華東師範大學
EAST CHINA NORMAL UNIVERSITY

数据科学与工程算法基础

Algorithm Foundations of Data Science and Engineering

第十三章　社团发现

$$(1+x)^n = 1 + \frac{nx}{1!} + \frac{n(n-1)x^2}{2!} + \cdots$$

课程提纲

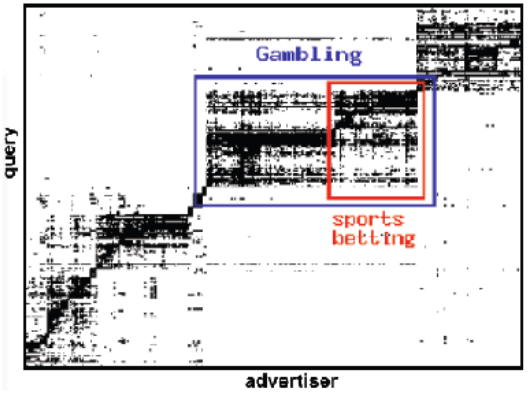
Content

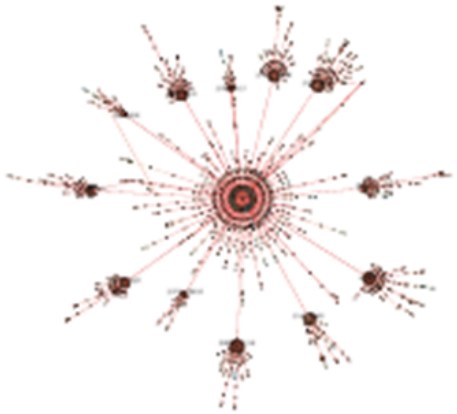
课程提纲

Content

网络与社区结构

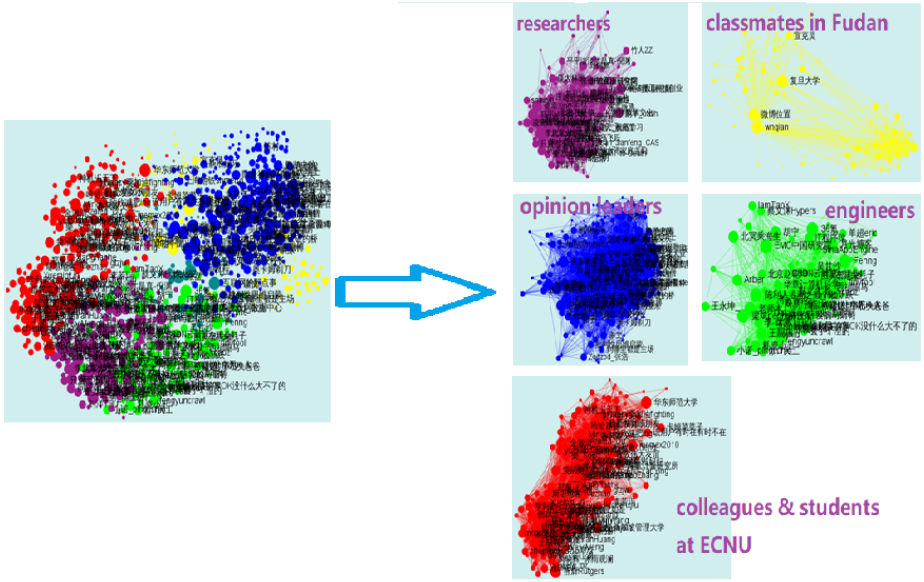
- 社区是一个子图
- 如果子图内部连接比较紧密，子图与子图之间连接比较稀疏，则表明图具有社区结构

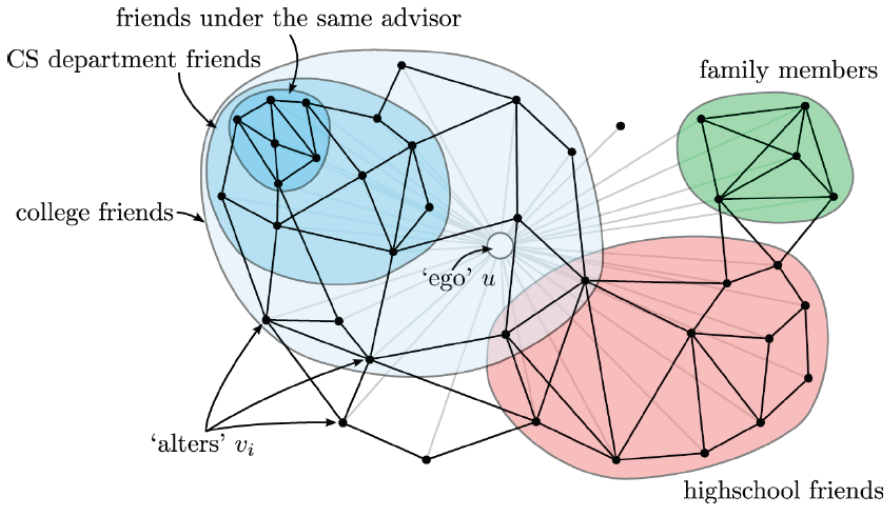




- 社区发现有助于
  - 图的可视化
  - 异常检测（水军）
  - 用户画像（物以类聚、人以群分）
- 社区发现是一类广义的聚类方法

社区示例



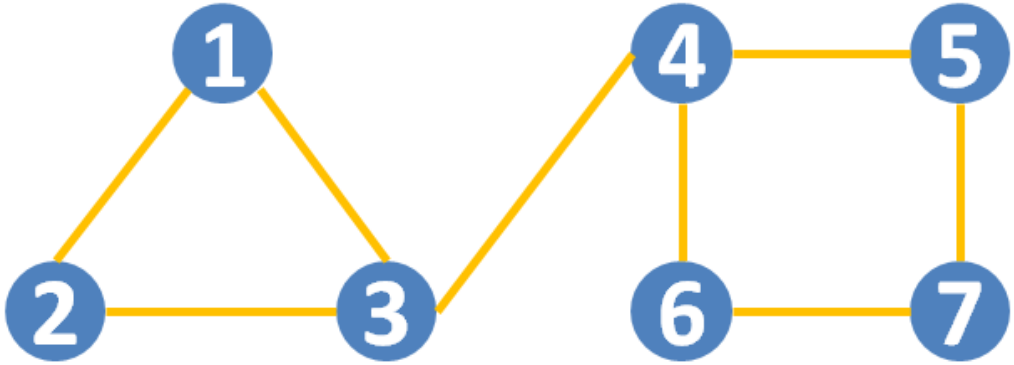


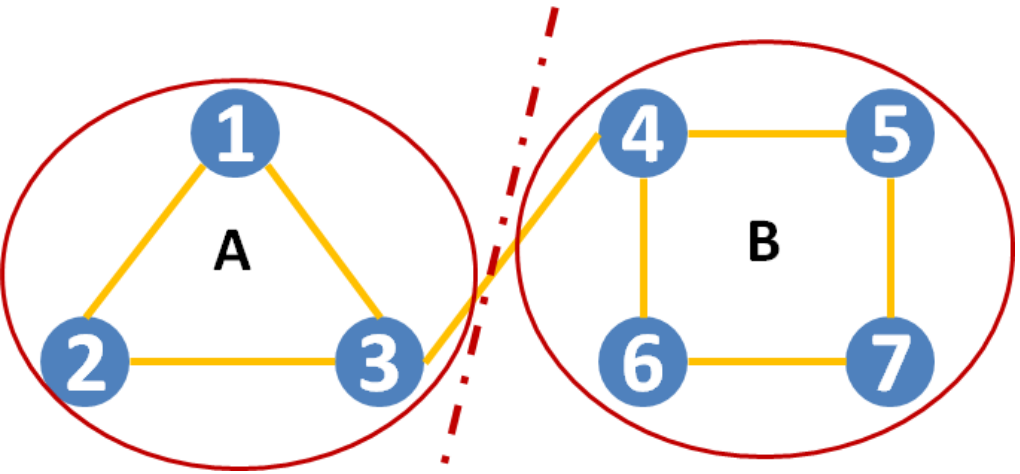
- 在信任网络中，社区类似于“朋友圈”
  - 可视化
  - 用户行为理解
- 社区分类
  - 是否有重叠
    - 无重叠社区
    - 有重叠社区
  - 是否涉及所有顶点
    - 全局社区
    - 局部社区
- 仅探讨无重叠的全局社区结构

问题定义

- 社区结构表明网络可以被划分成子图，其内部连接比较紧密，相互间连接比较稀疏
- 然而，实际应用中的图通常都很大
  - 一个拥有 200M 顶点和 2B 边的图，需要 16 GB 内存
  - 由于图太大，运行在图上的算法最多只能是线性复杂度
- 社区发现旨在将子图划分成不相交的子图
  - 基于顶点相似度的聚类
  - 隐空间模型
  - 谱聚类方法
  - 最大化模块度

社区划分





- 给定无向图 $G = (V, E)$
  - 将其划分为两个不相交的部分 A 和 $B = V \backslash A$
  - 除此以外，还有很多种划分方法
- 如何划分才能算是一个好的社区?

