

Εργασία Θεωρίας Δικτύων

Φίλιππος Ρωσσίδης
(AEM 10379)

9 Ιανουαρίου 2025

1 Εισαγωγή

Στην εργασία αυτή εξετάζουμε την αναγνώριση κοινοτήτων. Συγκεκριμένα θα υλοποιούμε την distance quality function θα ελέγξουμε κατά πόσο αυτή είναι καλή επιλογή.

Οι συναρτήσεις αυτές (quality functions) δέχονται ως όρισμα έναν γράφο και μια κατανομή κοινοτήτων και επιστρέφουν μία τιμή. Σκοπός μας είναι να επιστρέφουν υψηλές τιμές για κατανομές που παρουσιάζουν ισχυρή κοινοτική συμπεριφορά, ώστε να μπορούμε μεγιστοποιώντας αυτή τη συνάρτηση να ανιχνεύσουμε τις κοινότητες.

Θα υλοποιηθεί η συνάρτηση με έναν βέλτιστο ως προς τη ταχύτητα τρόπο, όπως και δύο αλγόριθμοι μεγιστοποίησής της. Θα υλοποιηθούν και κάποια benchmarks ώστε να ποσοτικοποιηθεί η απόδοσή της και θα συγκριθεί με την εδραιωμένη μετρηχότητα modularity.

2 Η συνάρτηση distance quality

2.1 Μαθηματικός Ορισμός

Η συνάρτηση δέχεται σαν όρισμα έναν γράφο και κάποια κατανομή κοινοτήτων.

Ορίζουμε:

$$D_V(i, j) = \min\{k : A_G^k(i, j) \neq 0\}$$

τον πίνακα που περιέχει τις αποστάσεις μεταξύ κάθε δύο κόμβων του γράφου i, j , όπου $A_G^k(i, j)$ ο πίνακας γειτνίασης του γράφου G . υψομένος στην k δύναμη.

Ορίζουμε επίσης:

$$D_V(c) = \sum_{i, j \in c} D_V(i, j)$$

Αυτό αποτελεί μέτρο του πόσο στενά συνδεδεμένες είναι μεταξύ τους οι κοινότητες. Επιθυμούμε να το συγκρίνουμε με την αναμενόμενη τιμή για τυχαίο γράφο.

Για να ορίσουμε τον τυχαίο γράφο επιλέγουμε το γενικευμένο μοντέλο, όπου συνδέουμε τυχαία ακμές μεταξύ κόμβων, διατηρώντας όμως τον βαθμό τους.

Αν $d_k(v)$ είναι ο k βαθμός του κόμβου v , δηλαδή το πλήθος των ελάχιστων μονοματιών μήκους k που ξεκινάν από τον v και $m_k(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d_k(v)$ το πλήθος ελάχιστων μονοπατιών μήκους k στον γράφο G , τότε η πιθανότητα δύο κόμβοι $i, j \in G$ να συνδέονται με ακμή μήκους k είναι:

$$Pr[i, j, k] = \frac{d_k(i)}{2m_k(G)} \frac{d_k(j)}{2m_k(G)}$$

η αναμενόμενη απόσταση των κόμβων:

$$\overline{D_V(i, j)} = \sum_{k=1}^{diam(G)} k Pr[i, j, k]$$

όπου $diam(G)$ η διάμετρος του γράφου (μέγιστο ελάχιστο μονοπάτι).

Αν ορίσουμε

$$\overline{D_V(c)} = \frac{1}{2} \sum_{i, j \in c} \overline{D_V(i, j)}$$

το άθροισμα των αναμενόμενων αποστάσεων των κόμβων στην κοινότητα C , τότε η συνάρτηση:

$$Q_d(G, C) = \sum_{c \in C} (\overline{D_V(c)} - D_V(c))$$

δηλώνει την επιθυμητή σύγκριση του μέτρου στενής σύνδεσης των κοινοτήτων C ως προς του τυχαίου γράφου.

Περιμένουμε οι τιμές της Q_d να είναι υψηλές για ισχυρές δομές κοινοτήτων.

