siglo XVIII. Fue el gran genio Leonhard Euler (1707-1783) (ver figura 1) quien primero resolvió un problema combinatorio haciendo uso de las propiedades estructurales de los grafos. En particular Leonhard Euler en 1735 resolvió el problema de los Siete Puentes de Königsberg (actual Kaliningrado, capital del Oblast de Kaliningrado)

En esa época la ciudad de Königsberg, Prusia, tenía 7 puertos conectando las orillas del río Pregel con dos grandes islas. El problema de los siete puentes de Königsberg es decidir si es posible seguir un camino que cruce cada puente sólo una vez y volver al punto de origen del camino.

La respuesta es que no es posible. No existe tal *ciclo Euleriano*. Euler demostró que tal camino no existe mapeando el problema en un problema definido en un grafo (ver figura 2)¹, comenzando la rama de las matemáticas que se conoce como **Teoría de Grafos**. De esta forma esta teoría tiene una antigüedad de 300 años. Sin embargo en este curso vamos a estudiar el nuevo campo de las redes complejas, que en su lugar sólo lleva desarrollándose unas pocas décadas. Más concretamente, el campo de las redes complejas aparece en la última década del siglo pasado con dos artículos seminales, el de Watts & Strogatz sobre redes *pequeño mundo*² y el de Barabasi & Albert sobre la aparición de *redes*

¹Euler determinó que si tal camino existiera los puntos intermedios del mismo estarán conectados a un número par de líneas (la entrante y la saliente). Entonces sólo el punto inicial y el final podrían estar conectados con un número impar de líneas. Pero además se tiene que cumplir que el punto inicial debe ser igual al final, por lo que tendrán también un número par de líneas. Conclusión en dicho camino posible no hay ningún punto conectado con un número impar de líneas. Si vemos el grafo de los puentes de Königsberg, los 4 nodos poseen un número impar de líneas incidentes por lo que es imposible definir un camino con las características buscadas.

²Watts, Duncan J.; Strogatz, Steven H. (June 1998). Collective dynamics of 'small-world' networks". *Nature*. **393** (6684): 440-442.



Figura 1: Retrato de L. Euler (1707-1783), considerado el padre fundador de la teoría de grafos

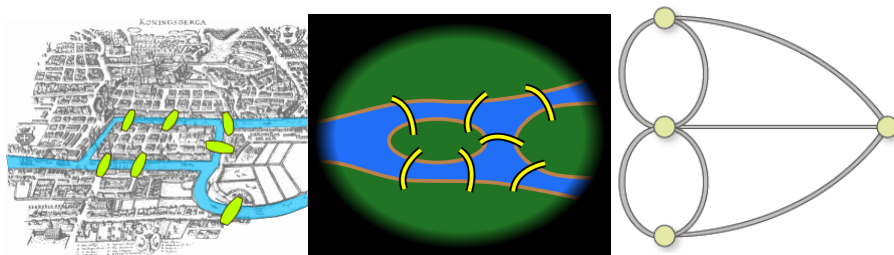


Figura 2: El problema de los 7 puentes de Königsberg y su representación usando un grafo.

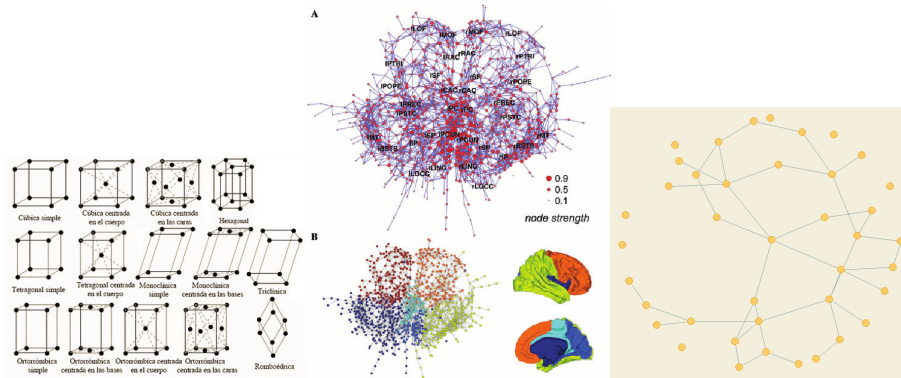


Figura 3: Las redes complejas representan sistemas cuya complejidad está comprendida entre estructuras regulares y aleatorias.

*complejas invariantes de escala*³, en los cuales se propone un nuevo paradigma para el estudio de las redes complejas. La idea fundamental detrás de estos trabajos es que ciertos sistemas complejos, como los que hemos introducido en el tema anterior, por ejemplo, Internet, infraestructuras complejas como las redes de carreteras o vuelos comerciales, redes sociales, redes de interacción de proteínas dentro de las células, redes tróficas, el propio cerebro, etc. todas ellas tienen una estructura en forma de red subyacente que describe el complejo conjunto de interacciones entre las unidades elementales que constituyen estos sistemas.

Una red compleja difiere de un grafo puesto que describe también las interacciones presentes de un sistema complejo concreto, mientras que un grafo en general no tiene por qué estar asociado a un sistema complejo. En los dos trabajos anteriormente citados se muestra que a pesar de la gran cantidad y diversidad de sistemas complejos que se pueden describir mediante redes complejas, hay algunas propiedades en estas redes que son **universales**: es decir, son comunes a una gran variedad de sistemas complejos, algunas de las cuales ya hemos descrito en el tema anterior. Este hecho sugiere que las propiedades de organización características de los sistemas complejos auto-organizados que emergen, por ejemplo, debido a la evolución biológica (como en las redes metabólicas celulares o en el cerebro) o como producto de una organización no centralizada de la actividad humana (como en la red de Internet o en las redes sociales) presentan muchas más similitudes que las esperadas. Estas propiedades de los sistemas complejos son las responsables de su robustez y eficacia.

Como ya hemos dicho las redes complejas se pueden extraer de muchos sistemas complejos. Las encontramos en la sociedad (redes sociales en Internet, redes familiares, redes de amigos, etc) y también en los ecosistemas y en las interrelaciones tróficas dentro de ellos, no solo incluyendo interacciones de tipo

³Albert-László Barabási & Réka Albert (octubre de 1999). "Emergence of scaling in random networks". *Science* **286**: 509-512.

depredador-presa o de parasitismo sino también relaciones de simbiosis (mutualistas) cuya última finalidad es incrementar el beneficio mutuo de las especies (nodos) que intervienen (por ejemplo un alga y un hongo formando un líquen o una abeja y una flor que favorece el sustento de la abeja y la polinización de la flor). Las redes complejas se encuentran también en el conjunto de complejas reacciones entre proteínas que organizan la actividad y metabolismo celular y en la propia red del cerebro que condiciona los procesos mentales como memoria, recuerdos, procesamiento de información espacio-temporal y la propia conciencia. Algunos ejemplos están resumidos en la tabla 1.

Red compleja	Nodos	Aristas/uniones
Red de actores	Actores	actuar en la misma película
Red de colaboraciones	Científicos	Coautores en una publicación
Redes de citas bibliográficas	Artículos científicos	Citación
La red de Facebook	Personas	Amistad en facebook
Redes metabólicas	Metabolitos	Aparecer en la misma reacción
Redes de interacción de proteínas	Proteínas	Interacción física
Redes de transcripción genética	Genes	Regulación
Red cerebral	Neuronas	Conexiones sinápticas
Internet	Routers	Líneas físicas
WWW	Páginas Web	Direcciones URL
Redes de Aeropuertos	Aeropuertos	Vuelos entre aeropuertos
Redes eléctricas	Centrales eléctricas	Conexiones eléctricas

Cuadro 1: Ejemplos de redes complejas

2. Teoría de grafos

Como hemos expuesto anteriormente, existen multitud de sistemas naturales cuyo comportamiento emergente es el resultado de la interacción de un gran número de constituyentes que interactúan entre sí mediante influencias diversas, de forma que su estructura se puede definir en términos de una complicada red de nodos y uniones entre ellos donde cada constituyente viene definido por una variable de estado asociada al nodo y donde el estado de las uniones define la influencia o interacción entre nodos. Esta intrincada red tiene a priori una estructura compleja, de cuyas propiedades puede inferirse cierto comportamiento emergente en el sistema.

Históricamente el estudio de las redes complejas ha sido abarcado cierta rama de las matemáticas discretas denominada *teoría de grafos*. Una red compleja se puede representar formalmente por un grafo. Vamos a definir a continuación este concepto:

1. Un grafo no dirigido (dirigido) $G = (\mathcal{N}, \mathcal{L})$ está constituido por dos conjuntos $\mathcal{N} = \{n_1, \dots, n_N\}$ cuyos elementos son los **nod**os, **vértices** o **puntos del grafo** y $\mathcal{L} = \{l_1, \dots, l_L\}$ cuyos elementos son las **uniones**,

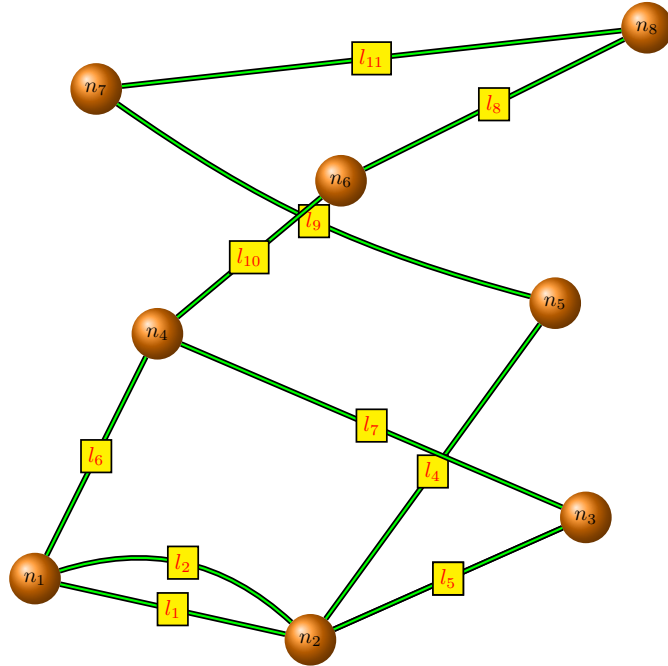


Figura 4: Ejemplo de grafo con 8 nodos y 11 aristas.

aristas o líneas del grafo. Por lo tanto un grafo tiene N nodos y L aristas y se denota como $G(N, L)$ o simplemente $(\mathcal{N}, \mathcal{L})$.

2. Cada vértice o nodo n_i viene determinado por su orden i en el conjunto \mathcal{N} .
3. Las aristas vienen definidas por los órdenes de los nodos que unen, es decir, la unión entre los vértices n_i y n_j se denota por $l_k = (i, j) = (n_i, n_j) = l_{ij}$. En este caso, si hay una unión o arista entre dos nodos, los nodos se llaman **vecinos o adyacentes**.
4. Una arista de la forma $l_k = (i, i)$ es decir conecta el nodo i consigo mismo se denomina un **lazo, auto-unión o auto-conexión (tadpole)**. Pueden aparecer tanto en redes dirigidas como no dirigidas (ver más abajo)
5. Dos aristas que unen dos mismos vértices se llaman **paralelas** (en el grafo de la figura 4 serían la l_1 y l_2)
6. Aristas que tienen en común un vértice se llaman **aristas adyacentes**.

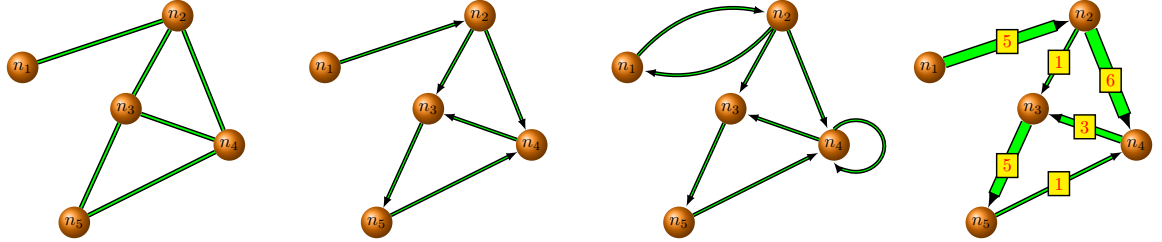


Figura 5: De izquierda a derecha: grafo no dirigido (también es un grafo simple), grafo dirigido, multigrafo, grafo pesado.

2.1. Tipos de Grafos

1. **Grafo no-dirigido:** aquel en el que el orden de los índices en las uniones es el mismo: $l_{ij} = l_{ji}$.
2. **Grafo dirigido:** se tiene que el orden de los índices en las uniones es importante de forma que $l_{ij} \neq l_{ji}$.
3. **Multigrafos:** son grafos que tienen auto-uniones o *lazos*, por ejemplo l_{ii} , o múltiples uniones entre los mismos dos nodos. Los grafos no dirigidos que no tienen lazos ni aristas paralelas se llaman **grafos simples**.
4. **Grafos pesados:** Son grafos en los que a cada arista se le asigna un peso o valor numérico que mide la intensidad de la unión. En caso contrario la red o grafo se llama **no pesado**. Si todos los valores son del mismo signo (positivo o negativo) se dice que la red es “**unsigned**” y si los pesos de las aristas tienen asociados diferentes signos entonces el grafo se llama “**signed**”.
5. **Grafo vacío:** grafo sin aristas, sólo con nodos
6. **Grafo nulo:** el que no tiene vértices (y por lo tanto no tiene aristas)
7. Para un grafo no dirigido $G(N, L)$, el número posible de uniones L está comprendido entre 0 y $N(N - 1)/2$.
8. Un grafo se dice diluido o escaso si $L \ll N^2$ y denso si $L \sim \mathcal{O}(N^2)$.
9. Un N -grafo **completo** es aquel $G(N, L)$ tal que $L = \binom{N}{2} = N(N - 1)/2$, y se denota por L_N . En un grafo completo se tiene que cada par de nodos está conectado por una sola arista. Un grafo L_3 se llama **triángulo**. Un grafo completo es un grafo regular con todos sus vértices de grado $N - 1$. La única forma de hacer que un grafo completo se torne disco-nexo a través de la eliminación de vértices, sería eliminándolos todos.

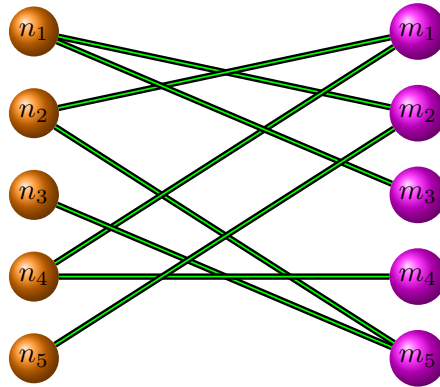


Figura 6: Grafo bipartito no dirigido.