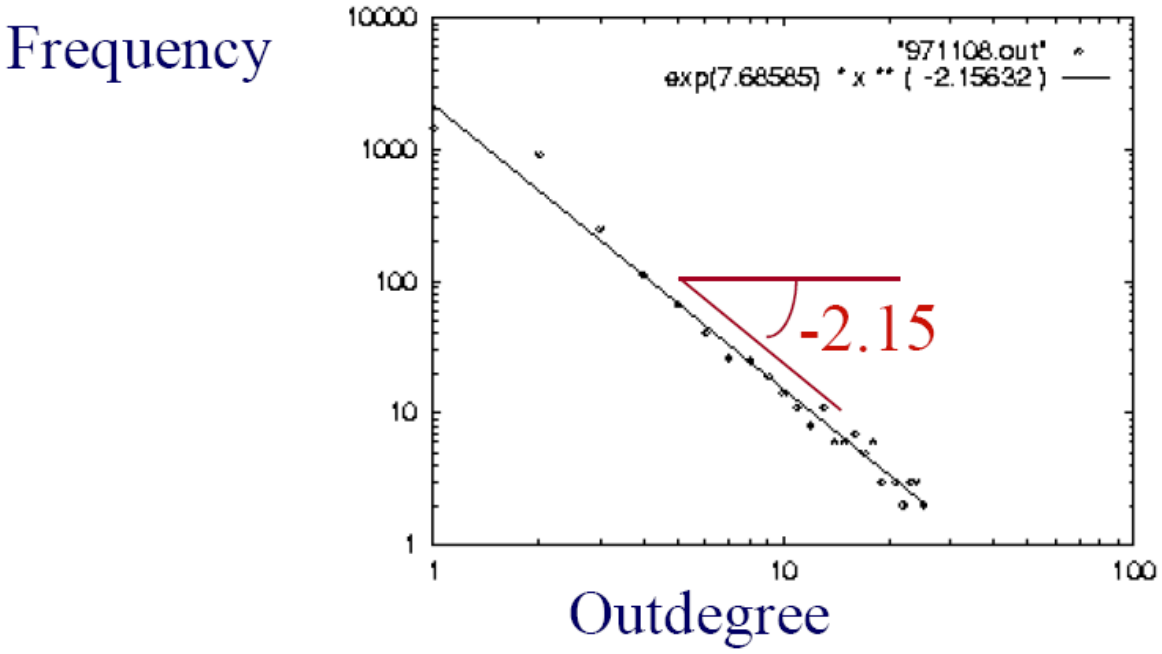
社区划分标准

- 社区划分标准
  - 最大化社区内部连接数量
  - 最小化社区之间的连接数量
- 割是表达社区好坏的一个标准，定义为$Cut(A) = \sum_{i \in A, j \notin A} w_{ij}$
- 好的社区划分旨在最小割
  - 解决最小割问题的算法复杂度为$O(|V| \cdot |E|^2)$
  - 对于大图行不通

课程提纲

Content

图模型 — Power Law



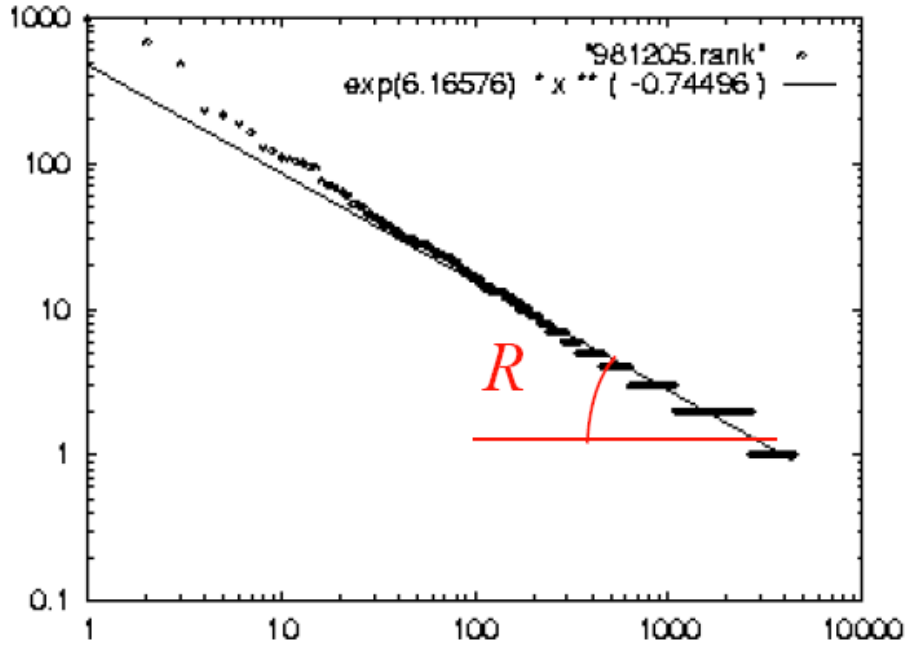
- Internet 拓扑结构图
  - Log–log scale
  - 分布在斜率为 –2.15 的直线上
  - $freq \propto deg^{-2.15}$

Power Law

- 又称为“马太效应”、“Pareto规则”、“富人越富”、或者“二八定律”
  - 80% 意大利的土地被 20% 的人所拥有
  - 世界上最富有的 20% 的人拥有 82.70% 的财富
  - 圣经：词频排序 VS. 频率
  - 网页：点击次数 VS. 网页数量
  - 文件：文件数量 VS. 文件大小
  - 商业领域：
    - 20% 的客户贡献企业 80% 的利润
    - 80% 的投诉来自 20% 的客户
    - 80% 的公司利润来自员工 20% 的时间所创造的
    - 80% 的销售利润来自 20% 的员工

Power Law (II)