Στην υλοποίηση μου διάλεξα επίσης να τροποποιήσω την συνάρτηση ως εξής:

$$D_V(c) = \sum_{i, j \in c} D_V(i, j)$$

$$\overline{D_V(c)} = \sum_{i, j \in c} \overline{D_V(i, j)}$$

$$Q_d(G, C) = \sum_{c \in C} [(1 - \gamma) \overline{D_V(c)} - \gamma D_V(c)], \quad \gamma \in (0, 1)$$

ώστε για $\gamma = 0.5$ να ισοδυναμεί με τον προϋγούμενο ορισμό, αλλά να έχω δυνατότητα να επιλέξω ποιός όρος θα επηρεάσει περισσότερο.

2.2 Υλοποίηση

Χρησιμοποιήθηκε δυναμική προσέγγιση, δηλαδή οι τιμές του αλγορίθμου που χρησιμοποιούνται συχνά ($D_V(i, j)$, $d_k(i)$, $m_G(k)$, $Pr[i, j, k]$, $\overline{D_V(i, j)}$, ..) υπολογίζονται μία φορά στην αρχή και αποθηκεύονται ώστε να καλούνται σε σταθερό χρόνο στην πορεία. Έτσι γλυτώνουμε τις άσκοπες επαναλύσεις. Ειδικότερα στην περίπτωση του συγκεκριμένου αλγορίθμου, αφού η συνάρτηση ποιότητας θα υπολογιστεί χιλιάδες φορές για διαφορετικές επιλογές κοινοτήτων στην διαδικασία μεγιστοποίησής της, και εφόσον οι μακράν πιο αργές διαδικασίες (όπως θα περιγραφτεί παρακάτω) είναι αυτές των προαναφερθέντων ποσοτήτων, η διαφορά στο χρόνο εκτέλεσης είναι ραγδαία.

Όπου είναι δυνατό χρησιμοποιούνται συναρτήσεις της βιβλιοθήκης *networkx* μιας και είναι βελτιστοποιημένες και θα συμβάλουν στην ταχύτητα του κώδικα.

Στην πρώτη φάση του αλγορίθμου υπολογίζονται οι παρακάτω ποσότητες και αποθηκεύονται για μελλοντική χρήση:

- **διάμετρος του γράφου**

Χρησιμοποιείται η συνάρτηση της βιβλιοθήκης *networkx* : *diameter(G)*.

- **$D_V(i, j)$**

Χρησιμοποιείται η συνάρτηση της βιβλιοθήκης *networkx* : *all_pairs_shortest_path_length(G)*, η οποία επιστρέφει απευθείας το ζητούμενο, την απόσταση κάθε δύο κόμβων του γράφου μεταξύ τους. Τα στοιχεία αποθηκεύονται σε ένα *python dict*. Η χρονική πολυπλοκότητα της συνάρτησης αυτής είναι $O(|V|^2 \log |V| + |V||E|)$ (;), όπου $|V|$ το πλήθος κόμβων του γράφου και $|E|$ το πλήθος των ακμών.

- $d_k(i)$ και $m_G(k)$

Χρησιμοποιείται η συνάρτηση της βιβλιοθήκης *networkx* :

singe_source_shortest_path_length($G, source$), η οποία υπολογίζει για κάποιον κόμβο *source* όλα τα ελάχιστα μονοπάτια που τον έχουν σαν άκρο. Αν υπολογιστούν αυτά τα μονοπάτια για κάθε κόμβο ως *source* τότε θα έχουμε υπολογίσει όλα τα ελάχιστα μονοπάτια του γράφου δύο φορές (μία για $i \rightsquigarrow j$ και μια για $j \rightsquigarrow i$). Η συνάρτηση χρησιμοποιεί την τεχνική *Breadth First Search*, έτσι η χρονική πολυπλοκότητα της είναι $O(|V| + |E|)$

Τρέχουμε την παραπάνω συνάρτηση για κάθε κόμβο του γράφου (*source*). Στο *dict* που αυτή επιστρέφει, περιέχονται για κάθε άλλο κόμβο (*target*) μια λίστα με μήκη από όλα τα μονοπάτια που τους ενώνουν ($source \rightsquigarrow target$). Έτσι για κάθε μονοπάτι που βρίσκουμε στη λίστα, έχουμε το μήκος του k , αυξάνουμε κατά 1 τον βαθμό $d_k(source)$ και κατά 0.5 τη τιμή $m_G(k)$. Χρησιμοποιούμε 0.5 διότι $m_k(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d_k(v)$ (μετράμε κάθε μονοπάτι 2 φορές).

Η πολυπλοκότητα της παραπάνω διαδικασίας είναι: *#addcomplexity*.