Ejercicio: dibujar L_i $i = 0, \dots, 8$

10. Definimos un **subgrafo** $G' = (\mathcal{N}', \mathcal{L}')$ de un grafo $G = (\mathcal{N}, \mathcal{L})$ cuando $\mathcal{N}' \subseteq \mathcal{N}$ y $\mathcal{L}' \subseteq \mathcal{L}$. Si G' contiene todas las aristas que unen dos puntos en \mathcal{N}' se dice que G' es un **subgrafo inducido** por \mathcal{N}' y se denota como $G' = G[\mathcal{N}']$. Un subgrafo muy importante es el **subgrafo de los vecinos de un nodo dado i** y denotado por G_i que se define como el **subgrafo inducido** por \mathcal{N}_i , es decir el conjunto de los vecinos del nodo i , y se denota como $G_i = G[\mathcal{N}_i]$. Un subgrafo $G'(N', L')$ que es completo se denomina “**clique**” (pandilla, panda, camarilla, grupete).
11. **Grafos bipartitos:** Un grafo bipartito $G_B = (\mathcal{N}, \mathcal{M}, \mathcal{L})$ es un grafo constituido por dos conjuntos de vértices disjuntos $\mathcal{N} = \{n_1, \dots, n_N\}$, $\mathcal{M} = \{m_1, \dots, m_M\}$ y un conjunto de aristas \mathcal{L} tal que cada arista une un nodo de \mathcal{N} con un nodo de \mathcal{M} . A los nodos de \mathcal{M} se les suele asociar el nombre de **grupos** ya que este tipo de redes aparecen mucho en sociología.
 En un grafo bipartito se pueden definir a su vez dos grafos proyectados, el **grafo proyección de nodos** $G_{\mathcal{N}} = (\mathcal{N}, \mathcal{L}_{\mathcal{N}})$ y el **grafo proyección de grupos** $G_{\mathcal{M}} = (\mathcal{M}, \mathcal{L}_{\mathcal{M}})$. $G_{\mathcal{N}} = (\mathcal{N}, \mathcal{L}_{\mathcal{N}})$ tiene como nodos los el conjunto \mathcal{N} y se dice que dos nodos en ese grafo están unidos por una arista si los dos están unidos al menos a mismo grupo (nodo de \mathcal{M}) en la red bipartita de partida. Por su parte el grafo $G_{\mathcal{M}} = (\mathcal{M}, \mathcal{L}_{\mathcal{M}})$ tiene como nodos los grupos de \mathcal{M} y se construye de tal forma que existe una arista entre dos grupos si al menos están unidos a un mismo nodo de \mathcal{N} .
12. **Arboles.** En teoría de grafos un árbol es un grafo no dirigido en el que cualquier par de nodos está conectado exactamente por una sola unión. Un conjunto disjunto de árboles es un **bosque**. Un árbol en el que un nodo está conectado con todos los demás se llama una **red estrella**.

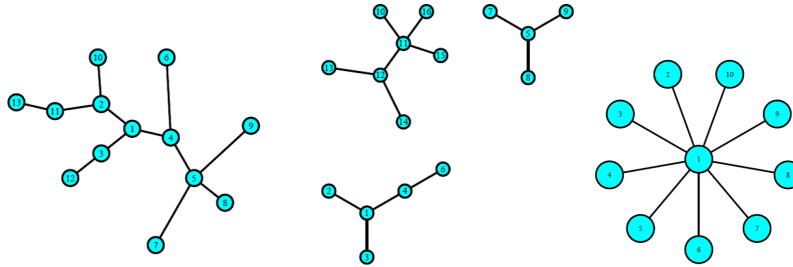


Figura 7: Árbol, bosque y estrella.

2.2. Representación gráfica de grafos

Los grafos se representan gráficamente mediante redes donde los nodos se representan por puntos y las uniones mediante líneas que conectan puntos adyacentes. Para caracterizar a dichas redes se usan dos tipos de representaciones, la lista de aristas y la matriz de adyacencia. Ambas caracterizaciones van a depender del tipo de grafo que estemos estudiando

2.2.1. Lista de aristas y matriz de adyacencia en un grafo simple

1. *Lista de aristas:* En el caso de un grafo simple la lista de aristas es una lista de L pares de nodos (n_j, n_i) , o sus etiquetas (j, i) indicando que el nodo j está unido al i por una arista. Para un grafo simple la lista de aristas no admite redundancias, es decir si existe el par (j, i) , el par (i, j) no está incluido en la misma. En el grafo simple de la figura 5 la lista de aristas es

Lista de aristas

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

2. *Matriz de adyacencia:* La matriz de adyacencia \mathbf{A} de un grafo simple de N nodos es una matriz cuadrada $N \times N$ cuyos elementos son:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si el nodo } j \text{ está unido al } i \text{ por una arista} \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

En el grafo simple de la figura 5 la matriz de adyacencia es:

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

Se tiene que la matriz es simétrica (por ser el grafo no dirigido) y los elementos de la diagonal son cero (por no haber lazos o auto-conexiones).

3. **Matriz de incidencia:** Para el caso de una red no-dirigida se pueden definir dos tipos de matrices de incidencia: las no orientadas y las orientadas. Las matrices de incidencia no orientadas (llamadas simplemente matrices de incidencia) es una matriz \mathbf{B} $N \times L$ donde N es el número de vértices y L el número de uniones o aristas $l = (i, j)$ y tal que

$$B_{il} = \begin{cases} 1 & \text{si la unión } l \text{ contiene al vértice } i \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

La matriz de incidencia orientada de una red no dirigida es la matriz de incidencia de cualquier orientación del grafo (en el sentido de grafos dirigidos como veremos mas adelante).

2.2.2. Lista de aristas y matriz de adyacencia de un grafo dirigido

1. *Lista de aristas:* En este caso es una lista formada por L pares de nodos (o etiquetas de nodos) ordenados $(n_j, n_i) = (j, i)$ que indica que el nodo j apunta al nodo i en la arista dirigida. L indica, por tanto el número de aristas dirigidas en la red. En el grafo dirigido de la figura 5 la lista de aristas dirigidas es:

Lista de aristas
 (1, 2)
 (2, 4)
 (2, 3)
 (4, 3)
 (3, 5)
 (5, 4)

2. *Matriz de adyacencia:* La matriz de adyacencia \mathbf{A} se define para un grafo dirigido como la matriz cuadrada $N \times N$ con elementos:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si el nodo } j \text{ apunta al nodo } i \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

En el ejemplo de grafo dirigido de la figura 5 se tiene

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

Nota: En algunos libros se define como matriz de adyacencia de un grafo dirigido a la \mathbf{A}^T . Se tiene que la matriz de adyacencia es asimétrica (por ser el grafo dirigido) y los elementos de la diagonal son cero (por no haber lazos o auto-conexiones).

Ejercicio: Calcular la lista de aristas y la matriz de adyacencia para el multigrafo representado en la figura 5

3. *Matriz de incidencia para un grafo o red dirigida:* la matriz de incidencia es una matriz B $N \times L$ que como antes representan el número de vértices y aristas de la red, respectivamente, tal que

$$B_{il} = \begin{cases} -1 & \text{si la arista } l \text{ sale del vértice } i \\ 1 & \text{si la arista } l \text{ apunta al vértice } i \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

Podemos definir una red de incidencia orientada en una red no-dirigida de la misma forma si establecemos una orientación en la red, por ejemplo, introduciendo un ordenamiento de los índices y denotando las uniones de acuerdo a esa ordenación, es decir si denotamos cualquier arista en la red no-dirigida de la forma $l = (i, j)$ con $i < j$ entonces:

$$B_{kl} = \begin{cases} -1 & \text{si } k = i \\ 1 & \text{si } k = j \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

2.2.3. Redes pesadas

1. *Lista de aristas:* Es una lista de L tripletas (i, j, w_{ij}) cada una de ellas indicando que entre el nodo j e i hay una unión o arista con un peso o valor w_{ij} . Como antes L es el número total de aristas en la red o grafo.
2. *Matriz de adyacencia de una red pesada.* La matriz de adyacencia \mathbf{A} se define para un grafo pesado como la matriz cuadrada $N \times N$ con elementos:

a) Red no dirigida

$$A_{ij} = \begin{cases} w_{ij} & \text{si el nodo } j \text{ está conectado con el } i \text{ mediante una arista de peso } w_{ij} \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

b) Red dirigida

$$A_{ij} = \begin{cases} w_{ij} & \text{si el nodo } j \text{ apunta al nodo } i \text{ con una unión de peso } w_{ij} \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

Ejercicio: Calcular la lista de aristas y la matriz de adyacencia del grafo pesado que aparece en la figura 5

2.2.4. Matriz de incidencia de un grafo bipartito

Un grafo bipartito $G_B(N, M, L)$ viene descrito por una *matriz de incidencia* \mathbf{B} definida como una matriz $N \times M$ con elementos

$$B_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si el nodo } i \text{ de } \mathcal{N} \text{ está unido por una arista al nodo } j \text{ de } \mathcal{M} \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

Ejercicio: Calcular la matriz de incidencia del grafo bipartito mostrado en el figura 6. Cual sería la matriz de incidencia si no existiera en dicho grafo el nodo m_5 ?

Ejercicio: Dibujar el grafo proyección de nodos del grafo bipartito de la figura 6y demostrar que el grafo proyección de nodos viene descrito por una matriz de adyacencia \mathbf{P} tal que

$$\mathbf{P} = \mathbf{B}\mathbf{B}^T$$

Ejercicio: dibujar el grafo proyección de grupos del grafo bipartito de la figura 6 y demostrar que el grafo proyección de grupos viene descrito por una matriz de adyacencia $\tilde{\mathbf{P}}$ tal que

$$\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{B}^T\mathbf{B}$$

Notad que para calcular el grafo proyección hay que recorrer todos los índices incluido el de partida para calcular los vecinos

2.3. Algunos conceptos previos en redes complejas

Las propiedades estructurales más fundamentales de una red compleja son su número de nodos N y su número de uniones L . En la mayoría de las ocasiones estos números son grandes por lo que el análisis de las redes complejas necesita el uso de técnicas computacionales y el uso del ordenador.

1. **Número total de aristas** en una red compleja se puede calcular direc-

tamente a partir de la matriz de adyacencia:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ij} + \sum_{i=1}^N A_{ii} \quad \text{red no dirigida con autoconexiones}$$

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ij} \quad \text{red no dirigida sin autoconexiones}$$

$$L = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ij} \quad \text{red dirigida}$$

2. Grado de un nodo:

En una red no dirigida se define el **grado de un nodo** i como el número total de aristas incidentes en dicho nodo y se denota por k_i . En una red dirigida se distingue entre **grado entrante** (in-degree) de un nodo i como el número total de nodos que apuntan a dicho nodo y se representa por k_i^{in} , y **grado saliente** (out degree) de un nodo i como el número total de nodos a los que apunta el nodo i y se denota por k_i^{out} . En el caso de redes no pesadas el grado de un nodo se puede calcular directamente a partir de la matriz de adyacencia:

$$k_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} = \sum_{j=1}^N A_{ji} \quad \text{red no dirigida}$$

$$k_i^{in} = \sum_{j=1}^N A_{ij} \quad \text{red dirigida}$$

$$k_i^{out} = \sum_{j=1}^N A_{ji} \quad \text{red dirigida}$$

En un grafo simple no dirigido $k_i \in [0, N - 1]$, y en un red dirigida $k_i^{in} \in [0, N - 1]$ y $k_i^{out} \in [0, N - 1]$.

3. Secuencia de grados:

En una red no dirigida es la secuencia ordenada de los grados de todos los nodos de la red $\{k_i\} = \{k_1, \dots, k_N\}$. Esta definición se puede generalizar para un grado dirigido a las secuencias de grados entrantes $\{k_i^{in}\} = \{k_1^{in}, \dots, k_N^{in}\}$ y a la secuencia de grados salientes $\{k_i^{out}\} = \{k_1^{out}, \dots, k_N^{out}\}$.

4. Grado medio:

Dada la secuencia de grados de un grafo no dirigido se define el grado medio $\langle k \rangle$ en la forma:

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ji}$$

Se tiene trivialmente que para una red simple $L = \frac{1}{2}\langle k \rangle N$.

El grado máximo en una red simple no dirigida se define como $K = \max_i k_i$.

Para redes dirigidas trivialmente podemos definir el grado entrante promedio $\langle k^{in} \rangle$ y el grado saliente promedio $\langle k^{out} \rangle$:

$$\langle k^{in} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i^{in} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A_{ji} = \frac{1}{N} \sum_i k_i^{out} = \langle k^{out} \rangle$$

es decir son iguales y trivialmente se tiene $L = \langle k^{in} \rangle N = \langle k^{out} \rangle N$. Además se pueden definir el grado máximo saliente y entrante en la forma usual

$$K^{in} = \max_i k_i^{in}$$

$$K^{out} = \max_i k_i^{out}$$

5. Distribución de probabilidad de grados de un grafo:

El grado de un nodo es una propiedad local de la red pero considerando la secuencia de grados podemos determinar algunas propiedades globales de la red. La organización y estructura global de una red inducida por su secuencia de grados está caracterizada por la distribución de probabilidad de grados de la red $P(k)$.

Para un grafo no dirigido se define $P(k)$ como la fracción de nodos de grado k y representa la probabilidad que un nodo elegido al azar en la red tenga un grado k .

Para un grafo dirigido se definen respectivamente y de forma análoga $P^{in}(k)$ y $P^{out}(k)$ como la fracción de nodos de grado entrante k y la fracción de nodos de grado saliente k , que me definen las distribuciones de probabilidad de grados entrantes y salientes. Esto es $P^{in}(k)$ y $P^{out}(k)$ representan las probabilidades de que al elegir al azar un nodo en la red tenga un grado entrante k o, respectivamente, un grado saliente k . Vamos a formalizar esto que acabamos de definir

- a) Grafo no dirigido: definimos $N(k)$ como el número total de nodos en la red con conectividad k , es decir

$$N(k) = \sum_{i=1}^N \delta(k, k_i)$$

donde $\delta(k, k_i)$ indica la delta de Kronecker, entonces se tiene

$$P(k) = \frac{N(k)}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(k, k_i)$$

y se tiene que por definición es definida positiva y que

$$\sum_{k=0}^K P(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^K \delta(k, k_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1 = 1,$$

es decir está normalizada por lo que es una verdadera probabilidad.

Ejercicio: Calcular la distribución de probabilidad de grados del grafo no dirigido de la figura 5 y ver que está normalizada

- b) Grafo dirigido: denotamos por $N^{in}(k)$ y $N^{out}(k)$ respectivamente el número total de nodos en la red con grado entrante k y con grado saliente k :

$$N^{in}(k) = \sum_{i=1}^N \delta(k, k_i^{in})$$

$$N^{out}(k) = \sum_{i=1}^N \delta(k, k_i^{out})$$

entonces $P^{in}(k)$ y $P^{out}(k)$ se definen como:

$$P^{in}(k) = \frac{N^{in}(k)}{N}$$

$$P^{out}(k) = \frac{N^{out}(k)}{N}$$

de donde se tiene que son definidas positivas y normalizadas a la unidad, es decir:

$$\sum_{k=0}^{K^{in}} P^{in}(k) = 1$$

$$\sum_{k=0}^{K^{out}} P^{out}(k) = 1$$

Ejercicio: Calcular la distribución de probabilidad de grados del grafo dirigido y del multigrafo que aparecen en la figura 5.

