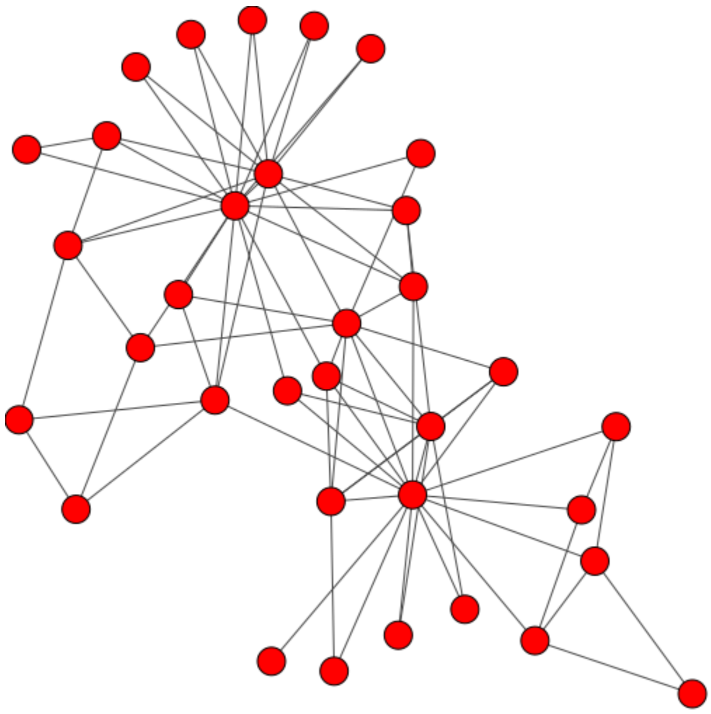
聚类技术 复杂网络社团检测

1. 实验内容

1. 导入 karate.gml 中的空手道网络数据；
2. 根据网络结构特征给出节点相似性度量指标；
3. 采用层次聚类过程对网络数据进行聚类；
4. 计算模块性指标 Q 值，当 Q 值最大时输出聚类结果；
5. 采用 Cytoscape 工具，可视化聚类结果。

2. 分析及设计

原始数据包含34个节点，78条边，整个网络是一个无向无权图。



首先将图转化为邻接矩阵A，A的第i行即为节点i的特征向量（34维仅包含0或1的向量）

另外需要定义两种距离（相似度）——节点之间的距离、簇之间的距离

节点之间的距离

考虑4种**节点**之间的距离

名称	公式	说明
欧氏距离	$d_{s,\ t}^2=(x_s-x_t)\cdot(x_s-x_t)'$	两点之间的2范数距离
余弦距离	$d_{s,\ t}=1-\frac{x_s x_t'}{\lVert x_s\rVert_2\cdot\lVert x_t\rVert_2}$	1减特征向量夹角余弦
Jaccard距离	$d_J=1-\frac{M_{11}}{M_{01}+M_{10}+M_{11}}$	不关心0-0匹配
海明距离	$d_H=1-\frac{M_{11}+M_{00}}{M_{00}+M_{01}+M_{10}+M_{11}}$	关心0-0匹配

簇之间的距离

考虑4种**簇**之间的距离

名称	公式	说明
单链或MIN	$d(u,v)=\min(\mathrm{dist}(u[i],v[j]))$	簇间点与点之间的最小距离
全链或MAX	$d(u,v)=\max(\mathrm{dist}(u[i],v[j]))$	簇间点与点之间的最大距离
组平均	$d(u,v)=\sum_{ij}\frac{d(u[i],v[j])}{(\lvert u\rvert*\lvert v\rvert)}$	簇间点与点之间的平均距离
加权	$d(u,v)=(\mathrm{dist}(s,v)+\mathrm{dist}(t,v))/2$	与组成u的子簇之间的距离加权和

重复执行：

1. 根据簇之间的距离合并最近的两个簇
2. 更新邻接矩阵，以反映新的簇与原来的簇之间的近邻性
3. 计算Q值并记录 $Q=\frac{1}{2m}\sum_{vw}\left[A_{vw}-\frac{k_v k_w}{2m}\right]\delta\left(c_v,c_w\right)$

> A. Clauset, M. E. J. Newman, & C. Moore, Finding community structure in very large networks, Phys. Rev. E 70, 066111 (2004).