- $Pr[i, j, k]$ και $\overline{D_V(i, j)}$

Υπολογίζονται απλά με τους τύπους:

$$Pr[i, j, k] = \frac{d_k(i)}{2m_k(G)} \frac{d_k(j)}{2m_k(G)}$$

$$\overline{D_V(i, j)} = \sum_{k=1}^{diam(G)} k Pr[i, j, k]$$

και αποθηκεύονται.

Συγκεκριμένα οι πίνακες αυτοί είναι συμμετρικοί (αφού $\frac{d_k(i)}{2m_k(G)} \frac{d_k(j)}{2m_k(G)} = \frac{d_k(j)}{2m_k(G)} \frac{d_k(i)}{2m_k(G)}$) οπότε οι τιμές αυτές υπολογίζονται μία φορά για κάθε ζευγάρι i, j και προστίθενται στο τέλος μία φορά για $i = j$ και δύο για $i \neq j$.

Η χρονική πολυπλοκότητα της παραπάνω διαδικασίας είναι: *#addcomplexity*.

Προσοχή χρειάζεται το γεγονός ότι οι παραπάνω διαδικασίες δε μπορούν να λειτουργήσουν για μη συνδεδεμένους γράφους. Έτσι υιοθετούμε τη σύμβαση ότι δύο μη συνδεδεμένες συνεκτικές συνιστώσες δεν μπορούν να βρίσκονται στην ίδια κοινότητα. Όποτε διαχωρίζουμε τον γράφο στις συνεκτικές του συνιστώσες και τρέχουμε τα παραπάνω για κάθε μία ξεχωριστά. Αυτή η προσέγγιση διατηρεί την πολυπλοκότητα ίδια (αφού οι συνεκτικές συνιστώσες διαμερίζουν τον γράφο).

Συνολική πολυπλοκότητα της πρώτης φάσης: *addcomplexity*.

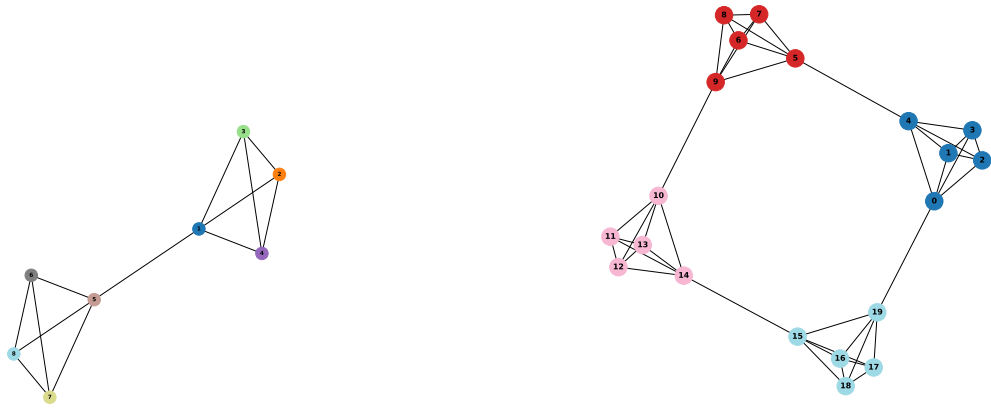
Στη δεύτερη φάση του αλγορίθμου, αφού έχουν αποθηκευτεί τα παραπάνω, υπολογίζονται για τις δοσμένες κοινότητες C τα αθροίσματα:

$$D_V(C) = \sum_{i, j \in C} D_V(i, j), \quad \overline{D_V(C)} = \sum_{i, j \in C} \overline{D_V(i, j)}$$

για $i, j \in C$, και η τιμή:

$$Q_d(G, C) = \sum_{c \in C} [(1 - \gamma) \overline{D_V(C)} - \gamma D_V(C)]$$

Συνολική πολυπλοκότητα της δεύτερης φάσης: $O(|V|^2)$.



(α') Αποτελέσματα ωμής δύναμης για $\gamma = 0.5$. Κάθε (β') Αποτελέσματα αλγορίθμου Newman για $\gamma = 0.02$. Οι κοινότητες έχουν αναγνωρισθεί σωστά.