La forma de la $P(k)$ de una red compleja tiene gran influencia sobre su robustez ante defectos aleatorios o ataques dirigidos, y puede determinar el comportamiento de procesos dinámicos definidos en la red. Las propiedades estadísticas de $P(k)$ pueden cambiar las propiedades locales de las red que caracterizan como por ejemplo su número de subgrafos (ciclos y “cliques”).

6. Matriz Laplaciana de un grafo: Dado un grafo simple $G(N, L)$ su matriz Laplaciana es una matriz cuadrada $N \times N$ definida como:

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$$

donde $\mathbf{D} = k_i \mathbf{I}$ es la matriz de grados coin \mathbf{I} la matriz identidad, y \mathbf{A} es la matriz de adyacencia. Puesto que $G(N, L)$ es un grafo simple se tiene que \mathbf{A} solo contiene 1s o 0s y sus elementos de la diagonal principal son 0s. Se tiene

$$L_{ij} = \begin{cases} k_i & \text{si } i = j \\ -1 & \text{si } i \neq j \text{ pero son adyacentes} \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

7. **Camino en un grafo.** Las redes complejas pueden usarse para buscar y navegar a través de los sistemas complejos que representan y en general para transmitir información. El ejemplo más típico por ejemplo es la red de páginas web de Internet. Cuando exploramos la “web” para buscar información seguimos un camino a través de la misma, cuando volamos de un aeropuerto a otro seguimos un camino en la red de aeropuertos, cuando vemos que dos de nuestros amigos son amigos entre ellos descubrimos esencialmente un camino en nuestra red social.

De manera formal definimos un camino en un grafo como una secuencia de nodos tal que dos nodos consecutivos en la secuencia están conectados por una arista. Un **camino dirigido** en una red dirigida es un camino con las aristas dirigidas desde cada nodo al siguiente en la secuencia. Cada camino tiene su **longitud** definida como el número de aristas que se pasan al seguirlo incluyendo posibles repeticiones en caminos que se intersectan asimismo. Los caminos que partiendo de un nodo vuelven al final a él mismo se llaman **caminos cíclicos o ciclos**, mientras que los que empiezan y acaban en nodos distintos se llama **caminos acíclicos o aciclos**. Los caminos acíclicos que visitan los nodos del camino solo una vez se llaman **caminos acíclicos auto-evitados**. Los caminos cíclicos que visitan los nodos del camino solo una vez, salvo el nodo primero, también se llaman **caminos cíclicos auto-evitados**.

El número de caminos (caminos dirigidos en una red dirigida) de longitud n que unen un nodo j y un nodo i en una red, que denotamos como \mathcal{N}_{ij}^n se puede determinar en función de la matriz de adyacencia en la forma

$$\mathcal{N}_{ij}^n = [\mathbf{A}^n]_{ij}$$

es decir viene dado por el elemento (i,j) de la matriz \mathbf{A}^n . La demostración es sencilla para $n = 1, 2$ y se puede generalizar fácilmente para cualquier n . Entonces el número de caminos cíclicos de longitud n que une un nodo i consigo mismo en la red viene dado por

$$\mathcal{N}_{ii}^n = [\mathbf{A}^n]_{ii}.$$

El número total de caminos cíclicos de longitud n en una red con matriz

de adyacencia \mathbf{A} es:

$$\sum_{i=1}^N N_{ii}^n = \text{Tr} \mathbf{A}^n.$$

Ejercicio: En el grafo no dirigido de la figura 5 calcular el número total de caminos cíclicos de longitud $n = 3$ que empiezan en el nodo $i = 1, 2, 3, 4, 5$.

Un ciclo Euleriano es un camino cíclico que pasa por cada arista de la red exactamente una vez. Una red no dirigida posee un ciclo Euleriano si y solo si todos sus nodos tienen un número par de aristas y cada par de nodos con aristas pueden ser conectados al menos con una arista.

Un ciclo Hamiltoniano es un camino cíclico que visita cada nodo de una red exactamente una vez.

8. **Distancia, Longitud promedio de caminos (*Average path length*) y diámetro de una red.** El concepto de distancia en redes complejas no depende del espacio en un espacio que la contiene, sino solo en la longitud más corta de los caminos conectando los nodos. Por ejemplo en redes de aeropuertos ciudades con vuelos directos están a una distancia más corta que ciudades que se alcanzan a través de otras intermedias, aunque pueden estar físicamente más cercanas que las anteriores. Muchas redes complejas están caracterizadas pequeñas distancias entre nodos, por ejemplo cada dos personas en el mundo están separadas por unos pocos saludos de manos a través de otras personas. Vamos a cuantificar todos estos aspectos con las definiciones que siguen:

Definimos el **camino más corto** entre dos nodos i y j en una red como el camino (camino dirigido en el caso de una red dirigida) de mínima longitud (medida en número de aristas que hay en el camino para llegar de un nodo al otro). Definimos **la distancia más pequeña** entre un nodo i y j y la denotamos como $d(n_i, n_j) = d(i, j)$ como la longitud del camino más corto entre dichos nodos.

Definimos la **longitud promedio de caminos** o **distancia promedio** como el promedio de las distancias más pequeñas entre dos nodos cualesquiera de la red (estamos suponiendo que existen un camino conectando cualquiera dos nodos de la red):

$$\ell = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N d(n_i, n_j)$$

El **diámetro** \mathcal{D} de una red conectada se define como el máximo de las distancias más cortas entre cualquiera dos nodos de la red es decir:

$$\mathcal{D} = \max_{i,j \neq i} d(n_i, n_j)$$

Se tiene de forma trivial que $\ell \leq \mathcal{D}$.

Consideremos el caso particular de una red regular describiendo un espacio euclídeo de dimensión 1 y 2. En dimensión 1 se tiene que $\mathcal{D} = N - 1$ y en dimensión dos, donde tenemos $N = l \times l$ se tiene que $\mathcal{D} = 2(l - 1) = 2(\sqrt{N} - 1) \approx 2N^{1/2}$ que para dimensión d se puede generalizar a

$$\mathcal{D} \approx N^{1/d}$$

es decir el número medio de vértices que tenemos que visitar para llegar a cualquier otro vértice de la red crece con el tamaño (N) de la red. Sin embargo en muchas redes reales a pesar de tener tamaños muy grandes existe un relativamente corta longitud de camino entre cualesquiera dos nodos, cualidad que caracteriza la propiedad de *pequeño mundo* que implica tener un diámetro $\mathcal{D} \sim O(\ln N)$ es decir que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{D}}{\ln N} = cte.$$

La propiedad de *pequeño mundo* en redes complejas suele estar asociada con la existencia de un alto grado de agrupamiento de nodos (clustering) en la red. Por esta razón Watts y Strogatz definieron las redes tipo *pequeño mundo* como aquellas que tienen ℓ pequeño (como veremos las redes aleatorias) y \mathcal{C} grande (coeficiente de agrupamiento grande como en las redes regulares).

9. Una red puede ser *conectada* (conteniendo un solo componente) o *desconectada* (conteniendo diferentes componentes).
10. Un *lazo no dirigido* es un tipo especial de subgrafo de un grafo no dirigido tal que cada nodo del mismo tiene grado 2 y cada nodo se puede alcanzar desde cualquier otro nodo del *lazo*. Un *lazo dirigido* es aquel subgrafo de un grafo dirigido tal que cada nodo del lazo tiene un grado saliente 1 y un grado entrante 1, y puede ser alcanzado por todos los otros nodos del lazo. En un lazo el número de nodos es igual al número de aristas y a este número n lo llamamos longitud del lazo. Para un grafo no dirigido se tiene que el número de lazos de longitud $n = 3$ es:

$$\mathcal{L}_3 = \frac{1}{6} \text{Tr} \mathbf{A}^3$$

y el número de lazos dirigidos de longitud $n = 3$ en un grafo dirigido es

$$\mathcal{L}_3 = \frac{1}{3} \text{Tr} \mathbf{A}^3$$

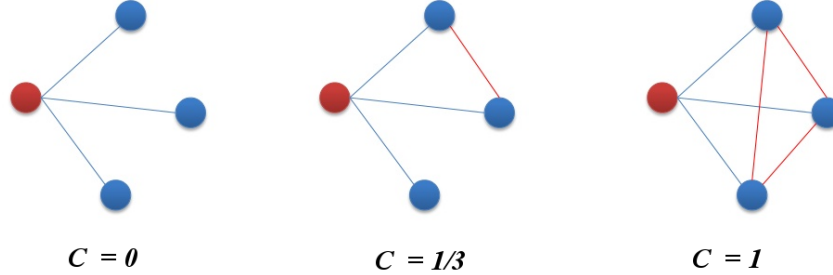


Figura 8: Calculo del coeficiente de agrupamiento

11. **Coeficiente de agrupamiento** (*clustering coefficient*). Es una medida del grado en el que los nodos de una red tienen a agruparse entre ellos. Dado un grafo $G(N, L)$ no dirigido se define el coeficiente de agrupamiento de un nodo i de dicho grafo y se denota como C_i al cociente:

$$C_i = \frac{\text{número de pares } (l, m) \text{ de nodos vecinos de } i \text{ conectados por aristas}}{\text{número total de pares que podrían existir de nodos vecinos de } i}$$

Dado que el número de vecinos de un nodo i es k_i el denominador en la expresión anterior es simplemente $k_i(k_i - 1)/2$. En el caso de un grafo dirigido se tiene la definición:

$$C_i = \frac{\text{número de pares } (l, m) \text{ de nodos vecinos de } i \text{ conectados por aristas dirigidas}}{\text{número total de pares dirigidos que podrían existir de nodos vecinos de } i}$$

En este caso el denominador es $k_i(k_i - 1)$.

A C_i se le llama también *coeficiente de agrupamiento local*. Una definición alternativa para un grafo no dirigido es la siguiente:

$$C_i = \frac{\text{número de triángulos que contienen el nodo } i}{\text{número de tripletes que contienen al nodo } i \text{ incidente a las dos aristas del triplete}}$$

donde un triplete es un grafo con 3 nodos y dos aristas. Se puede ver fácilmente que las dos definiciones coinciden. Por otra parte se define el *coeficiente de clustering de la red* simplemente como:

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

y la *transitividad del grafo* o *coeficiente de agrupamiento global* como:

$$T = \frac{3 \times \text{número de triángulos en } G}{\text{número de tripletes de nodos en } G}$$

y por lo tanto se tiene $0 \leq T \leq 1$.

12. **Matriz Laplaciana de un grafo \mathbf{L}** , llamada también Laplaciano del grafo, Laplaciano discreto, matriz admitancia o matriz de Kirchhoff, es una matriz que al igual que la matriz adyacente sirve para representar el grafo. Para un grafo simple no dirigido $G(N, L)$ se define como la matriz $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$ donde \mathbf{D} es la matriz de grados de nodos cuyos elementos son $D_{ji} = k_j \delta_{ji}$ y donde \mathbf{A} es la matriz adyacente del grafo no dirigido. Se tiene trivialmente que L es simétrica con elementos de la diagonal principal igual a los grados de los nodos, es decir

$$L_{ji} = \begin{cases} k_j & \text{si } j = i \\ -1 & \text{si } i \neq j \text{ y } n_j \text{ es adyacente a } n_i \\ 0 & \text{en cualquiera otro caso.} \end{cases}$$

3. Redes regulares y redes aleatorias

De forma intuitiva, una red totalmente conectada tiene la menor longitud promedio de caminos ($\ell = 1$) y el mayor coeficiente de agrupamiento ($\mathcal{C} = 1$). Aunque este tipo de redes tienen las propiedades de pequeño mundo y alto agrupamiento de muchas redes reales presenta un alto número de aristas, a saber $N(N-1)/2$ para una red no dirigida, mientras que en la mayoría de redes reales tienen un número de aristas que es $\mathcal{O}(N)$. Las redes complejas están ubicadas como veremos entre las redes regulares y las redes totalmente aleatorias, por lo que vamos a comenzar la descripción tanto de redes regulares como de redes aleatorias.

3.1. Redes regulares

Se define una red regular como aquella en la que todos los nodos tienen el mismo grado, es decir, tienen la misma cantidad de aristas incidentes y se denota como red o grafo k -regular donde k es el grado de todos los nodos. Ejemplos de grafos k regulares se muestran en la figura 9.

Trivialmente se tiene que un grafo completo K_n es un grafo $n-1$ regular. Las redes regulares aparecen en muchos sistemas en la naturaleza como, por ejemplo, en la formación de estructuras cristalinas y obedecen como ya hemos indicado a un principio de regularidad. Las redes regulares están caracterizadas por un coeficiente de agrupamiento \mathcal{C} muy alto (cercano a 1) y una longitud de camino promedio ℓ también grande sobre todo para $k \ll N$. De hecho $\ell \sim N/k$.

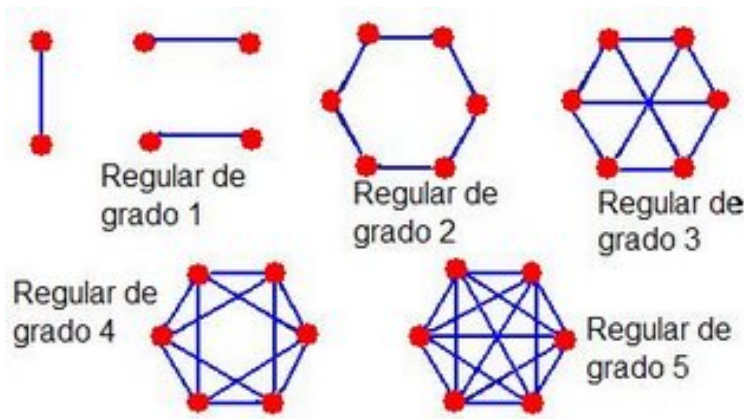


Figura 9: Ejemplos de grafos regulares

Ejercicio: Demostrar que para una red regular en forma de anillo donde cada nodo tiene grado $k = 2m$ el coeficiente de agrupamiento es $\mathcal{C} = 3(m-1)/(2m-1)$

3.2. Redes aleatorias: red de Erdős-Rényi

Una red aleatoria es aquella en que el grado de cada nodo es una variable aleatoria $k_i \in [0, N]$. El estudio sistemático de las redes aleatorias fue iniciado en 1959 por dos matemáticos Erdős y Rényi (ER) con el propósito original de estudiar mediante métodos probabilísticos las propiedades de los grafos en función de un incremento aleatorio del número de conexiones en el grafo. Hicieron un gran avance en la teoría matemática clásica de grafos que revolucionaría la forma en que se pueden modelar estos problemas describiendo una red con topología compleja por medio de un **grafo aleatorio**, estableciendo los fundamentos de la teoría de redes aleatorias. Aunque la intuición indica claramente que muchas redes complejas de la vida real no son ni totalmente regulares ni completamente aleatorias, el modelo ER fue el único enfoque sensato y riguroso que dominó el pensamiento de los científicos acerca de las redes complejas durante la segunda mitad del siglo XX.