直到仅剩一个簇

3. 详细实现

读取数据

```
def read_gml(path):
    # 读取gml文件并返回邻接矩阵
    g = Graph.Read_GML(path)
    adj = g.get_adjacency()
    n = adj.shape[0]
    a = np.array([adj[i] for i in range(n)])
    return a
```

执行聚类

根据选定的节点之间的距离与簇之间的距离，执行聚类算法，并保存树形图

```
def cluster(a, method, metric):
    z = linkage(a, method=method, metric=distance(metric))
    fig = plt.figure(figsize=(25, 10))
    dn = dendrogram(z)
    plt.title('{} {}'.format(metric, method))
    plt.savefig('clusterTree_{}_{}.svg'.format(metric, method))
    return z
```

计算Q值

根据公式

$$Q=\frac{1}{2m}\sum_{vw}\left[A_{vw}-\frac{k_v k_w}{2m}\right]\delta\left(c_v,c_w\right)$$

计算出每次合并后的模块度Q

```
def computeQ(a, z):
    n = a.shape[0]
    m = int(np.sum(a) / 2)
    k = [np.sum(a[i]) for i in range(n)]
    c = np.arange(n_v)

    def connect(a, b, it):
        # 合并后的更新，时间复杂度O(n),空间复杂度的O(n)
        buffer[it + n] = buffer[a].union(buffer[b])
        del buffer[a]
        del buffer[b]
        temp = list(buffer[it + n].copy())
        tar = np.min(temp)
        for i in range(len(temp)):
            c[temp[i]] = tar

    buffer = {k: {k} for k in range(n)}
    q = list(range(n_v))    # 合并i次的Q值

    for it, line in enumerate(z):
        connect(int(line[0]), int(line[1]), it)
        q[it + 1] = np.sum([[(a[v][w] - k[v]*k[w]/(2*m)) * (c[v]==c[w])
                          for v in range(n) ]for w in range(n)]) / (2*m)
    return q
```

总体框架

最终得到聚类结果，并绘制模块度Q随合并次数变化的曲线图

```
def main(path, method, metric):
    A = read_gml(path)
    Z = cluster(A, method, metric)
    Q = computeQ(A, Z)
    X = list(range(1, A.shape[0] + 1))

    plt.figure()
    plt.plot(X, Q)
    plt.title('{} {}'.format(metric, method))
    plt.xlabel('合并次数')
    plt.ylabel('modularity Q')
    plt.savefig('Q_{}_{}_{: 0.5f}_{: 0.5f}.svg'.format(metric, method, max(Q),
Q[-2]))
```

不同算法的效果

现有4种节点之间的距离和4种簇之间的距离，共16种算法，比较不同算法的效果

```
file_path = 'karate.gml'

for metric in ['euclidean', 'cosine', 'jaccard', 'hamming']:
    for method in ["single", "complete", "average", "weighted"]:
        main('karate.gml', method=method, metric=metric)
```

4. 实验结果

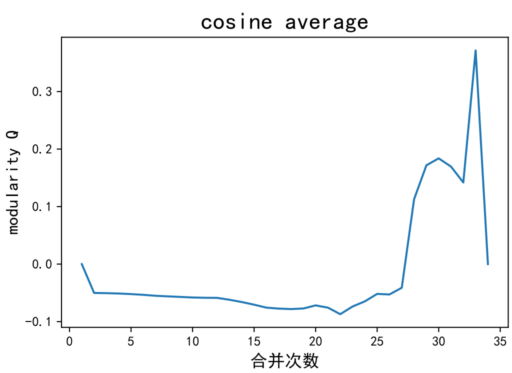
比较不同算法能够得到的最大的Q值

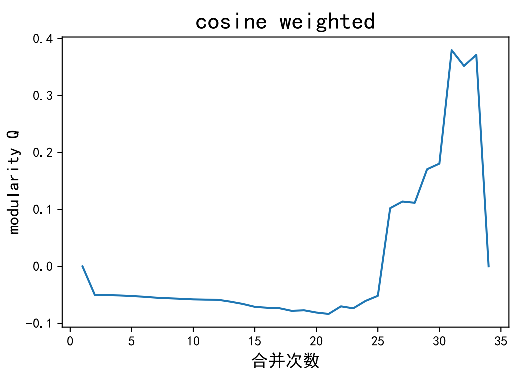
	单链或MIN	全链或MAX	组平均	加权
欧氏距离	0	0	0	0
余弦距离	0	**0.13667**	**0.37147**	**0.37960**
Jaccard距离	0	**0.13667**	**0.37147**	**0.37147**
海明距离	0	0	0	0

比较不同算法在聚为2种类别时的Q值

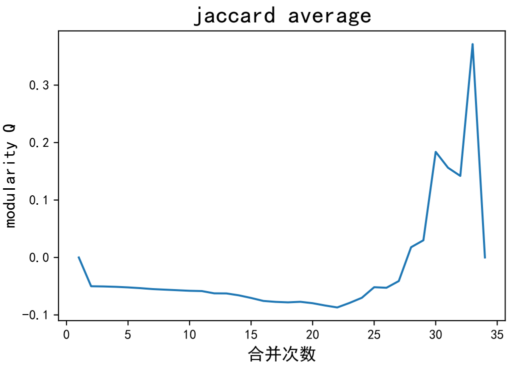
	单链或MIN	全链或MAX	组平均	加权
欧氏距离	-0.02104	-0.04347	-0.02104	-0.04347
余弦距离	-0.00033	-0.05851	**0.37147**	**0.37147**
Jaccard距离	-0.00033	-0.05851	**0.37147**	**0.37147**
海明距离	-0.02104	-0.04347	-0.02104	-0.04347