2.2.1 Μια πρώτη ματιά στα αποτελέσματα

Για μια πρώτη εικόνα της λειτουργίας της παραπάνω μετρηχής, δοκιμάστηκε τεχνική ωμής δύναμης σε διάφορους γράφους, για $\gamma = 0.5$ (δηλαδή τον αρχικό ορισμό της). Ένα παράδειγμα βρίσκεται στο σχήμα 1α', όπου κάθε κοινότητα χρωματίζεται με δικό της χρώμα.

Στο σχήμα φαίνονται οι κοινότητες για τις οποίες η τιμή Q_d είναι μέγιστη. Ενώ περιμέναμε για τον γράφο αυτό να επιστραφούν δύο κοινότητες των 4 κόμβων, βλέπουμε ότι αυτό δεν συμβαίνει. Συγκεκριμένα για $\gamma = 0.5$ βρέθηκε πειραματικά ότι τη μέγιστη τιμή Q_d παίρνουμε πάντα όταν κάθε κόμβος έχει δική του κοινότητα. Σε αυτό θα χρησιμεύσει η τιμή γ , όπου με την αλλαγή της μπορούμε να έχουμε τη επιθυμητή συμπεριφορά.

Παρατίθεται προκαταβολικά στο σχήμα 1β' το αποτέλεσμα του αλγορίθμου Newman για $\gamma = 0.02$ για να φανεί το γεγονός αυτό.

3 Αλγόριθμοι μεγιστοποίησης του Q_d

3.1 Πρώτη προσπάθεια άπληστου αλγορίθμου

Θα περιγράψω τον πρώτο αλγόριθμο που υλοποιήθηκε συνοπτικά, διότι παρότι αντικαταστάθηκε από αυτόν του Newman, παρουσιάζει κάποια διαφορά στην λογική και τα αποτελέσματα:

1. Υπολογίζουμε τις απαραίτητες ποσότητες και τις αποθηκεύουμε ($D_V(i, j)$, $d_k(i)$, $m_G(k)$, $Pr[i, j, k]$, $\overline{D_V(i, j)}$, $diam(G)$).
2. Αρχικοποιούμε κάθε κόμβο σε δική του κοινότητα.
3. Για κάθε κόμβο, υπολογίζουμε τον γειτονικό του κόμβο στο οποίο την κοινότητα εάν μεταφερθεί θα υπάρξει η μέγιστη μεταβολή στο Q_d . Εάν η μεταβολή αυτή είναι θετική, τότε τον μεταφέρουμε σε εκείνη την κοινότητα.
4. Επαναλαμβάνουμε το βήμα 3 μέχρι να μην γίνεται καμία μεταβολή.

Ο αλγόριθμος αυτός δέχεται βελτιστοποίηση, ειδικότερα στο κομμάτι όπου υπολογίζει την ποσότητα Q_d για κάθε μεταβολή των κόμβων σε κοινότητες. Ένα μεγάλο μέρος της εξίσωσης $Q_d(G, C) = \sum_{c \in C} [(1 - \gamma) \overline{D_V(c)} - \gamma D_V(c)]$ παραμένει σταθερό όταν μετακινούμε μόνο έναν κόμβο και κρατάμε τις υπόλοιπες κοινότητες σταθερές, και το γεγονός αυτό θα εκμεταλευτούμε στη συνέχεια.

Επίσης εδώ τίθεται το ζήτημα της σύγκλισης, εάν ο αλγόριθμος συγκλίνει (εξαρτάται από τη τιμή του γ) και πόσο γρήγορα, το οποίο λύνεται στην συνέχεια.

3.1.1 Απόδοση

Θα περιγραφεί εδώ η διαδικασία με την οποία μετρήθηκε η απόδοση του αλγορίθμου, η οποία θα χρησιμοποιηθεί και στη συνέχεια για τον αλγόριθμο του Newman.

3.2 Newman

Για καλύτερα αποτελέσματα υλοποιήθηκε ο αλγόριθμος που προτάθηκε από τον Newman [2].

Ο αλγόριθμος αυτός προτάθηκε για τη μεγιστοποίηση της modularity, αλλά μπορεί με τις κατάλληλες τροποποιήσεις να χρησιμοποιηθεί και εδώ.

Ξεκινάμε με μια κοινότητα για κάθε κόμβο και ενώνουμε διαδοχικά τις κοινότητες αυτή τη φορά, οι οποίες θα έχουν μέγιστη αύξηση του Q . Μετά από $|V| - 1$ συνδέσεις θα έχει μείνει μόνο μία κοινότητα, όποτε απαιτούνται το πολύ $|V| - 1$ συνδέσεις.