El término grafo aleatorio se refiere a la naturaleza aleatoria de la localización de aristas entre diferentes nodos del grafo ER. En su primer artículo, Erdős y Rényi propusieron un modelo para generar grafos aleatorios con N nodos y L aristas, que en lo que sigue denotaremos como red aleatoria de Erdős y Rényi (ER) o grafo $G_{ER}(N, L)$. La forma de construirlo es la siguiente: Comenzamos con N nodos desconectados y empezamos conectando parejas de nodos seleccionados al azar mediante aristas, impidiendo la posibilidad de múltiples aristas entre los mismos nodos, hasta que el número total de aristas alcanza el valor L . De esta forma el grafo resultante es uno solo de los muchos que se pueden generar con N nodos y L aristas. Es decir sería un elemento del conjunto estadístico de todas las posibles combinaciones de L aristas. Para una descripción completa del modelo ER necesitaríamos el conjunto entero estadístico de todas las posibles realizaciones, esto es, en la representación matricial, del conjunto de matrices de adyacencia.

Una forma alternativa de construir una red ER es conectar cada par de nodos en la red con probabilidad $0 < p < 1$. Este procedimiento define un conjunto de diferente de grafos con diferentes número de aristas, que denotamos por $G_{ER}(N, p)$. En este conjunto aparecen grafos con L aristas con una probabilidad $p^L(1-p)^{N(N-1)/2-L}$. Los dos modelos coinciden en el límite de $N \gg 1$. Notad que el límite $N \rightarrow \infty$ se toma para mean degree $\langle k \rangle$ fijo, que se corresponde a fijar $2L/N$ en el primer modelo y $p(N-1)$ en el segundo, puesto que $\langle k \rangle = \sum_j [A_{ij}] = \sum_j p = p(N-1)$, donde $[A_{ij}]$ es el promedio de los elementos de la matriz de adyacencia. En este caso se tiene trivialmente $\langle L \rangle = pN(N-1)/2$, que permite ver la equivalencia entre las dos descripciones. El segundo modelo es más útil para hacer cálculos analíticos.

Las propiedades estructurales de las redes ER varían en función de p mostrando un cambio muy dramático a $p_c = 1/N$ correspondiente a un valor crítico del grado promedio $\langle k \rangle_c = 1$. Erdős y Rényi demostraron que:

- si $p < p_c$ entonces con probabilidad cercana a uno, cuando $N \rightarrow \infty$, el grafo no tiene componentes de tamaño mayor que $O(\ln N)$ y las componentes no tienen más de un ciclo.

- Si $p = p_c$ entonces el componente mas grande del grafo es $O(N^{2/3})$
- Si $p > p_c$ entonces el grafo tiene un componente que es $O(N)$ y tiene un número $O(N)$ de ciclos y los otros componentes son $O(\ln N)$ y no tienen más de un ciclo.

El cambio que ocurre a p_c tiene las características de una transición de fase de segundo orden. En particular si consideramos como parámetro de orden el tamaño de la componente de la red más grande (**componente gigante**) la transición cae en la misma clase de universalidad de la transición de fase de percolación. Es decir la percolación se puede entender que tiene una red compleja subyacente que es de tipo ER.

La probabilidad de que un nodo i tenga un grado $k = k_i$ (k_i aristas) es la distribución de probabilidad binomial.

$$P(k = k_i) = C_{N-1}^k p^k (1-p)^{N-1-k}$$

donde p^k es la probabilidad de que existan k aristas conectadas al nodo y $(1-p)^{N-1-k}$ es la probabilidad de que falten $N-1-k$ aristas conectadas al correspondiente nodo. El factor C_{N-1}^k es el número de formas diferentes que tenemos de seleccionar los nodos finales de las k aristas. Puesto que todos los nodos en un grafo aleatorio son estadística-mente equivalentes, todos tienen la misma distribución binomial por lo que la probabilidad para cualquier nodo de la red escogido al azar de tener un determinado grado k_i viene dada por

$$P(k_i) = P(k_i = k).$$

Para $N \gg 1$ y $\langle k \rangle$ fijo, esta distribución de probabilidad se puede aproximar muy bien por la distribución de Poisson:

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!},$$

por lo que también la red ER se llama red aleatoria Poissoniana. En la figura 10 se muestra la forma de la distribución caracterizando una red ER, y muestra un pico que está centrado entorno a $\langle k \rangle$. Debido a esta característica se habla de una **distribución de grados homogénea**.

Propiedades estructurales de las redes ER:

- La longitud promedio de caminos es $\ell \sim \ln N / \ln \langle k \rangle$
- Diámetro $\mathcal{D} \sim \ln N / \ln \langle k \rangle$
- Coeficiente de agrupamiento $C_i = p = \frac{\langle k \rangle}{N}$, es decir el coeficiente de agrupamiento es cero en el límite termodinámico.

Ejercicio: Demostrar estos valores.

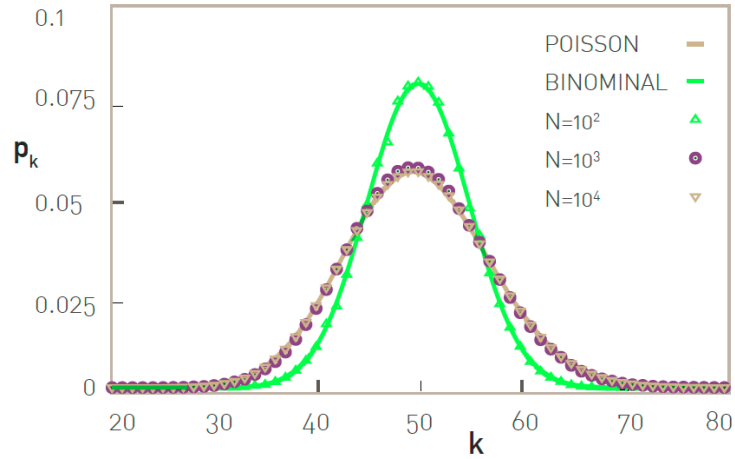


Figura 10: Diferencias entre la distribución Binomial y la de Poisson y como la distribución Binomial se aproxima a la de Poisson para $N \gg \langle k \rangle$.

Las redes aleatorias se pueden generalizar a redes que no tengan una distribución de tipo Poissoniana dando lugar a lo que se conoce como *modelo configuracional* de red aleatoria y que se construye de la siguiente forma:

Especificamos una distribución de probabilidad arbitraria $P(k)$ de forma que este número representa la fracción de vértices en la red que tienen una conectividad k . Especificamos una secuencia de grados $\{k_1, \dots, k_N\}$ tomada de esta distribución. A continuación empezamos a establecer aristas entre nodos de la red de forma que se satisfaga al final esta secuencia de grados con lo que generamos una posible topología de red que viene descrita por $P(k)$. Con este procedimiento se puede generar cualquier configuración o topología de red que viene descrita por $P(k)$. El modelo configuracional se define entonces como el conjunto de todas estas posibles topologías que se pueden generar con este procedimiento y que tienen en común $P(k)$, todas teniendo el mismo peso en el conjunto. En el límite $N \gg 1$ se puede demostrar que $P(k)$ coincide con la distribución de grados de cada configuración. El modelo configuracional falla sin embargo en incorporar la estructura de bucles que se encuentra en la mayoría de las redes reales.

En el modelo configuracional se puede demostrar las siguientes propiedades estructurales:

- $\ell = \frac{\ln(N/z_1)}{\ln(z_2/z_1)} + 1$ donde z_m es el número de vecinos a una distancia m de un nodo dado ⁴. En ER se tiene que $z_1 = \langle k \rangle$ y $z_2 = \langle k \rangle^2$
- $C = \frac{\langle k \rangle}{N} \left[\frac{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}{\langle k \rangle^2} \right]^2$

⁴Ver por ejemplo M.E.J. Newman, S.H. Strogatz, D.J. Watts, Phys. Rev. E 64 (2001) 26118.

4. Redes pequeño mundo

En 1998, con el fin de describir la transición de una red regular en una red aleatoria, Watts y Strogatz (WS) introdujeron el concepto de *red pequeño mundo*. Debe notarse que el fenómeno de mundo pequeño es de hecho muy común, y nada alejado de nuestras experiencias diarias. A menudo, poco después de conocer a un extraño, uno se sorprende al descubrir que tenemos un amigo común con él, de modo que es habitual la expresión: "¡Qué pequeño es el mundo!". Un experimento que se realizó hace más de 40 años dio lugar al llamado "*principio de los seis grados de separación*", sugerido por el psicólogo social Milgram a finales de 1960, y que establece que entre cualesquiera dos personas del mundo hay una media de 6 conexiones de amistad, independientemente de lo lejanas que estén dichas personas. Aunque este punto sigue siendo controvertido, el patrón del mundo pequeño ha demostrado estar presente en muchas redes reales. Una característica importante y común al modelo de redes aleatorias (ER) y al de mundo pequeño (WS) es que la función de distribución de grados tiene un máximo en el valor medio del grado y decae exponencialmente, lo que quiere decir que casi todos los nodos de la red tienen el mismo número de conexiones. Por ello, es común denominar a estos tipos de redes de manera conjunta como *redes exponenciales o redes homogéneas*.

El modelo de WS fue propuesto como una forma de extender los modelos de redes aleatorias para explicar dos observaciones que se habían descrito en las redes reales: a) la propiedad de pequeño mundo que se caracteriza en las redes reales por tener un longitud media de caminos entre dos nodos que va como $\ln N$ lo que las diferencia de las redes regulares donde va como N , y b) el alto coeficiente de agrupamiento observado en las redes reales y que las redes ER no podían explicar (ver figura 11).

Para conseguir una red aleatoria con estas propiedades de las redes complejas Watts y Strogatz proponen un modelo de red que se obtiene mediante un proceso de re-cableado con una cierta probabilidad p . La forma de construir la red es la siguiente:

- Partimos de una red regular de N nodos donde cada nodo tiene $k = 2m$ vecinos. Los nodos están dispuestos en un anillo circular tal que de cada nodos salen m aristas conectando los primeros m vecinos a la derecha del nodo y otras m aristas conectando los primeros m vecinos a la izquierda del nodo. En la figura 12 se observa en el panel de arriba la red regular de partida en (a) donde se está tomando $m = 2$, es decir cada nodo tiene 4 vecinos. El número total de aristas en la red inicial es por tanto $K = mN$.
- Entonces para cada nodo del anillo, re-cableamos con probabilidad p a un nodo al azar en el anillo cada una de las aristas con sus vecinos situados en el sentido de las agujas del reloj. Por lo tanto las aristas con los vecinos permanecen con probabilidad $(1 - p)$ y se quitan con probabilidad p . Entonces si $p = 0$ el re-cableado no se produce y la red sigue siendo la de partida, es decir regular (caso a en la figura 12). Si $p = 1$ todas las aristas son cambiadas y puestas al azar sobre nuevos nodos en la red de

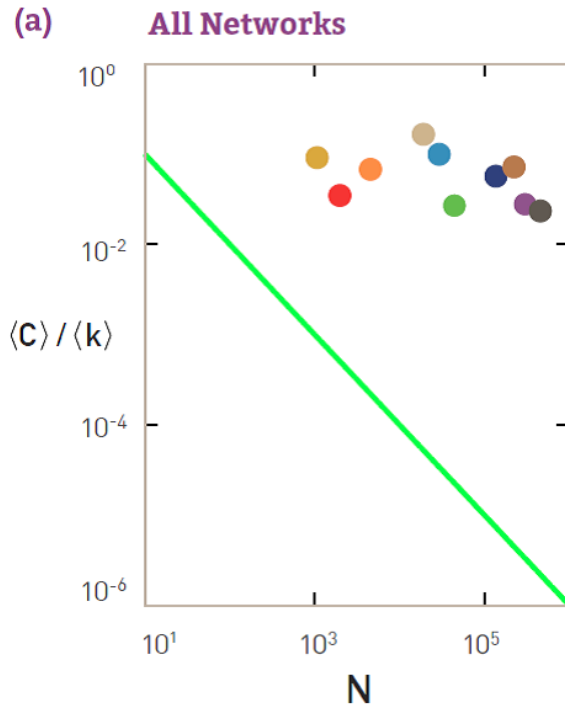


Figura 11: Comparación entre el coeficiente de agrupamiento de redes reales (círculos de colores) con diferente número de nodos con el correspondiente coeficiente de agrupamiento para una red ER (línea verde)

forma que la red resultante es aleatoria (caso c en la figura). Para valores intermedios de p tendríamos una red que tiene un alto grado de agrupamiento y la propiedad de pequeño mundo debido a los *atajos de largo alcance* (shortcuts) producidos por el re-cableado no nulos presente para ese valor de p (caso b en la figura) que conectan nodos distantes. Notad que en este tipo de red el número de total aristas permanece constante durante el re-cableado.

El efecto del re-cableado sobre la longitud promedio de caminos es altamente no-lineal pues puede disminuir considerablemente ℓ con muy pocos shortcuts. Sin embargo el re-cableado de unas pocas aristas de una vecindad de nodos muy agrupados solo tiene un efecto lineal sobre ese grado de agrupamiento. Por esto puede haber una región de valores de p para la que el grado de agrupamiento apenas se ve afectado mientras que ℓ pasa abruptamente de valores altos a pequeños (ver el panel de abajo de la figura 12)

Las propiedades estructurales de las redes WS son las siguientes:

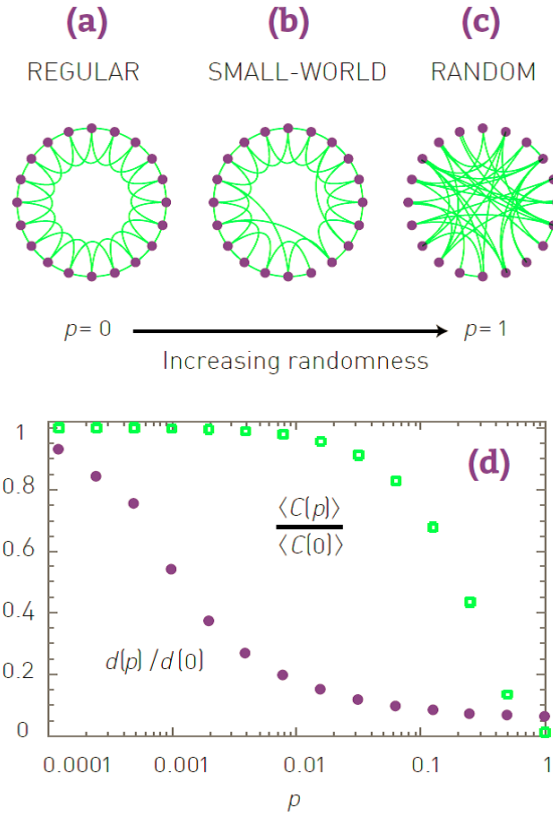


Figura 12: Generación de redes tipo pequeño mundo y su comparación con redes regulares y redes aleatorias.