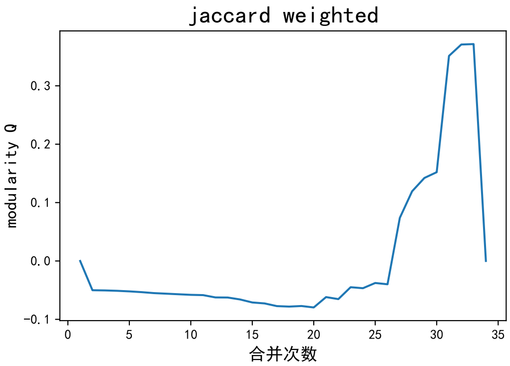
余弦距离-组平均/加权模块度Q随合并次数变化的曲线图



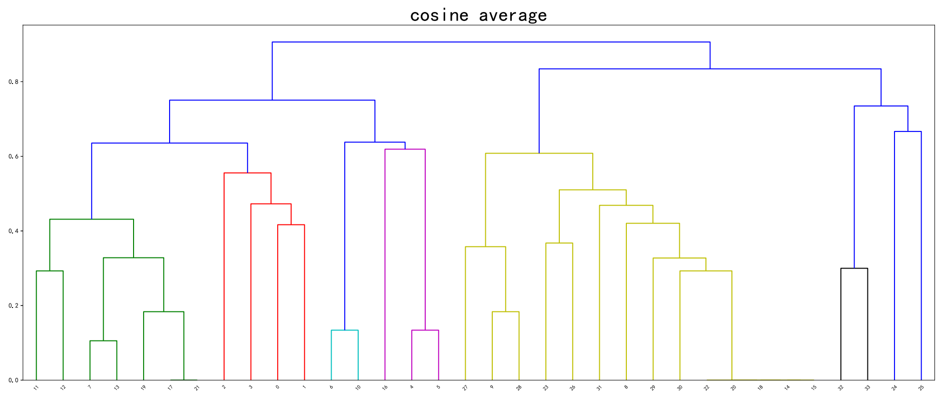


Jaccard距离-组平均/加权模块度Q随合并次数变化的曲线图

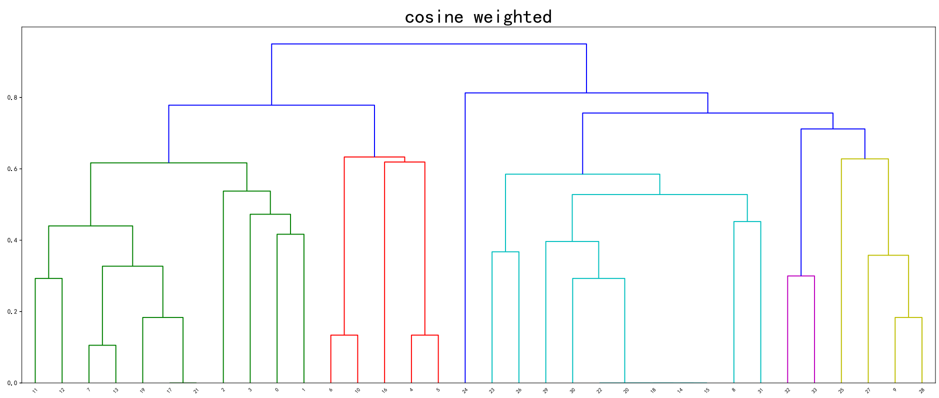




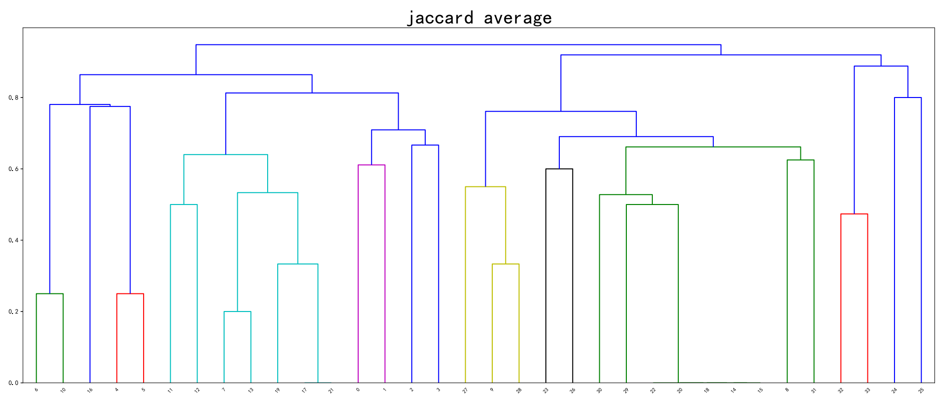
余弦距离-组平均聚类树形图



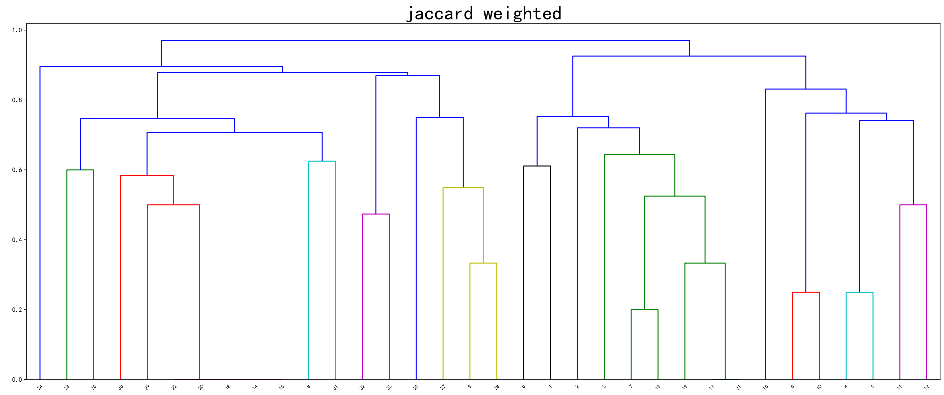
余弦距离-权重聚类树形图



Jaccard距离-组平均聚类树形图

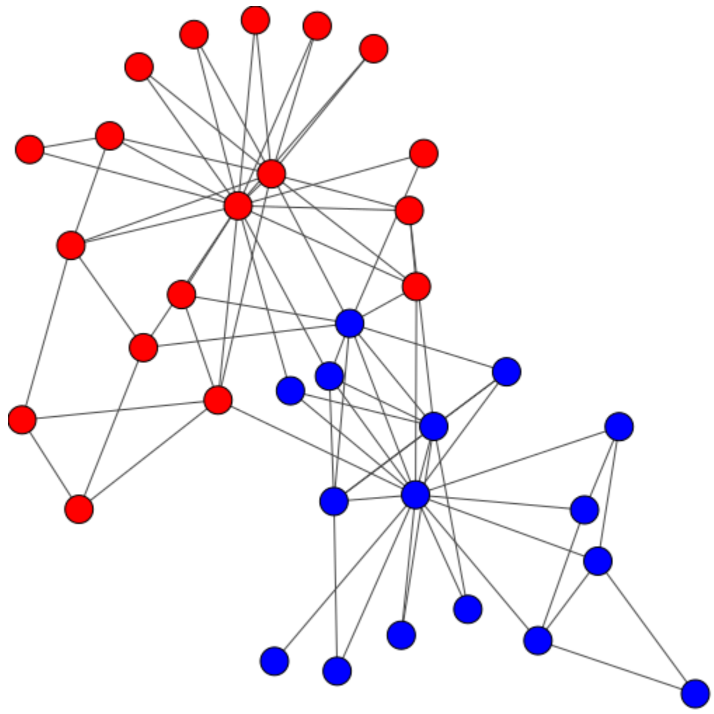


Jaccard距离-权重聚类树形图



（其他模块度Q随合并次数变化的曲线图以及聚类树形图见【链接】）

Jaccard距离-组平均2-聚类结果（$Q = 0.37147$）



5. 心得体会

1. 比较了4种**节点**之间的距离计算方式，对于本题数据的“特征”中的数据仅包含0和1的值，所以考虑使用Jaccard距离或者海明距离较为恰当。然而实际上，图数据往往是稀疏的海明距离不会忽略大量的0-0匹配，导致效果变差；Jaccard距离很好地避免了这个弊端；
2. 欧氏距离似乎不适合用于本题，范数度量方式往往用于连续型数据；
3. 余弦距离可以一定程度上反应数据在高维空间上的上的相似程度，实验中也取得了不错的效果，但是我个人认为在语义上不如Jaccard距离容易解释，尽管在分子上余弦距离和Jaccard距离得到的结果是一样的；
4. 比较了4种**簇**之间的距离计算方式，单链或全链的效果较差，可见在以图为原型的数据的聚类问题中，单点代表（最大或最小距离）的方式不太适用，组平均和加权都考虑了簇中其他点对簇见距离的影响。