Στην ταχύτητα βοηθάει η παρατήρηση ότι δε χρειάζεται να υπολογίζεται συνέχεια η τιμή της Q_d αλλά μόνο η διαφορά $\Delta Q_d(c_i, c_j)$ της Q_d αν συνενώσουμε τις κοινότητες c_i και c_j .

Περιγραφικά:

Έστω ότι έχω κοινότητες $C = c_1, \dots, c_n$ και συνενώνω τις κοινότητες $c_i, c_j \in C$ ώστε να αποκτήσω στο επόμενο βήμα κοινότητες C' . Έστω επίσης ότι Q_d είναι η τιμή της distance quality στις κοινότητες C , ενώ Q'_d στις C' .

Για ευκολία συμβολίζω:

$$I(c) = [(1 - \gamma)\overline{D_V(c)} - \gamma D_V(c)]$$

και,

$$J(i, j) = (1 - \gamma)\overline{D_V(i, j)} - \gamma D_V(i, j)$$

τότε,

$$Q_d = \sum_{c \in C} I(c) = \sum_{c \in C} \sum_{i, j \in c} J(i, j)$$

Έχουμε:

$$Q_d = \sum_{c \in C} I(c) = \sum_{c \in C \setminus c_i, c_j} [I(c)] + I(c_i) + I(c_j) \Leftrightarrow$$

$$Q_d = \sum_{c \in C \setminus c_i, c_j} [I(c)] + \sum_{i, j \in c_i} J(i, j) + \sum_{i, j \in c_j} J(i, j)$$

και,

$$Q'_d = \sum_{c \in C'} I(c) = \sum_{c \in C \setminus c_i, c_j} [I(c)] + I(c_i \cup c_j) \Leftrightarrow$$

$$Q'_d = \sum_{c \in C \setminus c_i, c_j} [I(c)] + \sum_{i, j \in c_i \cup c_j} J(i, j)$$

Από τα παραπάνω είναι φανερό ότι:

$$\Delta Q = Q'_d - Q_d = 2 \sum_{i \in c_i, j \in c_j} J(i, j) \Leftrightarrow$$

$$\Delta Q = 2 \sum_{i \in c_i, j \in c_j} (1 - \gamma)\overline{D_V(i, j)} - \gamma D_V(i, j)$$

Στον συγκεκριμένο αλγόριθμο διατηρώ έναν πίνακα ΔQ ο οποίος στη θέση i, j περιέχει τη διαφορά $\Delta Q_d(c_i, c_j)$. Σε κάθε βήμα βρίσκω το μέγιστο στοιχείο του πίνακα και ενώνω τις κοινότητες αυτές c_i, c_j . Σύμφωνα με τη παρατήρηση των Clauset-Newman-Moore [1] όταν γίνει το $\max \Delta Q$ πρώτη φορά αρνητικό, γνωρίζουμε ότι από εκεί και πέρα θα συνεχίσει να είναι αρνητικό, ή η Q_d θα συνεχίσει να μειώνεται. Επομένως δεν έχει σημασία η αναζήτηση πέραν αυτού του σημείου και ο αλγόριθμος σταματάει όταν βρει $\max \Delta Q \leq 0$.

Καλύτερα ... Ίσως v, u στις κοινότητες..

$$\Delta Q = 2[(1 - \gamma)\overline{D_V(i, j)} - \gamma D_V(i, j)]$$

Όταν ενώσω c_i, c_j στην j πως αλλάζει ο ΔQ :
για κάθε $c_k \in C$

$$\Delta Q_{jk} = 2 \sum_{i \in c_i \cup c_j, j \in c_k} J(i, j) = 2 \sum_{i \in c_i, j \in c_k} J(i, j) + 2 \sum_{i \in c_j, j \in c_k} J(i, j) = \Delta Q_{ik} + \Delta Q_{jk}$$

Αναφορές

- [1] Aaron Clauset, M. E. J. Newman, and Cristopher Moore. Finding community structure in very large networks. *Phys. Rev. E*, 70(6):066111, December 2004.
- [2] M. E. J. Newman. Fast algorithm for detecting community structure in networks. *Phys. Rev. E*, 69:066133, Jun 2004.