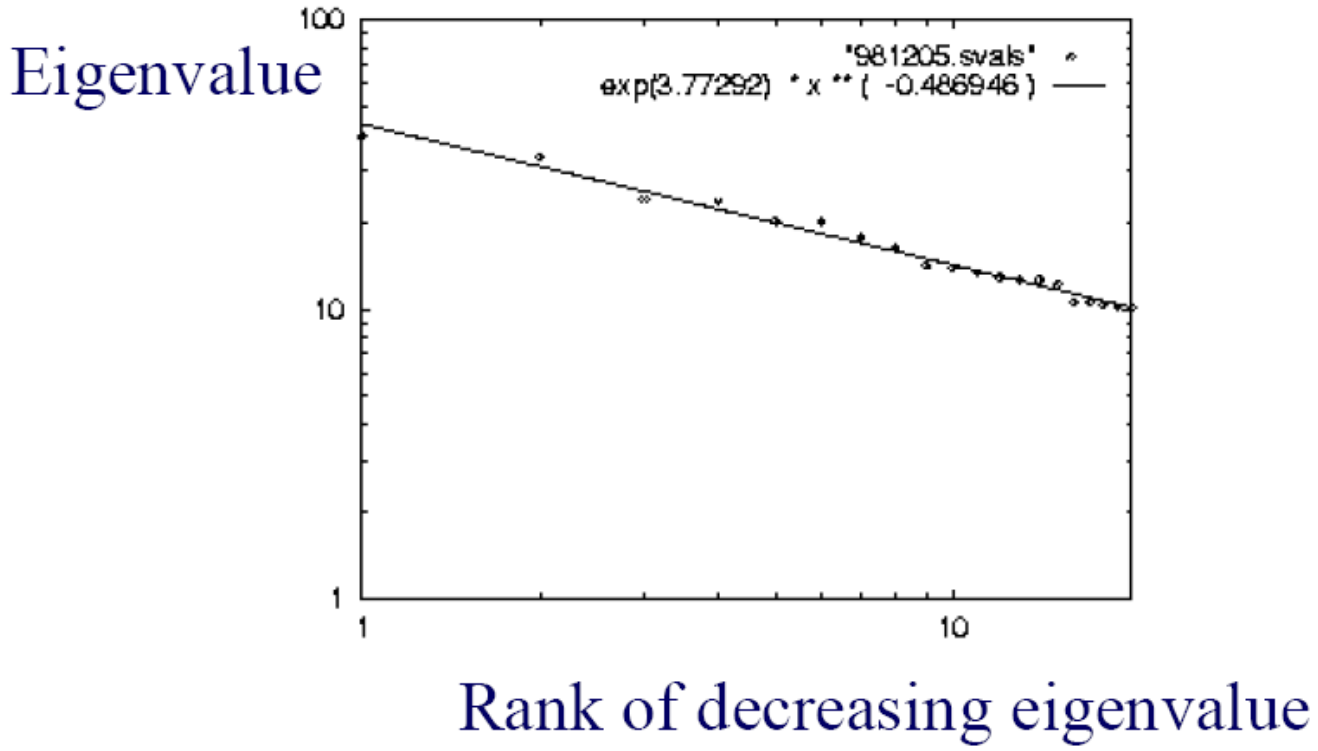
outdegree



Rank: nodes in decreasing outdegree order

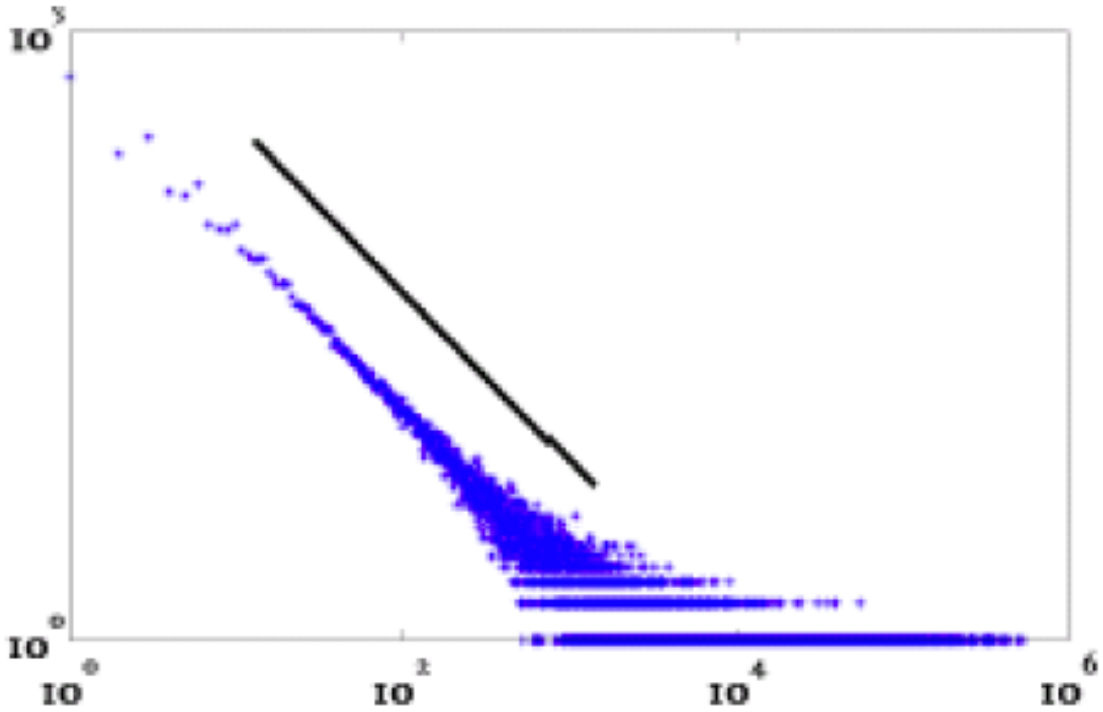
- 图中顶点出度的排序
  - 顶点按照出度升序排列
  - $deg \propto rank^{-2.15}$

Power Law (III)



- 特征值排序
  - 邻接矩阵特征值按升序排列
  - $eigen\,. \propto rank^{-2.15}$

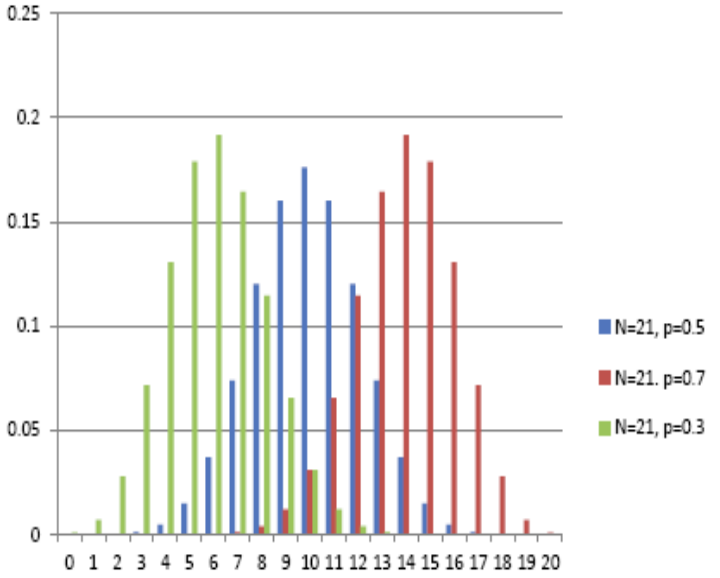
Power Law (IV)



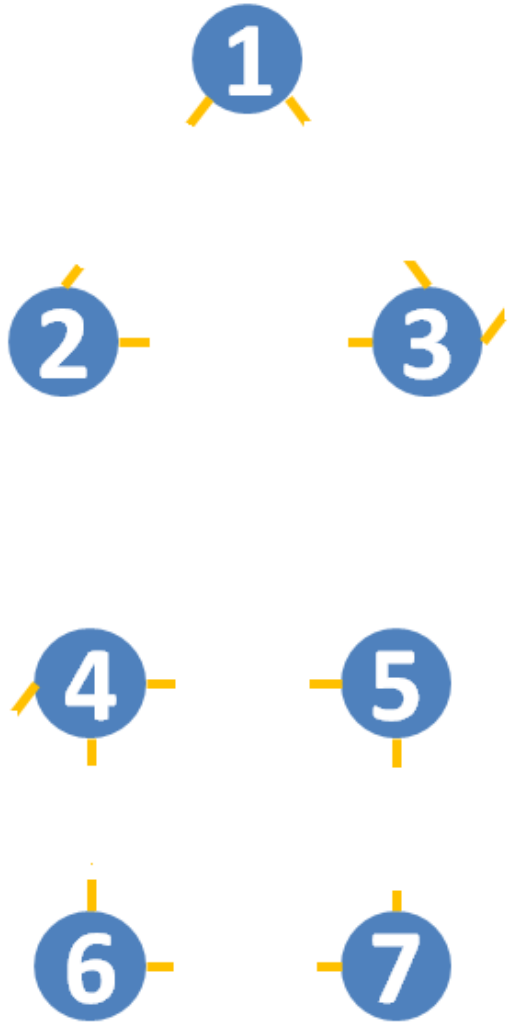
- 顶点涉及Triangle的数量
  - Y轴：顶点涉及Triangle的数量，X轴：顶点数量
  - 在 log–log 尺度下，也分布在一条直线上