- La longitud promedio de caminos $\ell(N, p)$:

para $p = 0$ se tiene

$$\ell(N, 0) = \frac{N(N + 2m - 2)}{4m(N - 1)} \sim \frac{N}{4m}$$

para $p = 1$ se tiene

$$\ell(N, 1) = \frac{\ln N}{\ln(2m - 1)}$$

Existen una transición de fase continua entre estos dos valores, es decir un p_c que separa estos dos comportamientos con una longitud característica que diverge como p^{-1}

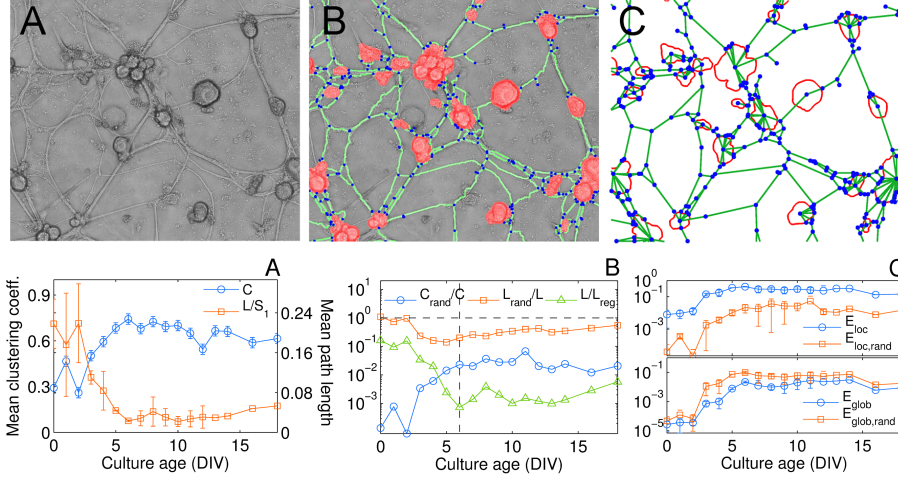


Figura 13: Red pequeño mundo en cultivos neuronales (Santos Sierra et al. Plos One 2014). Panel (A) coeficiente de clusteris y longitud promedio de caminos mostrando comportamiento pequeño mundo. Panel (B), comparación de dichos parámetros con respecto a redes aleatorias y redes regulares. Panel (C), comparación de la eficiencia local y global comparada con la de redes aleatorias, medidas, respectivamente, como el inverso de la distancia más corta entre dos nodos $E_{ij} = 1/d(i, j)$ y el promedio de dichas eficiencias locales $E(G) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} E_{ij}$.

- Coeficiente de agrupamiento:

$$\mathcal{C}(p) = \frac{3(m-1)}{2(2m-1)}(1-p)^3$$

- Distribución de probabilidad de grados:

$$P(k) = \sum_{i=0}^{\min(k-m, m)} \binom{m}{i} (1-p)^i p^{m-i} \frac{(pm)^{k-m-i}}{(k-m-i)!} e^{-pm}$$

para $k \geq m$ y 0 para $k < m$ ⁵

Ejercicio: Construir una red WS con re-cableado y otra en la que no hay re-cableado sino establecimiento con probabilidad p de atajos y comparar las dos redes resultantes y sus propiedades estructurales, $P(k)$, ℓ y \mathcal{C} .

⁵la derivación para estas cantidades se puede encontrar en A. Barrat, M. Weigt, Eur. Phys. J. B 13 (2000) 547.

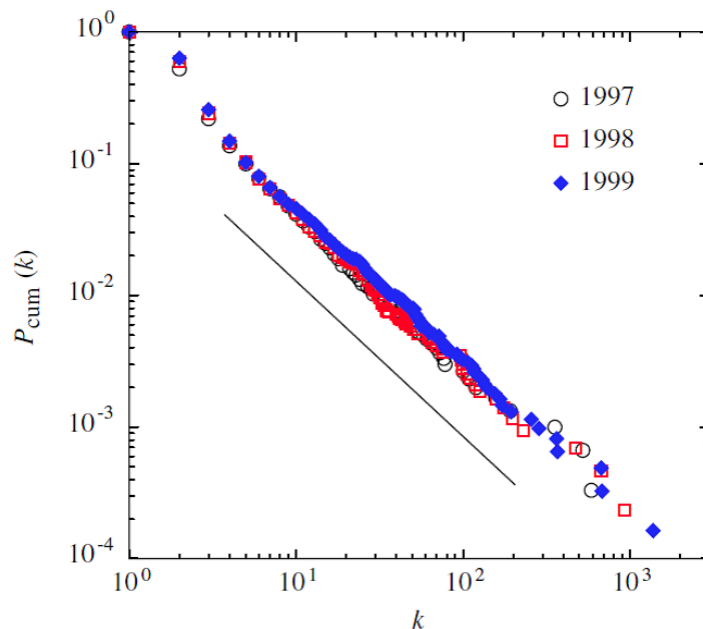


Figura 14: Probabilidad acumulada de la red de servidores en Internet donde las aristas son conexiones físicas entre servidores.

5. Redes invariantes de escala

Los grafos que hemos estudiado hasta al momento caracterizan redes complejas que tienen la propiedad de ser homogéneas. La homogeneidad en la estructura de interacciones de estas redes significa que todos los nodos son topológicamente equivalentes como en el caso de redes regulares y en el caso de redes aleatorias. En este último caso, cada uno de los $N(N-1)/2$ posibles aristas aparece con la misma probabilidad de forma que la distribución de grados es binomial y en $N \rightarrow \infty$ Poissoniana que implica tener distribuciones centradas entorno a un valor medio bien definido y con una varianza bien definida. Sin embargo cuando se hace un estudio sistemático de los datos disponibles sobre redes reales se encuentra sorprendente-mente que la mayoría de las distribuciones de grado son en forma de leyes de potencias $P(k) = Ak^{-\gamma}$ con exponentes variando en el rango $2 < \gamma < 3$. Uno tiene sencillamente para estas distribuciones que el promedio está bien definido y que la varianza $\sigma^2 = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2$ está dominada por el segundo momento de la distribución que diverge con el grado máximo k_{max} en la forma

$$\langle k^2 \rangle = \int_{k_{min}}^{k_{max}} k^2 P(k) \sim k_{max}^{3-\gamma}$$

Este tipo de redes se denominan redes invariantes de escala pues muestran un aspecto similar en cualquier escala de observación. De hecho como ya hemos

visto en el tema anterior la forma funcional en forma de ley de potencias es la única que queda invariante cuando cambiamos la escala, es decir son las únicas que son solución a la ecuación:

$$f(\alpha x) = \beta f(x)$$

En general denotaremos como *redes invariantes de escala* la que vienen descritas por una *distribución de grados que tipo ley de potencias* pero esto no significa necesariamente que dichas redes sean también invariantes de escala respecto de otras propiedades estructurales de la red. Además, la forma funcional en forma de ley de potencia implica que todos los grados entre k_{min} y k_{max} pueden aparecer en la red, es decir tienen una probabilidad no nula en el límite termodinámico de aparecer a diferencia de las redes homogéneas donde casi todos los nodos tienen el mismo grado y la probabilidad de que aparezca un nodo con un grado muy diferente de la media decae rápidamente a cero. Este hecho implica una alta heterogeneidad en los posibles grados en la red y la existencia de unos pocos nodos con un alto grado, los llamados “*hubs*” conectados con un alto número de nodos con grados pequeños. En redes de tamaño finito pueden existir cortes (“cut-offs”) en la distribución de grados. También para grandes grados las distribuciones muestran una alta dispersión a conectividades altas, es decir en las colas, debido a la pobre estadística. En estos casos es más útil estudiar la probabilidad acumulada definida como $P_{cum}(k) = \sum_{k'=k}^{\infty} P(k')$ (ver por ejemplo figura 14). En este caso se puede obtener el exponente de $P(k)$ como $\gamma = 1 + \gamma_{cum}$.

5.1. Modelos estáticos de redes invariantes de escala

Son modelos construidos del modelo configuracional, es decir, se generan redes de forma que la distribución de grados tenga la forma de ley de potencias eligiendo N valores aleatorios para las k_i distribuidos según $P(k)$, y después conectando al azar sobre todos los nodos de forma que se satisfagan las k_i . Estos modelos así construidos se denominan modelos estáticos invariantes de escala.

Uno de los modelos estáticos estudiados es el que se construye asumiendo que el número de nodos que tienen un determinado grado k es $N(k) = e^{\alpha} k^{-\gamma}$ que tiene dos parámetros libres ⁶. En este modelo, dados α y γ , quedan totalmente determinados el número de nodos y aristas en la red. Se puede demostrar que las redes que se generan con este modelo tienen una componente gigante si $\gamma < \gamma_c \approx 3,478$.

Estos modelos estáticos configuracionales tienen las siguientes propiedades estructurales:

- Longitud promedio de caminos: $\ell \sim \ln N$ (para $\gamma > 3$) y órdenes menores para $2 < \gamma < 3$, y el diámetro $\mathcal{D} \sim \ln N$

⁶ver por ejemplo, W. Aiello, F. Chung, L. Lu, Proceedings of the 32nd Annual ACM Symposium on Theory of Computing, Association of Computing Machinery, 63 New York, 2000, p. 171.

- Coeficiente de agrupamiento: $\mathcal{C} \sim N^{(3\gamma-7)/(\gamma-1)}$

5.2. Modelos dinámicos de redes invariantes de escala

Estos modelos surgen cuando se trata de modelar la dinámica de crecimiento de ciertas redes reales. En estos casos las propiedades estructurales de la red resultante dependen de la propia dinámica evolutiva de la red que la ha llevado a ese estado final. El modelo más conocido de este tipo es el modelo de Barabási y Albert (BA) también conocido como de *añadido preferencial de nodos*⁷.

El modelo BA está basado en como la WWW se ha ido formando y se basa fundamentalmente en dos aspectos: crecimiento y añadido preferencial de nodos. La idea principal es que los lugares de la WWW con grados altos adquieren nuevas aristas a nuevos nodos con más probabilidad que los lugares con grados más bajos. De forma más precisa un grafo $G_{BA}(N, L)$ se construye de la siguiente forma. Se parte de m_0 nodos aislados y a cada instante de tiempo $t = 1, 2, \dots, N - m_0$ se añade un nuevo nodo j a la red con $m \leq m_0$ aristas. La probabilidad de que una arista conecte el nodo nuevo j con un nodo i de los m_0 existentes es proporcional al grado del nodo i , es decir k_i :

$$p_{j \rightarrow i} = \frac{k_i}{\sum_l k_l}.$$

Dado que cada nodo que se añade tiene m aristas entonces en cada instante de tiempo t tenemos $N = m_0 + t$ nodos y $L = mt$ aristas, de forma que la conectividad promedio es $\langle k \rangle = 2m$ para tiempos muy grandes.

El modelo BA has sido resuelto en aproximación de campo medio obteniendo una ecuación de tipo *rate* y una ecuación maestra. En el límite de $t \rightarrow \infty$ se puede obtener como solución una distribución $P(k) \sim k^{-\gamma}$ con $\gamma = 3$ (ver figura 15)

Podemos determinar una ecuación dinámica para la evolución de las conectividades en el modelo BA en la siguiente forma: supongamos que añadimos un nuevo nodo j a la red que se puede conectar con los existentes a través de m aristas entonces se tiene que

$$\frac{dk_i}{dt} = mp_{j \rightarrow i}$$

pues el nodo i tiene m posibilidades de poder conectarse con el j con probabilidad $p_{j \rightarrow i}$. Por otra parte $\sum_l k_l = 2mt - m$ pues la suma se extiende a número total de nodos menos el j , que tiene una conectividad $k_j = m$. Usando este resultado tenemos

$$\frac{dk_i}{dt} = \frac{k_i}{2t - 1}$$

cuya solución para t largos es

$$k_i(t) = m \left(\frac{t}{t_i} \right)^{1/2}$$

⁷Albert-László Barabási & Réka Albert (1999). "Emergence of scaling in random networks". Science 286: 509-512.

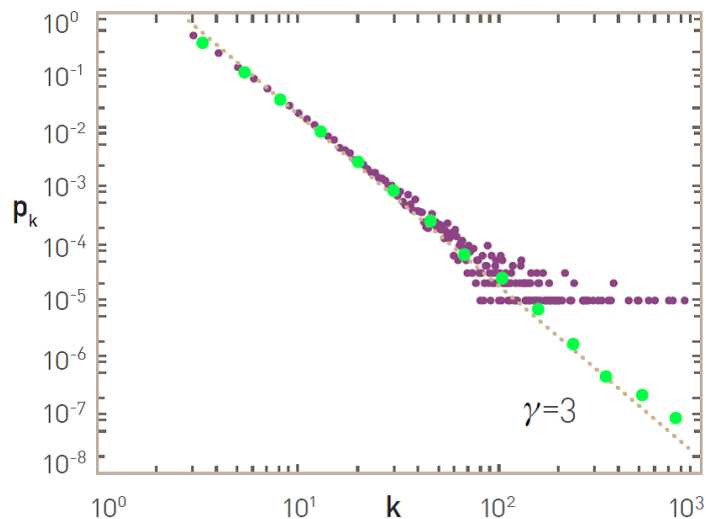


Figura 15: Generación de una topología de red BA con $m = 3$ y $N = 100000$ nodos. Los puntos morados corresponden al histograma que se obtiene con intervalos lineales, y los verdes al que se obtiene con intervalos tomados en escala log.

donde t_i es el tiempo en el que se añadió el nodo i . Consecuencia de este resultado es que los nodos que se añaden antes a la red son los que acaban teniendo una conectividad mayor (hubs).

Las propiedades estructurales de la red de BA son las siguientes:

- La longitud promedio de caminos: $\ell \sim \ln N / \ln(\ln N)$
- Coeficiente de agrupamiento: $\mathcal{C} \sim N^{-3/4}$.

El modelo de BA has sido ampliamente estudiado y numerosas versiones de redes evolutivas han sido propuestas utilizando una dinámica similar, incluyendo algunas generalizaciones del mismo.

La red BA pierde el carácter de invariante de escala y de heterogeneidad para m grande, donde empieza a hacerse más homogénea.