Erdos–Renyi 模型

- Erdos–Renyi （ER 模型）是一个随机图模型，用于产生无向随机图
  - 参数：N（顶点数量）和 p（生成一条无向边的概率）
  - 对每组顶点配对，ER 模型以概率 p 形成一条无向边
  - 因此，该随机图中边的总数为 $|E| = \frac{n(n-1)}{2} \cdot p$
  - 顶点度的分布
    - $P(deg = k) = \binom{N-1}{k} \cdot p^k \cdot (1-p)^{N-1-k}$
    - 服从二项分布
    - 期望为 $(N-1) \cdot p$
    - 方差为 $(N-1) \cdot p \cdot (1-p)$
    - 不是一个长尾分布



NULL 模型



- 顶点 v_i 和 v_j 间期望边的数量
  - 假设边的起点为 v_i
  - 定义随机变量 $X_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{目标顶点为 } v_j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$
  - 因此，$P[X_{ij} = 1] = P_{ij}$ 为一个伯努利分布
- 进一步，我们有
  - $\sum_{i,j} E(X_{ij}) = \sum_{i,j} P_{ij} = 2m$
  - $\sum_{j} E(X_{ij}) = \sum_{j} P_{ij} = k_i$

NULL 模型（续）

- 因为 P_{ij} 和 k_i, k_j 有关，令 $P_{ij} = f(k_i)f(k_j)$
- 由于 $P_{ij} = P_{ji}$，因此 $\sum_j P_{ij} = \sum_j f(k_i)f(k_j) = f(k_i)\sum_j f(k_j) = k_i$
- 因为 $\sum_j f(k_j)$ 与 顶点 v_i 无关，所以 $f(k_i) = ck_i$
- 进一步的 $\sum_j f(k_i)f(k_j) = c^2 \sum_{i,j} k_i k_j = 2m$
- 因此，$P_{ij} = c^2 k_i k_j = \frac{k_i k_j}{2m}$

NULL 模型的直观意义

- 令 X_i 为独立同分布的 Bernoulli($\frac{k_i}{2m}$)，其中 $X_i = 1$ 意味着起点为 v_i，否则取值为 0
- 类似的，令 Y_i 为独立同分布的 Bernoulli($\frac{k_i}{2m}$)，其中 $Y_i = 1$ 意味着终点为 v_i，否则取值为 0
- 对于边 $e_{ij} \in E$
  - 意味着起点和终点分别为 v_i 和 v_j
  - 令 $Z_{ij} = \begin{cases} 1, & e_{ij} \in E \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$

NULL 模型的直观意义（续）

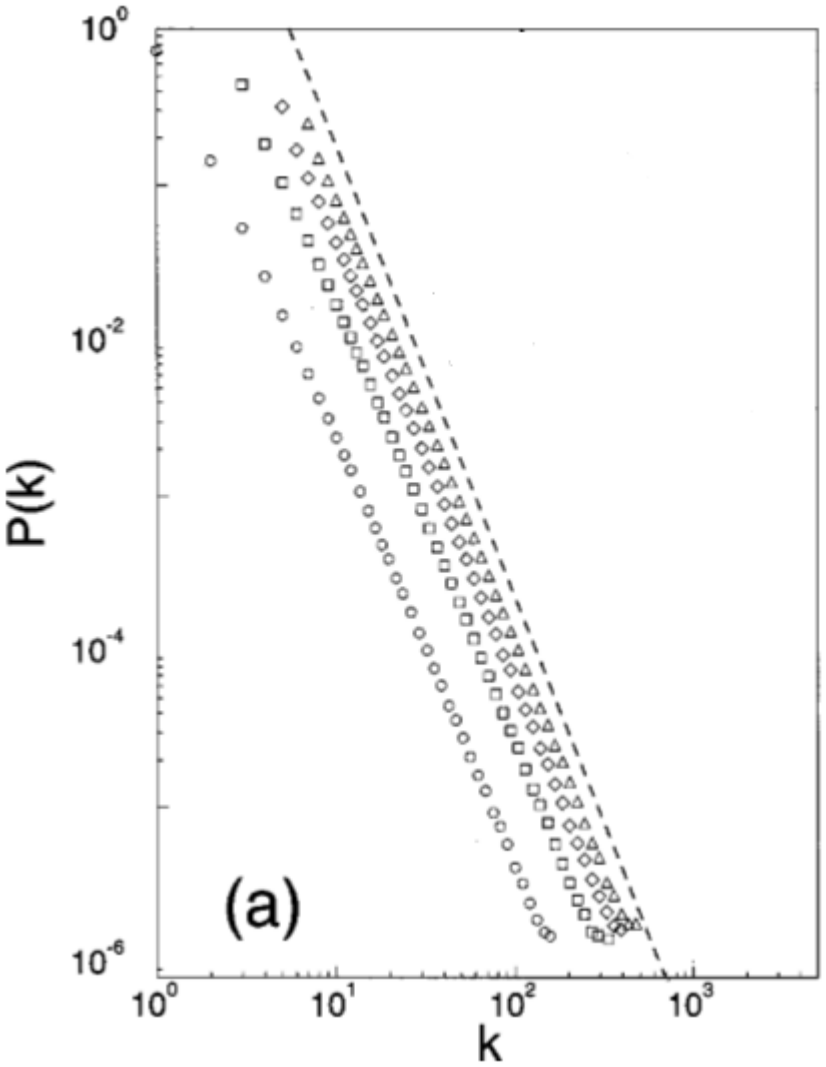
- 给定一个网络，有 $2m$ 条有向边
  - 每次往图中插入一条边是一个伯努利试验
  - 因此，$\sum_{i,j} Z_{ij} \sim \text{Binomial}(2m, p)$
- 因为 $p = P(Z_{ij} = 1) = \frac{k_i}{2m} \cdot \frac{k_j}{2m}$
- 因此，顶点 v_i 和 v_j 之间边的数量的期望为

$$E(\sum_{i,j} Z_{ij}) = 2mP(Z_{ij} = 1) = \frac{k_i k_j}{2m}$$

Scale-Free 网络

- Preferential Attachment 模型
  - 连接比较多的顶点更可能获得新的连接（富人越富）
  - 价格模型
  - Barabasi-Albert 模型
- 价格模型
  - 以引用网络为例
  - 每篇新论文产生 m 个引用
  - 新论文引用已有论文的概率和它的度成正比
  - 产生的网络满足参数 $\alpha = 2 + \frac{1}{m}$ 的长尾分布

Barabasi–Albert 模型



- Barabasi–Albert 模型
  - 初始化拥有 m_0 个顶点的网络
  - 每个顶点的度不小于 1
  - 对每一个新顶点，连接到 m 个存在顶点中的顶点 i 的概率为 p_i，其中
    $$p_i = \frac{k_i}{\sum_j k_j}$$
  - 产生具有一个连通分量的 Scale–Free 网络，其中度的分布参数为 $\alpha = 3$

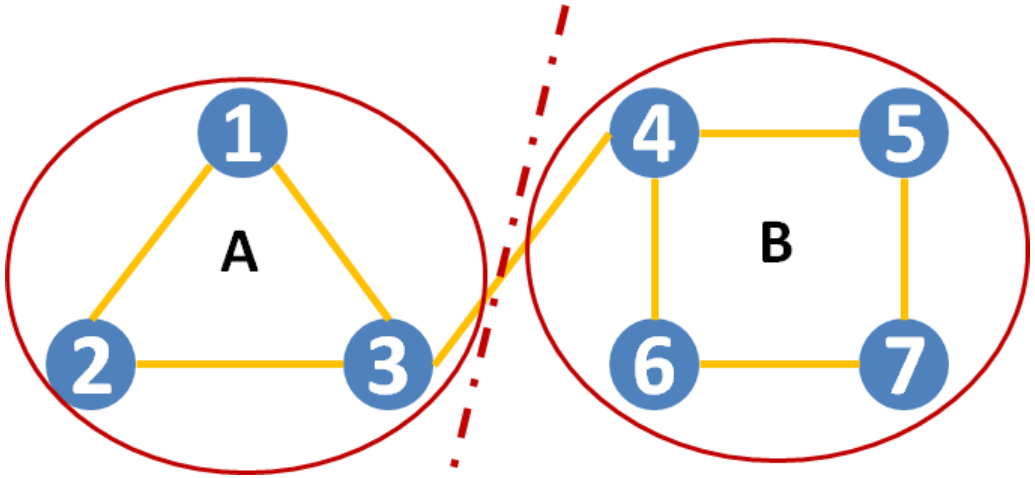
Modularity 定义

- Modularity（模块度）是网络社区结构的一个度量指标
- 给定无向图 $G = (V, E)$，A 为邻接矩阵，其中

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & (v_i, v_j) \in E \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

- Modularity 定义为 $Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j)$，其中 m 和 C_i 表示图中顶点数量和顶点 v_i 所在的社区，k_i 为顶点 v_i 的度，且 $\delta(C_i, C_j) = \begin{cases} 1, & \text{if } C_i = C_j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$

Modularity 示例

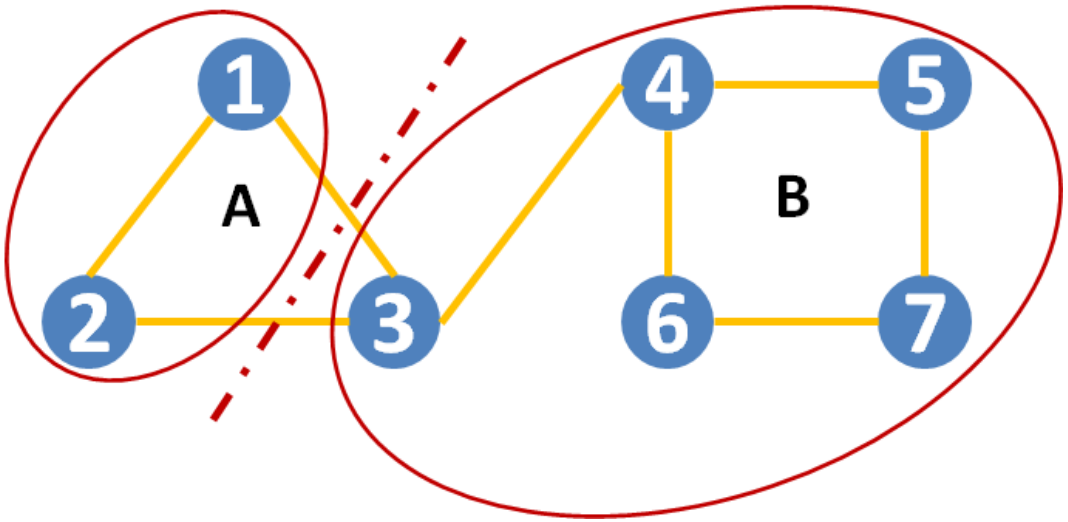


$$m = 8, k_1 = 2, k_2 = 2, k_3 = 3$$

$$k_4 = 3, k_5 = 2, k_6 = 2, k_7 = 2$$

$$Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j) = \frac{47}{128}$$

Modularity 示例（续）



$$m = 8, k_1 = 2, k_2 = 2, k_3 = 3$$

$$k_4 = 3, k_5 = 2, k_6 = 2, k_7 = 2$$

$$Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j) = \frac{1}{8}$$

Modularity 的直观含义

- Modularity 度量了社区结构的好坏
- 给定网络的一个划分 C，对每个社区 $c \in C$，

$$Q \propto \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j) = \left(\sum_{i,j} A_{ij} - \sum_{i,j} \frac{k_i k_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j)$$

$$= \sum_{i,j} A_{ij} \delta(C_i, C_j) - \sum_{i,j} \frac{k_i k_j}{2m} \delta(C_i, C_j)$$

$$= \sum_{c \in C} [\text{(num. edges in } c\text{)} - \text{(expected num. edges in } c\text{)}]$$

- 给定具有 n 个顶点和 m 条边的真实网络 G，依据 NULL 模型构建网络 G'
  - G' 与 G 的顶点具有相同度的分布
  - 网络 G' 是一个多图

Modularity：社区 VS. NULL 模型

$$Q \propto \sum_{c \in C} [(\text{num. edges in } c) - (\text{expected num. edges in } c)]$$

- Modularity 计算了真实网络结构与基于 NULL 模型的网络结构间的偏差大小
  - NULL 模型是随机连接两个顶点的，没有特别的网络结构
  - 对于给定划分，Modularity 比较了真实网络与随机网络中的社区结构
  - Modularity 的值越大意味着社区结构越强
  - 因此，modularity 可用于评价社区结构的好坏
  - 也可以用于发现社区结构

计算 Modularity

$$Q = \frac{1}{2m} \sum_{c \in C} \sum_{i \in c} \sum_{j \in C} (A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m})$$

- Modularity 的值属于 $[-1,1]$
- 其值为正，表明网络划分具有社区结构
- 其值大于 0.3，表明网络划分具有较好的社区结构
- 给定一个划分，利用 modularity 来衡量该划分的好坏

权重图的 Modularity

- 给定一个无向权重图 $G = (V, E)$，其权重矩阵为

$$W_{ij} = \begin{cases} w_{ij}, & A_{ij} = 1 \\ 0, & A_{ij} = 0 \end{cases}$$

- Modularity 定义为 $Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(W_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j)$

- 注意 m, k_i, k_j 的含义变化

有向图的 Modularity

- Modularity（模块度）也可以定义有向图上的社区结构
- 给定有向图 $G = (V, E)$，A 为邻接矩阵
- Modularity 定义为 $Q = \frac{1}{m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{k_i^{out} k_j^{in}}{m} \right) \delta(C_i, C_j)$

课程提纲

Content

Modularity 矩阵

- 给定某网络包含 n 个顶点，假定该网络被划分成 2 个社区，令 $s_i = \begin{cases} 1, & \text{if } v_i \in c_1 \\ -1, & \text{otherwise} \end{cases}$
- 该划分对应的 modularity 可以重写为

$$
\begin{aligned}
Q &= \frac{1}{4m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m} \right) (s_i s_j + 1) \\
&= \frac{1}{4m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m} \right) s_i s_j \\
&= \frac{1}{4m} \mathbf{s}^\top \mathbf{B} \mathbf{s}
\end{aligned}
$$

其中 $B_{ij} = A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m}$ 被称为 Modularity 矩阵

谱方法

- 注意到 Modularity 矩阵行和、列和均为 0
  - 意味着 $(1,1,\ldots,1)$ 为特征值 0 对应的特征向量
  - 将向量 $\mathbf{s}$ 表示成 Modularity 矩阵 $\mathbf{B}$ 的正交特征向量 $\mathbf{u}_i$ 的线性组合，即 $\mathbf{s} = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{a}_i \mathbf{u}_i$，其中 $\mathbf{a}_i = \mathbf{u}_i^{\top} \cdot \mathbf{s}$
  - 因此，$Q = \frac{1}{4m} \sum_i \mathbf{a}_i \mathbf{u}_i^{\top} \mathbf{B} \sum_j \mathbf{a}_j \mathbf{u}_j = \frac{1}{4m} \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{u}_i^{\top} \cdot \mathbf{s})^2 \beta_i$，其中 β_i 为矩阵 $\mathbf{B}$ 的特征值，其对应的特征向量为 $\mathbf{u}_i$
  - 不妨假设特征值按照降序排列，即 $\beta_1 \geq \beta_2 \geq \ldots \geq \beta_n$