6. Correlaciones grado-grado

La distribución de grados $P(k)$ caracteriza completamente las propiedades estadísticas de redes complejas descorrelacionadas, que son aquellas en las que el grado de un nodo es independiente del grado del resto de los nodos en la red. Sin embargo hay multitud de redes reales en las que la probabilidad de que un nodo de grado k esté conectado a otro nodo de grado k' depende de k . En

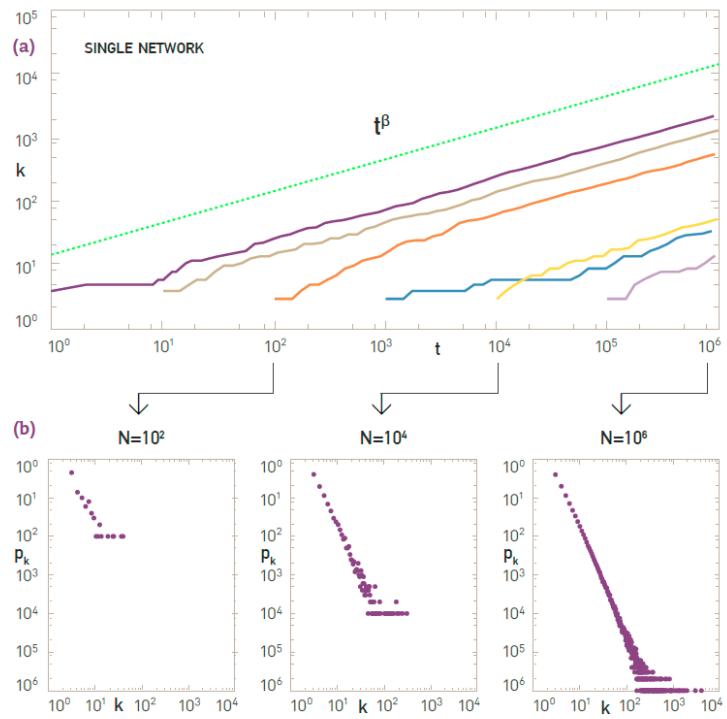


Figura 16: Panel superior: dependencia de las conectividades k_i con el tiempo. Panel inferior: evolución de la $P(k)$ con el tiempo en el modelo de BA

estos caso es necesario introducir una probabilidad condicional $P(k'|k)$ definida como la probabilidad de que un nodo de grado k y un nodo de grado k' estén conectados por una arista. Esta probabilidad satisface la normalización

$$\sum_{k'} P(k'|k) = 1$$

y la condición de balance detallado

$$kP(k'|k)P(k) = k'P(k|k')P(k').$$

Para redes descorrelacionadas $P(k'|k)$ no depende de k de donde usando la normalización y la condición anterior obtenemos

$$P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle.$$

Aunque las correlaciones grado-grado quedan formalmente caracterizadas por $P(k'|k)$ en la práctica debido al tamaño finito de muchas redes complejas (que da resultados muy ruidosos para esta probabilidad condicionada) es más conveniente trabajar para medir correlaciones grado-grado con el grado promedio de los vecinos próximos de un grado i definido como

$$k_{nn}^i = \frac{1}{k_i} \sum_{j \in \text{vec}(i)} k_j = \frac{1}{k_i} \sum_{j=1}^N A_{ij} k_j$$

A partir de aquí podemos calcular el grado promedio de vecinos próximos que tienen un determinado grado k como

$$k_{nn}(k) = \sum_{k'} k' P(k'|k).$$

Si no hay correlaciones se tiene

$$k_{nn}(k) = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}$$

es decir es independiente de k .

En virtud de las correlaciones grado-grado, los grafos se clasifican en **asortativos** si $k_{nn}(k)$ es una función creciente en k , o **disasortativos** si $k_{nn}(k)$ es una función decreciente en k .

En definitiva las redes de tipo asortativo tienen correlaciones positivas de grados en el sentido de que nodos muy conectados tienden a conectarse con nodos muy conectados y nodos poco conectados con nodos poco conectados, mientras que en las disasortativas los nodos con mayor grado se conectan con nodos con grado pequeño. En definitiva el grado de asortatividad se mide mediante la pendiente de la curva $k_{nn}(k)$ (ver figura 17).

Otro parámetro que se utiliza para medir las correlaciones es el llamado coeficiente de Pearson aplicado a las aristas definido como:

$$r = \frac{[k_l k'_l] - [k_l]^2}{[k_l^2] - [k_l]^2}$$

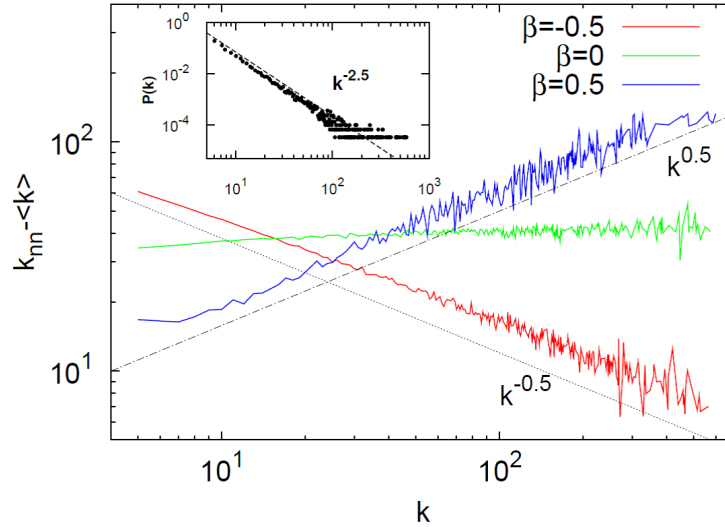


Figura 17: Generación de redes invariantes de escala con diferentes tipos de correlaciones grado-grado.

donde k_l y k'_l son los grados de los dos nodos conectados por una arista l y $[\cdot] = \frac{1}{\langle k \rangle N} \sum_l (\cdot) = \sum_{ij} A_{ij}$ es un promedio sobre todas las aristas en la red que se puede escribir en la forma:

$$r = \frac{\langle k \rangle \langle k^2 k_{nn}(k) \rangle - \langle k^2 \rangle^2}{\langle k \rangle \langle k^3 \rangle - \langle k^2 \rangle^2}$$

y es tal que para un valor positivo significa que la red es asortativa (como ocurre en la mayoría de las redes sociales) y un valor negativo implica disasortatividad (como en las redes biológicas y tecnológicas) como se muestra en la figura 19.

7. Redes jerárquicas.

Muchas redes reales presentan dos propiedades genéricas: invariancia de escala y un elevado coeficiente de agrupamiento para todos los nodos. Estas dos características pueden aparecer debido a la existencia de una alta jerarquización en la forma que pequeños grupos de nodos se organizan de una forma jerárquica en grupos de nodos mayores manteniendo la invariancia de escala. Podemos así definir las **redes jerárquicas** como aquellas redes complejas que presentan invariancia de escala a la vez que un coeficiente de agrupamiento muy elevado para todos los nodos. En estas redes el grado de agrupamiento que caracterizan los diferentes grupos de nodos sigue una estricta ley de escala que puede ser usada para detectar jerarquización en redes reales.

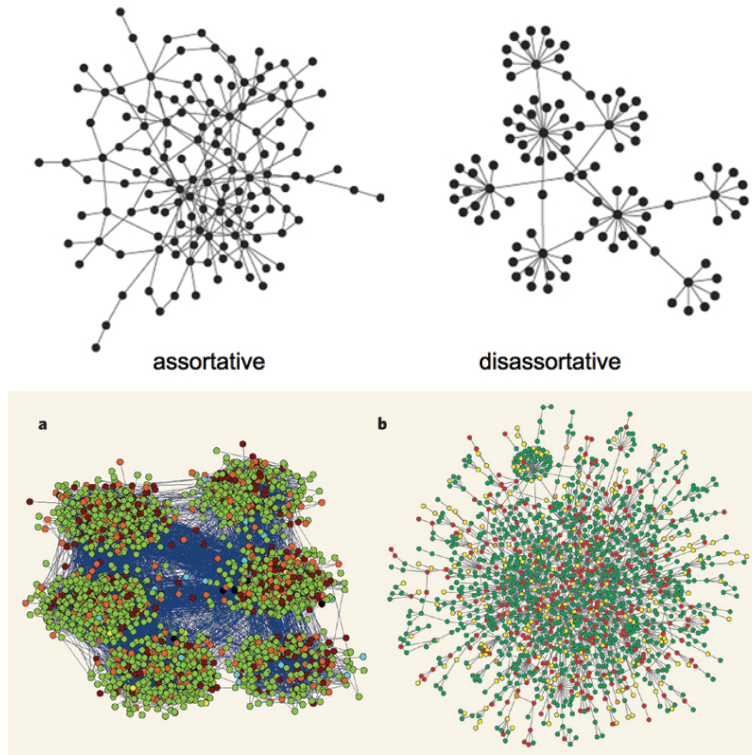


Figura 18: Panel superior, diferencias entre redes asortativas y disasortativas. Panel inferior muestras dos ejemplos de redes reales con diferente asortatividad, por ejemplo en (a) (grupos de amigos en una escuela de EEUU) una red asortativa y en (b) (red de interacción de proteínas en la levadura de la cerveza *Saccharomyces cerevisiae*) una red real disasortativa.

Network	n	r
Physics coauthorship (a)	52 909	0.363
Biology coauthorship (a)	1 520 251	0.127
Mathematics coauthorship (b)	253 339	0.120
Film actor collaborations (c)	449 913	0.208
Company directors (d)	7 673	0.276
Internet (e)	10 697	-0.189
World-Wide Web (f)	269 504	-0.065
Protein interactions (g)	2 115	-0.156
Neural network (h)	307	-0.163
Marine food web (i)	134	-0.247
Freshwater food web (j)	92	-0.276
Random graph (u)		0
Callaway <i>et al.</i> (v)		$\delta/(1 + 2\delta)$
Barabási and Albert (w)		0

Figura 19: Grado de asortatividad y disasortatividad en diferentes redes reales.

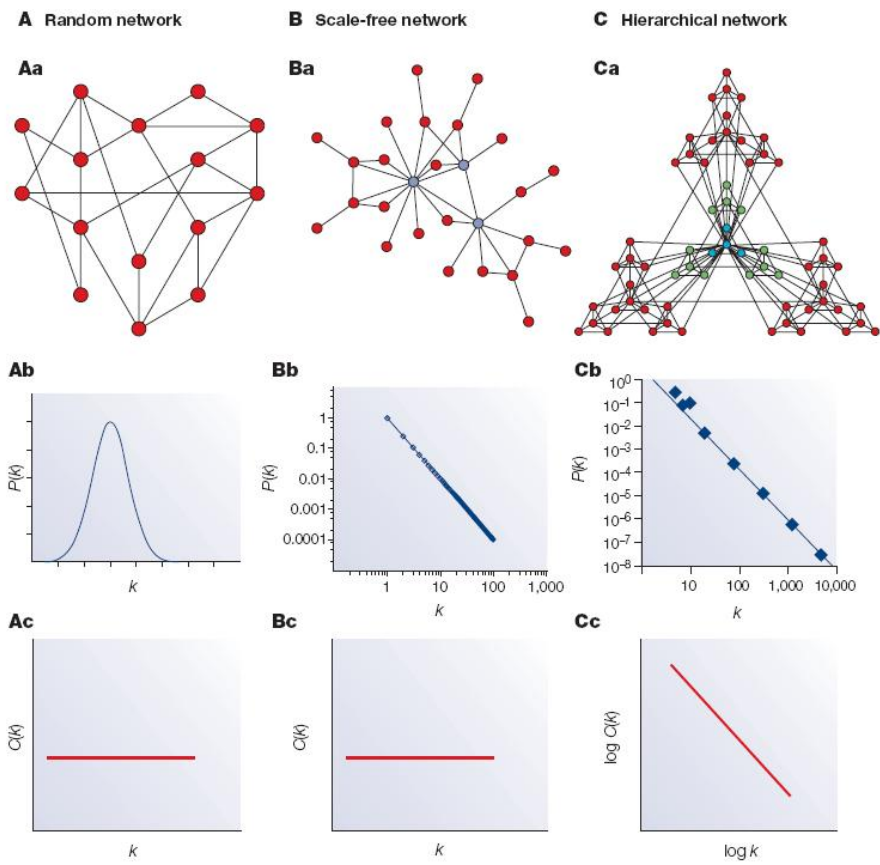


Figura 20: Comparación entre redes aleatorias, invariantes de escala y redes jerarquizadas.

Propiedades:

1. Tienen una distribución de grados que es una ley de potencias:

$$P(k) = ck^{-\gamma}$$

En una red jerárquica se puede demostrar que

$$\gamma = 1 + \frac{\ln M}{\ln(M-1)}$$

donde M es el factor que se replica (en el ejemplo mas abajo $M = 4$)⁸

2. Coeficiente de agrupamiento de un nodo de grado k sigue una ley de escala

$$\mathcal{C}(k) \sim k^{-\beta}$$

A diferencia de otro tipo de redes complejas como las redes aleatorias y las redes invariantes de escala, el coeficiente de agrupamiento de nodos con grado k depende del grado no es constante.

3. Coeficiente de agrupamiento en función de la tamaño de la red N :

$$\mathcal{C}(N) \sim cte$$

de hecho hemos visto que en las redes invariantes de escala va como $\mathcal{C} \sim N^{-0,75}$.

4. Las redes jerarquizadas tienen una clara estructura fractal y modular (ver figura 20) .
5. El exponente β que controla el escalado del coeficiente de agrupamiento con el grado puede cambiar si se cambian ciertos parámetros que controlan la estructura de la red (es decir no es un parámetro universal). Esto se puede ver haciendo una versión estocástica de un modelo jerárquico como el que se muestra en la figura 20 conectando una fracción p^n de nodos de cada módulo en el paso n de la iteración mediante unión preferencial para construir la red jerárquica. Las propiedades estructurales de estas redes jerárquicas aleatorias se muestran en la figura 21.

Muchas redes reales muestran características de las redes jerárquicas como claramente muestra la figura 22.

⁸Ver Noh, J. (2003). "Exact scaling properties of a hierarchical network model". Physical Review E. 67 (4)

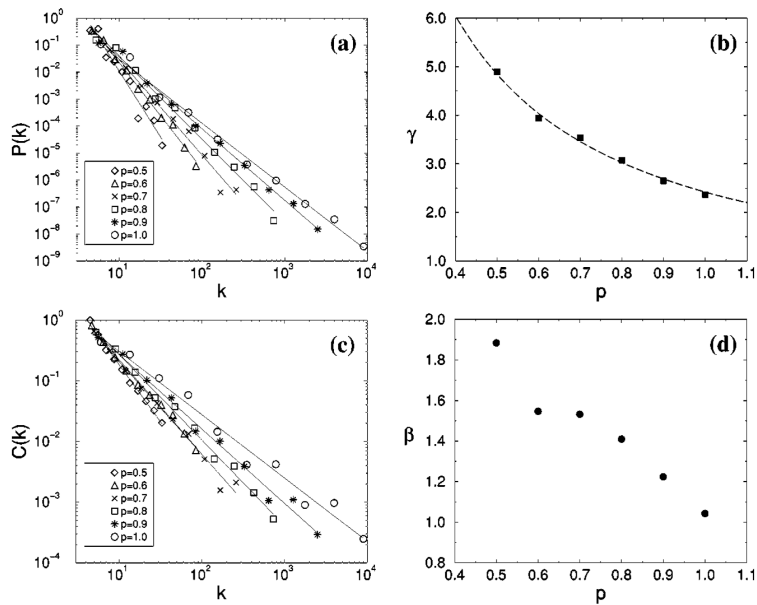


Figura 21: Propiedades estructurales de redes jerárquicas aleatorias.

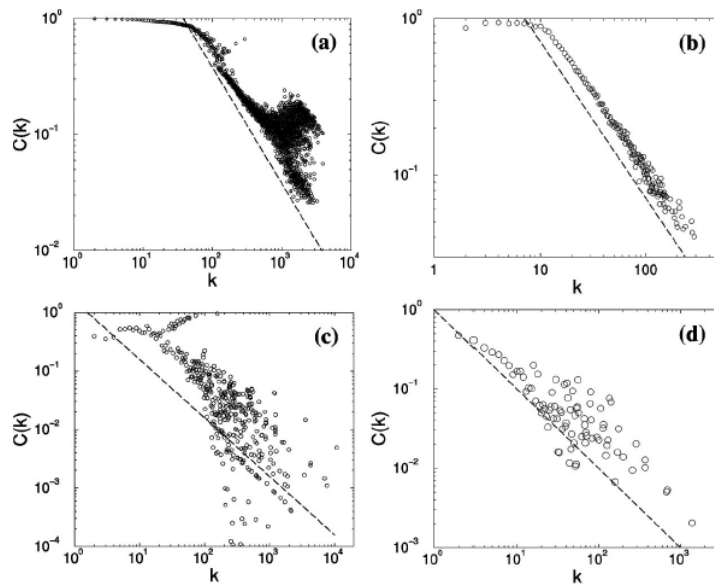


Figura 22: Redes reales jerárquicas: (a) red de actores (b) red semántica de palabras inglesas (c) la red WWW y (d) Internet

8. Redes modulares

Muchas redes reales muestran cierta *modularidad*, en el sentido que puede subdividirse en grupos de nodos más interconectados entre sí, que constituyen comunidades o módulos, que a su vez están conectados entre sí con una menor densidad de aristas (ver figura 23) . Esta característica ya la hemos visto en el caso de las redes jerárquicas que muestran una clara modularidad. El problema de detectar y caracterizar la estructura modular de una red compleja tiene un gran interés actual pues permite entender la estructura y función de la red y su mecanismo de crecimiento. De hecho constituye una de las principales líneas de investigación en el campo de las redes complejas. Generalmente para determinar los módulos o comunidades presentes en una red compleja se utiliza un proceso de optimización que maximiza un determinado parámetro que denotamos por “*modularidad*”.

De forma más cuantitativa se puede definir *la modularidad de una red compleja como la fracción de aristas que caen dentro de un grupo de nodos en una red compleja menos la fracción de aristas que habría en dicho grupo de nodos si la red fuera aleatoria*. El rango de la modularidad es $[-1/2, 1)$, donde un valor positivo indica que el número de aristas dentro del grupo de nodos es mucho más grande que el que se esperaría simplemente de conectar al azar los nodos. Podemos por lo tanto determinar la estructura en comunidades de una red compleja, explorando divisiones de la red que impliquen una modularidad positiva. Uno de los métodos tradicionales que se han utilizado para esto es optimizar la modularidad sobre diferentes particiones de la red mediante el algoritmo de “*recocido simulado*” (*simulated annealing*). Sin embargo este método requiere un alto coste computacional. Los métodos más aceptados actualmente son los que re-formulan la modularidad en términos de las *propiedades espectrales de la red* en cuestión.

Supongamos una red constituida por N vértices y L aristas. Supongamos que la red puede dividirse en dos grupos I y II. Denotamos $s_i = 1$ si el vértice i pertenece al grupo I y $s_i = -1$ si i pertenece al grupo II. Sea A_{ij} el elemento ij de la matriz de adyacencia que en principio puede tomar el valor 0 o 1, aunque también puede tomar otro valor si consideramos la posibilidad de múltiples aristas entre dos nodos. De esta forma A_{ij} nos da el número de aristas entre los nodos i y j . Por otra parte el valor esperado de aristas entre los nodos i y j si la red fuera aleatoria sería $[A_{ij}]_{RAND} = \frac{k_i k_j}{N \langle k \rangle} = \frac{k_i k_j}{2L}$. Entonces la modularidad, que denotamos por la letra Q , se define como la suma de las diferencias $A_{ij} - [A_{ij}]_{RAND}$ sobre todo par de índices (ij) que caen en el mismo grupo. Dado que la cantidad $\eta_{ij} = \frac{1}{2}(s_i s_j + 1)$ es 1 si los nodos i y j están en el mismo grupo y 0 si no lo están entonces se puede poner (la suma es ahora sin restricciones)

$$Q = \frac{1}{L} \sum_{ij} (A_{ij} - [A_{ij}]_{RAND}) \eta_{ij} \quad (1)$$

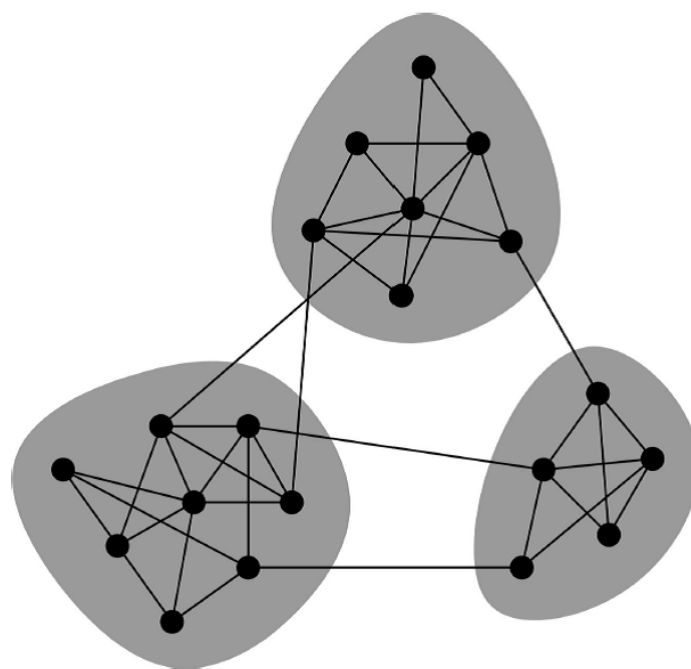


Figura 23: Ejemplo de red modular.

que se puede expresar como

$$Q = \frac{1}{2L} \sum_{ij} (A_{ij} - [A_{ij}]_{RAND}) s_i s_j \quad (2)$$

Ejercicio: Demostrar la expresión anterior.

Particiones en grupos I y II que maximizan Q son buenas candidatas a diferentes comunidades o módulos en la red.

La expresión (2) se puede generalizar al caso de tener una partición de M grupos simplemente definiendo $S_{i\rho} = 1$ si el vértice i pertenece al grupo ρ y $S_{i\rho} = 0$ si no pertenece, en cuyo caso se define

$$\eta_{ij} = \sum_{\rho=1}^M S_{i\rho} S_{j\rho}$$

que como antes es 1 si el nodo i y j pertenecen al mismo grupo de la partición y 0 si no pertenecen al mismo grupo, por lo que la modularidad queda:

$$Q = \frac{1}{2L} \sum_{ij} \sum_{\rho} (A_{ij} - [A_{ij}]_{RAND}) S_{i\rho} S_{j\rho}.$$

La expresión anterior se puede poner en forma matricial, lo que es útil para el uso de algoritmos de optimización espectrales, introduciendo las matriz \mathbf{S} (de dimensión $N \times M$) cuyos elementos de matriz son los $S_{i\rho}$, y la matriz cuadrada \mathbf{B} cuyos elementos de matriz son

$$B_{ij} = A_{ij} - [A_{ij}]_{RAND}, \quad (3)$$

y que se llama la **matriz modularidad**. Entonces en forma matricial la modularidad queda:

$$Q = \frac{1}{2L} \text{Tr} \mathbf{S}^T \mathbf{B} \mathbf{S} \quad (4)$$

Ejercicio: Para redes divididas en solo dos comunidades I y II, demostrar que la $\sum_{\rho} s_i s_j + 1 = \frac{1}{2}(s_i s_j + 1)$.

Usando este resultado tenemos que para una red dividida en dos comunidades la modularidad en forma matricial se expresa:

$$Q = \frac{1}{2L} \mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s} \quad (5)$$

donde \mathbf{s} es el vector columna con elementos s_i . La expresiones de la modularidad (4) y (5) tienen la forma de un hamiltoniano tipo Ising describiendo un vidrio de espín, por lo que como hemos dicho antes son útiles los algoritmos de recocido simulado para maximizar la modularidad.

Vamos a ver en este caso como podemos hacer una análisis espectral de la modularidad:

Sea \mathbf{u}_α los auto-vectores de la matriz \mathbf{B} , es decir

$$\mathbf{B}\mathbf{u}_\alpha = \lambda_\alpha \mathbf{u}_\alpha$$

donde $\{\lambda_\alpha\}$ es el conjunto de auto-valores de la matriz \mathbf{B} , que suponemos ordenados de mayor a menor $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_N$. Sin pérdida de generalidad podemos poner

$$\mathbf{s} = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}$$

con $a_{\alpha} = \mathbf{u}_{\alpha}^T \cdot \mathbf{s}$. Entonces la modularidad para dos grupos se puede poner como

$$Q = \frac{1}{2L} \sum_{\alpha, \beta} a_{\alpha} a_{\beta} \mathbf{u}_{\alpha}^T \mathbf{B} \mathbf{u}_{\beta}$$

dado que los $\{\mathbf{u}_{\alpha}\}$ constituyen una base orto-normal. Entonces nos queda

$$Q = \frac{1}{2L} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 \lambda_{\alpha} = \frac{1}{2L} \sum_{\alpha} (\mathbf{u}_{\alpha}^T \cdot \mathbf{s})^2 \lambda_{\alpha}.$$

Como tenemos que decidir que nodos pertenecen a cada grupo, esto en la práctica significa elegir el vector \mathbf{s} . Entonces para maximizar Q deberíamos elegir s tal que sea paralelo al auto-vector asociado al auto-valor más grande, esto es λ_1 , pues de esta forma solo nos queda un término en la suma anterior, el correspondiente a $\alpha = 1$. Sin embargo el vector \mathbf{s} tiene componentes binarias por lo que no podemos hacerlo paralelo a \mathbf{u}_1 . De todas formas, todavía podemos maximizar Q eligiendo \mathbf{s} en la forma $s_i = 1$ si $u_{1,i} > 0$ y $s_i = -1$ si $u_{1,i} < 0$.

Si tenemos más de dos particiones procedemos de la siguiente forma, la idea es dividir cada una de las dos particiones que resultan del método anterior en otras dos particiones y así sucesivamente hasta que tengamos el número de particiones que queremos. Lo que se hace dividir la modularidad de un grupo g en la suma de la modularidad que queda después de dividirlo en dos más una cantidad ΔQ_g en la forma:

$$Q_g = Q_{después} + \Delta Q_g.$$

Por definición (ver expresión (3))

$$Q_g = \frac{1}{L} \sum_{i,j \in g} B_{ij}$$

y de (1) se tiene

$$Q_{después} = \frac{1}{L} \sum_{i,j \in g} B_{ij} \eta_{ij}$$

con lo que

$$\Delta Q_g = \frac{1}{2L} \left[\sum_{i,j \in g} B_{ij} s_i s_j - \sum_{i,j \in g} B_{ij} \right]$$

que se puede poner como:

$$\Delta Q_g = \frac{1}{2L} \sum_{ij \in g} \left[B_{ij} - \delta_{ij} \sum_{k \in g} B_{ik} \right] s_i s_j$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Definiendo la matriz $\mathbf{B}^{(g)}$ cuyos elementos de matriz son

$$(B^{(g)})_{ij} = B_{ij} - \delta_{ij} \sum_{k \in g} B_{ik}$$

finalmente obtenemos:

$$\Delta Q_g = \frac{1}{2L} \mathbf{s}^T \mathbf{B}^{(g)} \mathbf{s}$$

que tiene la forma de la ecuación (5) y por tanto podemos también maximizar por el mismo método espectral que hemos descrito anteriormente.

El proceso continua hasta el momento en que una nueva división no incrementa la modularidad de la red, es decir el ΔQ que resulte de la nueva división del grupo sea cero o negativo.

9. Redes multiplex.

Muchas redes reales están interrelacionadas entre ellas y no se pueden analizar de forma aislada. En este sentido en los últimos años se ha empezado a estudiar redes de redes reales, lo que se conoce con el nombre de *redes multiplex*, o *redes multicapa* no solo desde un punto de vista estático sino también dinámico. Un ejemplo muy fácil de entender es la red de transportes que incluye por ejemplo la red de aeropuertos, la red de carreteras y la red de metro.

En el caso de la red de aeropuertos se suele modelar como una sola red donde los nodos son los aeropuertos y las aristas son los vuelos directos entre aeropuertos. Sin embargo una mejor representación sería considerar una red multiplex constituida de muchas redes cada una de las cuales correspondería a una compañía aérea particular, donde cada nodo sería de nuevo los aeropuertos y cada arista correspondería a los vuelos directos entre aeropuertos realizados por esa compañía. Puede ocurrir cada una de estas redes tenga el mismo conjunto de nodos pero diferentes aristas, pues no todas las compañías aéreas tienen vuelos entre los mismos aeropuertos. El estudio de esta red multiplex tiene mucha importancia por ejemplo para re-alojar pasajeros que han perdido sus vuelos y deben ser re-colocados en algún vuelo de otra compañía por el elevado coste económico que este hecho lleva consigo.

En general las infraestructuras complejas son totalmente interdependientes de forma que un pequeño fallo en una red puede provocar una cascada de fallos en todas las redes interdependientes (ver figura 25)

Otro ejemplo claro lo tenemos en la biológica y más concretamente en la neurociencia, donde en medios neuronales como el cerebro encontramos tanto



Figura 24: Red multicapa de transporte en EEUU. Las líneas azules corresponden a líneas de transporte terrestre (coches, trenes, etc). Las líneas rojas, naranjas y amarillas corresponden a líneas de transporte aéreo siendo las rojas las que mayor intensidad llevan.

conexiones o sinapsis de tipo eléctrico (uniones gap) como sinapsis químicas, y la dinámica asociada a cada una de ellas es totalmente distinta. Por lo tanto tales medios neuronales pueden ser caracterizados por una red multiplex constituida por dos subredes, de forma que cada neurona puede jugar un papel diferente en cada subred.