谱方法（续）

- 社区发现旨在找到一个划分使得 Modularity 值最大
  - 相当于找到合适的向量 $\mathbf{s}$ 使得 $\frac{1}{4m}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{u}_i^{\mathsf{T}}\cdot\mathbf{s})^2\beta_i$ 的值最大
  - 仅考虑最大特征值 β_1
  - 如果向量 $\mathbf{s}$ 没有任何限制则 $\mathbf{s}=c\mathbf{u}_1$，其中 c 为常数
  - 不幸的是，$\mathbf{s}$ 的每个分量取值为 ± 1
  - 为了使得 modularity 取得最大值，定义 $s_i=\begin{cases}1, & \text{if } \mathbf{u}_{1i}>0\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases}$
  - 换句话说，向量 $\mathbf{u}_1$ 的所有正分量对应的顶点被划分到同一个社区，其他顶点在另外一个社区

多社区划分方法

- 按照谱聚类方法，一个网络仅被划分成两个社区
- 如何利用该方法划分更多社区进一步增加 Modularity 的值呢?
  - 重复运用该方法不断将大的社区划分成小社区
  - 这种方法可行吗?
  - 存在以下问题
    - 最终的 Modularity 可能会改变，因为一些边在后续划分中被删除了
    - 后续每次 Modularity 最大化的划分不一定实现 Modularity 的最大化
  - 最好的方法应该计算 Modularity 的增量

Modularity 增量计算方法

- 最大化 $\Delta Q = \frac{1}{4m}\mathbf{s}^{\top}\mathbf{B}^{(g)}\mathbf{s}$，其中 $B_{ij}^{(g)} = B_{ij} - \delta_{ij}\sum_{k\in g} B_{ik}$
- 问题转化为一个新的谱聚类方法
- 重复以上过程，知道 Modularity 不再增加，算法停止

课程提纲

Content

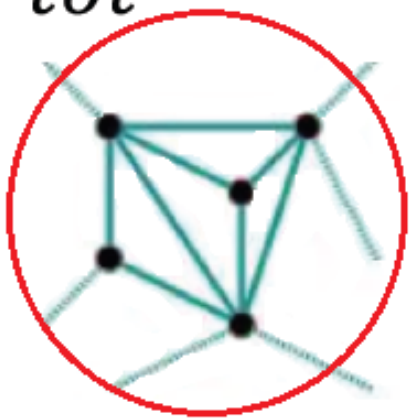
Louvain 方法

- 一种基于贪心策略的社区发现算法
  - 支持无向图、有向图和权重图
  - 产生层次状的社区结构
  - 社区数量不是一个超参数
  - 可以有效发现大图中的社区结构
    - 运行时间仅为 $O(|E|)$
    - Modularity 逐渐增加，而且收敛速度快
- 基于贪心策略，Louvain 算法逐渐增加 modularity
  - 每轮迭代由两个阶段组成
  - 不停迭代，直到 modularity 不再增加为止
  - 提供自底向上的社区结构

改写 Modularity

Σ_{in}:

Σ_{tot}:

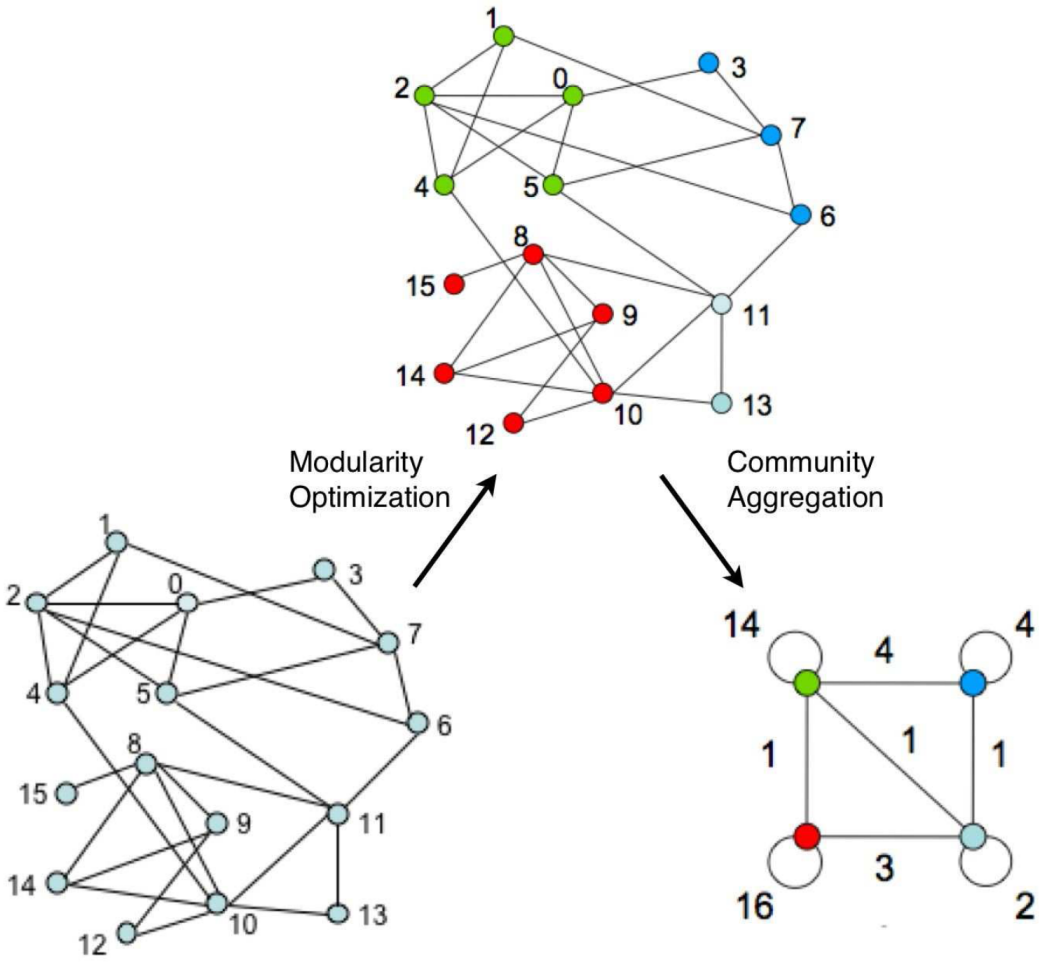


$$Q = \frac{1}{2m}\sum_{i,j}\left(A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2m}\right)\delta(C_i, C_j)$$

$$= \sum_{c \in C}\left[\frac{\Sigma_{in}^{c}}{2m} - \left(\frac{\Sigma_{tot}^{c}}{2m}\right)^2\right]$$

- Σ_{in}^{c} 为社区 c 内部边上权重之和
- Σ_{tot}^{c} 为社区 c 内部顶点连接的边上权重之和

Louvain 算法

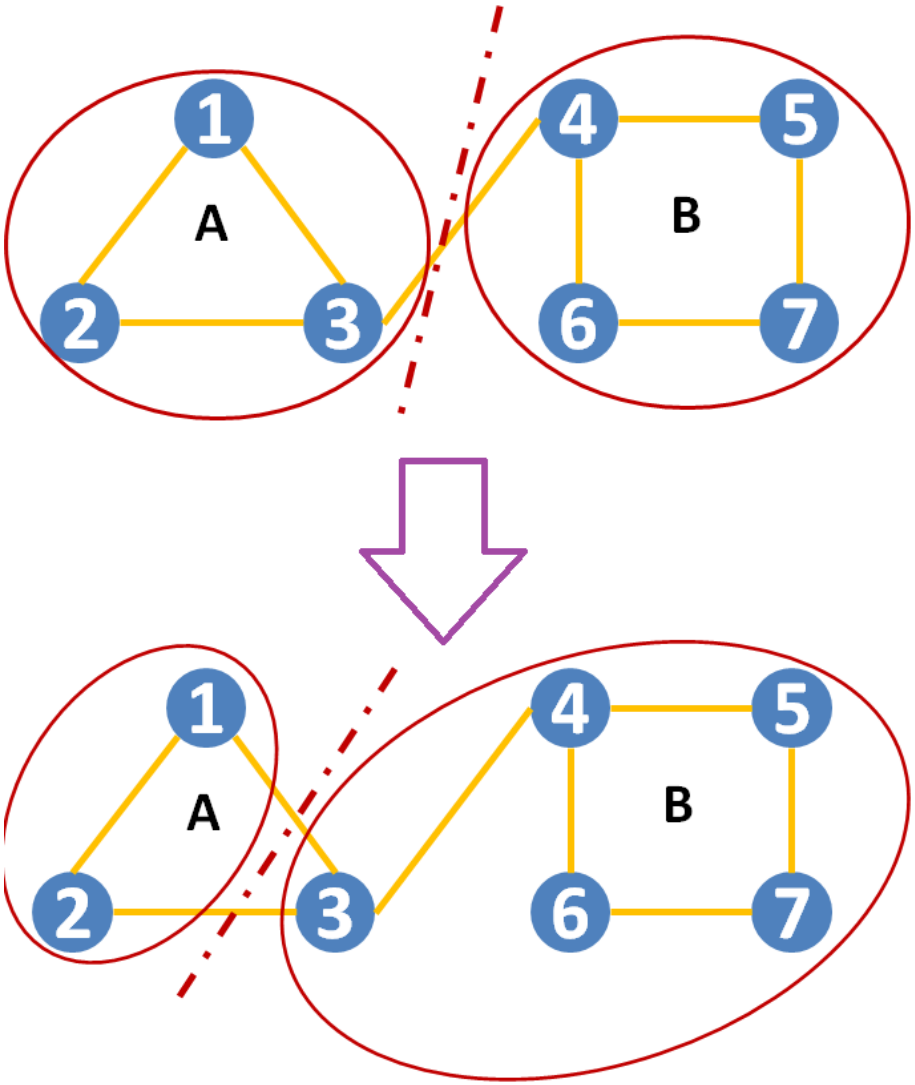


- 每轮迭代
  - **第一阶段：**通过局部调整社区实现 modularity 最大化（仅移动一个顶点）
  - **第二阶段：**一个社区看作一个超级顶点，构建一个新的权重图

Louvain 算法第一阶段

- 初始状态
  - 每个顶点属于不同的社区
  - 自底向上的方式构成层次状社区结构
- 第一阶段的局部调整，对每个顶点 v_i，计算
  - 当顶点 v_i 移动到它邻居 v_j 所在社区时，Modularity 增加量 ΔQ
  - 将顶点 v_i 移动到使得 ΔQ 增加最大的那个社区
  - 循环执行，直到移动任何顶点都不会增加 Modularity 为止
- 第一阶段实现了 modularity 的局部最大化
- 虽然顶点访问顺序会影响到算法结果，但是已有研究表明：顶点访问顺序不会对 Modularity 产生大的影响

Modularity 增加量 ΔQ



- Modularity 的增加量体现在两部分
  - 收益：$\Delta Q(v_i \to C)$ 表示当顶点 v_i 移进社区 C 中时 Modularity 的增加量
  - 损失：$\Delta Q(D \to v_i)$ 表示当顶点 v_i 从社区 D 中移出 Modularity 的减少量
- 是否移动顶点 v_i 需要综合考虑这两部分

计算 $\Delta Q(v_i \to C)$

$$\Delta Q(v_i \to C) = Q_{C+v_i} - (Q_C + Q_{v_i})$$

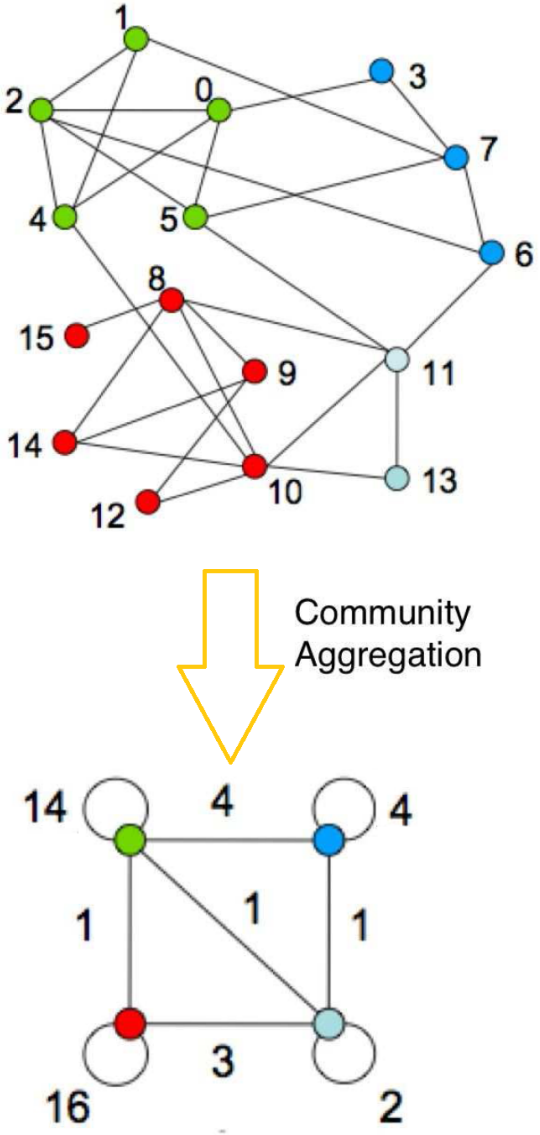
$$= \frac{k_{i,in}^C}{2m} - \frac{\Sigma_{tot}^C k_i}{2m^2}$$

- Σ_{in}^C 为社区 C 内部边上权重之和
- Σ_{tot}^c 为社区 C 内部顶点连接的边上权重之和
- $k_{i,in}^C$ 为顶点 v_i 与社区 C 之间的边的权重和
- k_i 为顶点 v_i 的度或者边的权重和