Podemos definir por tanto las redes multicapa como aquellas que incorporan diferentes canales de conectividad, y describen a sistemas que están interconectados con diferentes categorías de conexiones: cada canal es representado por una subred o capa y un mismo nodo puede tener diferentes tipos de interacciones y una vecindad diferente en cada capa. Vamos a formalizar el concepto de redes multiplex o redes multicapa:

- **Red multicapa** es un par $\mathcal{M} = (\mathcal{G}, \mathcal{E})$ donde $\mathcal{G} = \{G_\alpha, \alpha = 1, \dots, M\}$ es una familia de grafos $G_\alpha = (\mathcal{N}_\alpha, \mathcal{L}_\alpha)$ (capas de la red multicapa \mathcal{M}) y $\mathcal{E} = \{\mathcal{E}_{\alpha\beta} \subseteq \mathcal{N}_\alpha \times \mathcal{N}_\beta, \alpha \neq \beta\}$ es el conjunto de las interconexiones entre nodos de las diferentes capas. Los elementos de \mathcal{E} se llaman **capas cruzadas**, los elementos de \mathcal{L}_α se llaman **conexiones intracapa**, y los elementos de cada capa cruzada $\mathcal{E}_{\alpha\beta}$ se llaman **conexiones intercapas**.

El conjunto de nodos en cada capa lo denotamos por $\mathcal{N}_\alpha = \{n_1^\alpha, \dots, n_{N_\alpha}^\alpha\}$ y la matriz de adyacencia de cada capa la denotamos con $\mathbf{A}^{[\alpha]}$ cuyos elementos son

$$A_{ij}^\alpha = \begin{cases} 1 & \text{si la arista } (n_i^\alpha, n_j^\alpha) \in \mathcal{L}_\alpha \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

La matriz de adyacencia entre capas correspondiente al conjunto $\mathcal{E}_{\alpha\beta}$ de

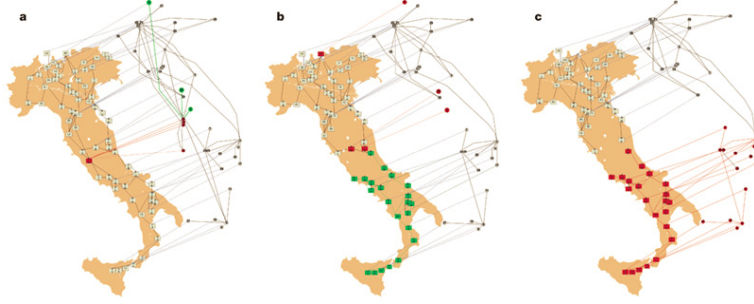


Figura 25: Cascada de fallos originada por una avería en un planta eléctrica de la red eléctrica de Italia (nodos sobre el mapa) y como afecta a la red de Internet (nodos fuera del mapa) eliminando importantes hubs en esa red que a su vez induce fallos de nuevo en otras plantas eléctricas (Italia 2003).

las interconexiones entre las capas α y β es $\mathbf{A}^{[\alpha,\beta]}$ con elementos de matriz

$$A_{ij}^{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{si la arista } (n_i^\alpha, n_j^\beta) \in \mathcal{E}_{\alpha\beta} \\ 0 & \text{cualquier otra situación} \end{cases}$$

- **Red proyección** de \mathcal{M} es el grafo $proj(\mathcal{M}) = (\mathcal{N}_{\mathcal{M}}, \mathcal{E}_{\mathcal{M}})$ donde

$$\mathcal{N}_{\mathcal{M}} = \bigcup_{\alpha=1}^M \mathcal{N}_{\alpha} \quad \mathcal{E}_{\mathcal{M}} = \left(\bigcup_{\alpha=1}^M \mathcal{L}_{\alpha} \right) \cup \left(\begin{array}{c} \bigcup_{\alpha, \beta = 1}^M \mathcal{E}_{\alpha\beta} \\ \alpha \neq \beta \end{array} \right)$$

- **Red multiplex:** Es una caso particular de red multicapa donde $\mathcal{N}_1 = \mathcal{N}_2 = \dots = \mathcal{N}_M = \mathcal{N}$ y donde los únicos elementos de \mathcal{E} son el conjunto de aristas $\mathcal{E}_{\alpha\beta} = \{(n_i^\alpha, n_i^\beta) \mid i \in \mathcal{N}, \alpha \neq \beta\}$ como se muestra en la figura 27.
- **Redes temporales:** El formalismo de redes multicapa también se puede usar para describir la dinámica temporal de una red compleja. En este caso se tiene el conjunto de capas es $\mathcal{G} = \{G_t, t = 0, \dots, T\}$ donde $G_t = G(t)$ y los elementos de \mathcal{E} son $\mathcal{E}_{\alpha\beta}$ con $\mathcal{E}_{\alpha\beta} = \emptyset$ si $\beta \neq \alpha + 1$ y

$$\mathcal{E}_{\alpha\alpha+1} = \{(n_i^\alpha, n_i^{\alpha+1}) \mid i \in \mathcal{N}_{\alpha} \cap \mathcal{N}_{\alpha+1}, \}$$

- **Las redes interactuantes:** $\{G_1, \dots, G_M\}$ una familia de redes que interactúan entre sí se pueden modelar con una red multicapa con M capas $\{G_1, \dots, G_M\}$ y cuyos elementos $\mathcal{E}_{\alpha\beta}$ corresponde con el conjunto de interacciones entre la capa G_{α} y la G_{β} como se muestra en la figura 28

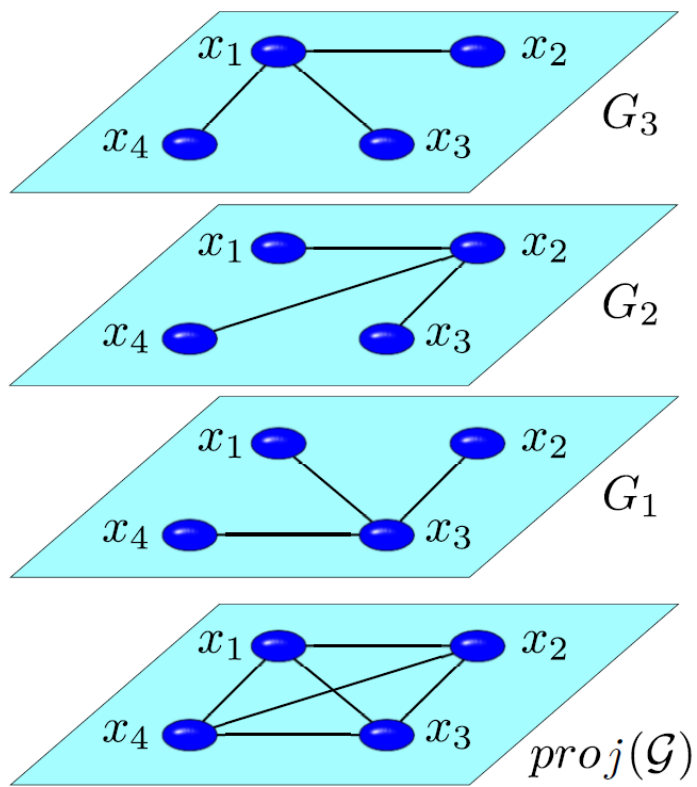


Figura 26: Red multicapa y su grafo proyección

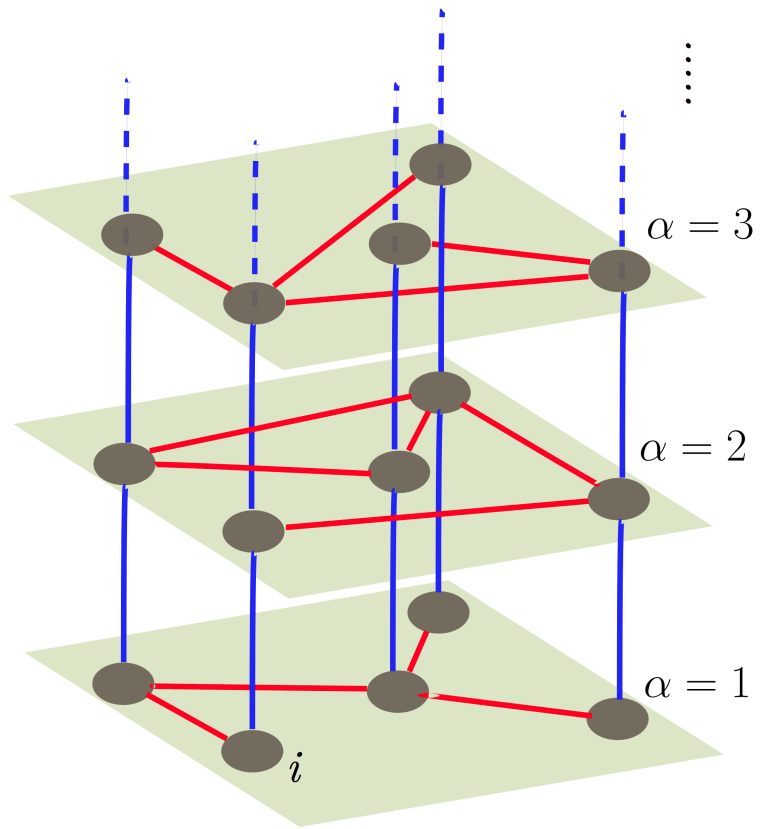


Figura 27: Red multiplex.

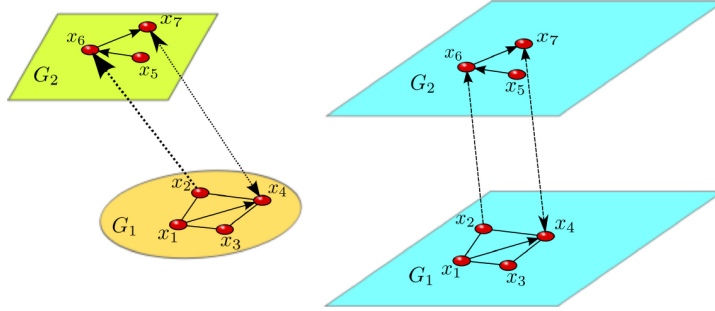


Figura 28: Redes interactuantes y su descripción en forma de multicapa

9.1. Caracterización de la estructura de las redes multicapa

Podemos extender definiciones que hemos realizado para caracterizar los grafos al caso de redes multicapas, y que sirven para determinar la importancia o rango de cada nodo en la red (medidas de centralidad). Así podemos definir:

- **Grado de un nodo en una red multicapa**, al vector

$$\mathbf{k}_i = (k_i^1, \dots, k_i^M)$$

donde k_i^α es el grado del nodo i en la capa α , y donde se tiene $k_i^\alpha = \sum_j A_{ij}^\alpha$. Para medir también la importancia de un nodo en la red multicapa se define el **solapamiento de los grados de un nodo** sobre las diferentes capas en la forma

$$O_i = \sum_{\alpha=1}^M k_i^\alpha$$

el **solapamiento total entre capas** como

$$O^{\alpha,\beta} = \sum_{i<j} A_{ij}^\alpha A_{ij}^\beta$$

el **solapamiento local entre capas** como

$$O_i^{\alpha,\beta} = \sum_j A_{ij}^\alpha A_{ij}^\beta$$

- **Coefficiente de agrupamiento** de un nodo i en una red multicapa \mathcal{M} :

$$\mathcal{C}_{\mathcal{M}}(i) = \frac{2 \sum_{\alpha=1}^M |\mathcal{L}_\alpha(i)|}{\sum_{\alpha=1}^M |\mathcal{N}_\alpha(i)| (|\mathcal{N}_\alpha(i)| - 1)}$$

donde $\mathcal{L}_\alpha(i) = \{(n_k^\alpha, n_j^\alpha) \in \mathcal{L}_\alpha; k, j \in \mathcal{N}_\alpha(i)\}$ y $\mathcal{N}_\alpha(i)$ es el conjunto de nodos que son vecinos del nodo i en el grafo $proj(\mathcal{M})$ de la red multicapa y que pertenecen a la capa α (es decir $\mathcal{N}_\alpha(i) = \mathcal{N}(i) \cap \mathcal{N}_\alpha$, donde $\mathcal{N}(i)$ es el conjunto de nodos vecinos del nodo i en el grafo $proj(\mathcal{M})$), y donde $|\mathcal{A}|$ denota el cardinal del conjunto \mathcal{A} . El coeficiente de agrupamiento de la red multicapa se puede definir como el promedio de $\mathcal{C}_\mathcal{M}(i)$.

- **Longitud de caminos más corta.** Una geodésica entre dos nodos u y v de una red multicapa es una de las distancias más cortas que unen u y v . La distancia $d(u, v)$ se define como la longitud de cualquier geodésica entre u y v .
- La máxima distancia entre dos nodos de \mathcal{M} define el **diámetro de la red multicapa** y se denota por $D(\mathcal{M})$.
- Se define la **longitud de caminos característica** como

$$L(\mathcal{M}) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{\substack{u, v \\ u \neq v}} d(u, v)$$

- Se define la **eficiencia de una red multicapa** como

$$E(\mathcal{M}) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{\substack{u, v \\ u \neq v}} \frac{1}{d(u, v)}$$

9.2. Correlaciones de grado en un multiplex

Dado el conjunto de nodos de un multiplex que tienen un grado k_i^α en cada capa del multiplex, entonces los grados del mismo nodo en cada capa pueden estar correlacionados. Por ejemplo, un nodo que es un hub en una red de colaboradores científicos con alta probabilidad será también un hub en una red de citas científicas. Por lo tanto el grado de la red de colaboraciones científicas está positivamente correlacionado con el grado de las citas científicas. Correlaciones negativas también existen cuando los hubs en una capa no lo son en las otras.

Introducimos la probabilidad de tener en una capa α un grado k^α condicionado a tener en una capa β un grado k^β en la forma

$$P(k^\alpha | k^\beta) = \frac{P(k^\alpha, k^\beta)}{\sum_{k^\alpha} P(k^\alpha, k^\beta)}$$

donde la matriz $P(k^\alpha, k^\beta)$ viene definida por

$$P(k^\alpha, k^\beta) = \frac{N(k^\alpha, k^\beta)}{N}$$

donde $N(k^\alpha, k^\beta)$ es el número de nodos que tienen grado k^α en la capa α y grado k^β en la capa β .

- **Grado promedio en la capa α** condicionado a tener un grado en la capa β

$$\bar{k}^\alpha(k^\beta) = \sum_{k^\alpha} k^\alpha P(k^\alpha | k^\beta)$$

- **Coficiente de Pearson:**

$$r_{\alpha\beta} = \frac{\langle k_i^\alpha k_i^\beta \rangle - \langle k_i^\alpha \rangle \langle k_i^\beta \rangle}{\sigma_\alpha \sigma_\beta}$$

donde $\sigma_\alpha = \sqrt{\langle k_i^\alpha k_i^\alpha \rangle - \langle k_i^\alpha \rangle^2}$.