计算 $\Delta Q(D \to v_i)$

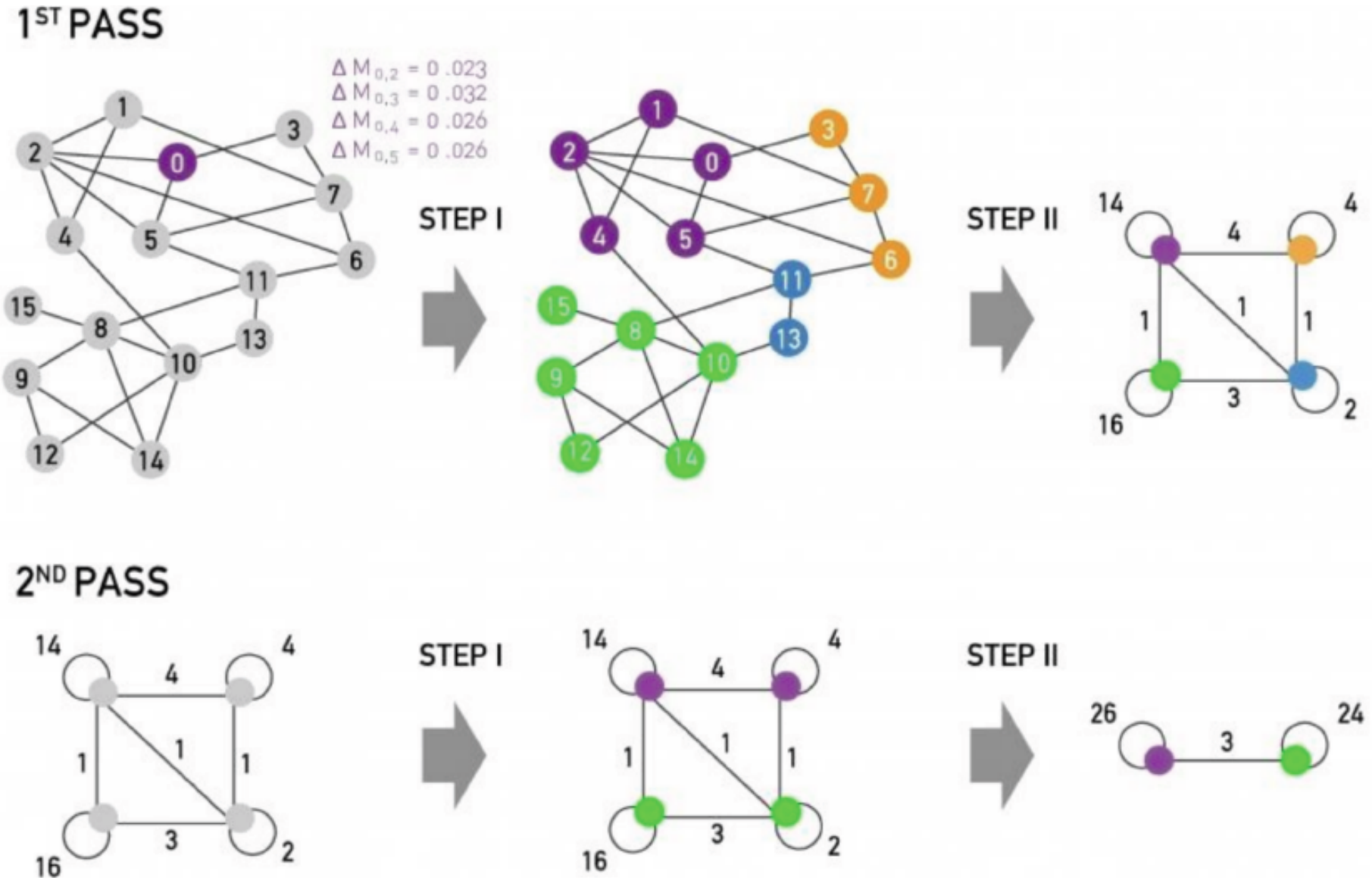
- 令 D' 表示顶点 v_i 从社区 D 中移出后的社区结构
- 因此，$\Delta Q(D \to v_i) = -\Delta Q(v_i \to D')$
- 进一步的，$\Delta Q(D \to v_i) = \dfrac{\Sigma_{tot}^{D'} k_i}{2m^2} - \dfrac{k_{i,in}^{D'}}{2m}$
- 最终 $\Delta Q(v_i, C, D) = \Delta Q(v_i \to C) + \Delta Q(D \to v_i)$
- 顶点 v_i 将被移到使得 ΔQ 增加最大的那个社区

Louvain 算法第二阶段

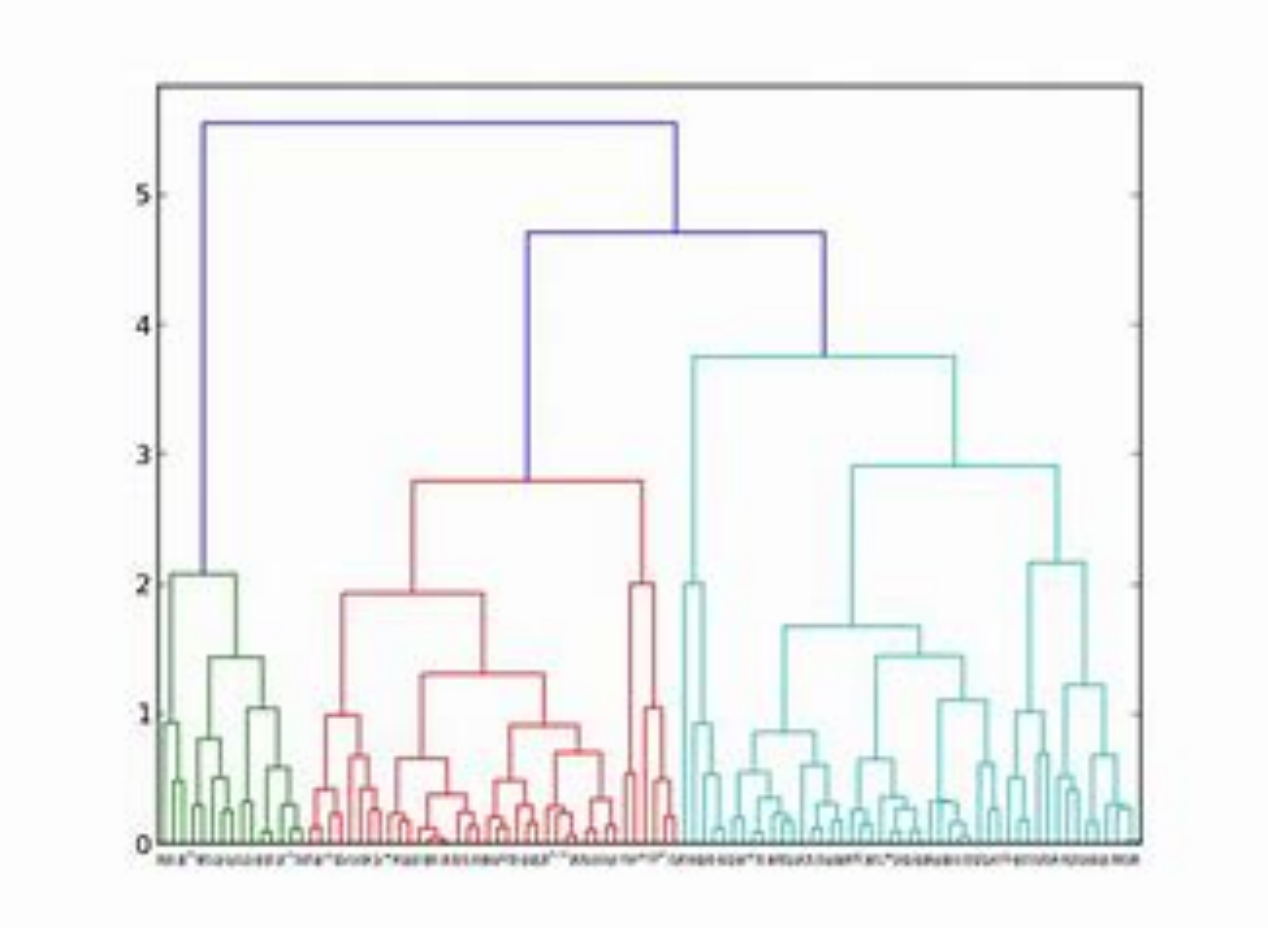


- 构建新的超图
  - 顶点：每个社区抽象成一个顶点
  - 边：如果两个社区间存在至少一条边，则两个超级顶点是连通的
  - 边的权重：为两个社区间所有连接边的权重之后
- 超图
  - 是一个权重图
  - 比输入图小很多
- 因此，复杂度最高的操作是在第一轮迭代中，而且复杂度为 $O(|E|)$

Louvain 算法示例



Louvain 算法优势



层次状社区结构

实验结果

	Karate	Arxiv	Internet	Web nd.edu
Nodes/links	34/77	9k/24k	70k/351k	325k/1M
CNM	.38/0s	.772/3.6s	.692/799s	.927/5034s
PL	.42/0s	.757/3.3s	.729/575s	.895/6666s
WT	.42/0s	.761/0.7s	.667/62s	.898/248s
Our algorithm	.42/0s	.813/0s	.781/1s	.935/3s

	Phone	Web uk-2005	Web WebBase 2001
Nodes/links	2.6M/6.3M	39M/783M	118M/1B
CNM	-/-	-/-	-/-
PL	-/-	-/-	-/-
WT	.56/464s	-/-	-/-
Our algorithm	.769/134s	.979/738s	.984/152mn

本章小结

- 社区发现是常见的一类图数据挖掘任务
  - 图可视化
  - 异常检测
  - 用户画像
- 社区类型
  - 全局社区结构
  - 局部社区结构（Clique、Biclique、Quasi-clique）
- 全局社区发现
  - 谱聚类方法
  - Louvain 算法