UNIVERSIDADE REGIONAL DE BLUMENAU CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS CURSO DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO – BACHARELADO

GERAÇÃO DE REDES COMPLEXAS COM COMUNIDADES SOBREPOSTAS E COMUNIDADES HIERÁRQUICAS

GUSTAVO HENRIQUE SPIESS

BLUMENAU 2022

GUSTAVO HENRIQUE SPIESS

GERAÇÃO DE REDES COMPLEXAS COM COMUNIDADES SOBREPOSTAS E COMUNIDADES HIERÁRQUICAS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de graduação em Ciências da Computação no Centro de de Ciências Exatas e Naturais da Universidade Regional de Blumenau como requisito parcial para a obtenção de grau de Bacharel em Ciências da Computação.

Professor Aurelio Faustino Hoppe, Mestre - Orientador



Dedico esse trabalho a minha noiva, cuja paciência em me ouvir falar desse trabalho tornouo possível.

AGRADECIMENTOS

A meu padrinho, Maiko Rafael Spiess, pelo sempre presente incentivo ao estudo.

Ao meu orientador, Aurélio Faustino Hoppe, por acreditar na conclusão desse trabalho.

A minha família, por todos os anos de apoio que foram necessários para chegar até aqui.

Aos amigos que fiz no percurso do bacharelado, pelo apoio recebido.

Aos professores do Departamento de Sistemas e Computação da Universidade Regional de Blumenau por suas contribuições durante os semestres letivos.

"Se eu vi mais longe, foi por estar sobre ombros de gigantes." Isaac Newton

RESUMO

Sistemas do mundo real não raro são modelados como grafos com atributos, significando uma estrutura de dados onde tem-se uma caracterização dos nodos do sistema, bem como as relações entre os nodos. Nesses grafos observados no mundo real, algumas propriedades naturalmente são presentes na topografia da rede. Uma dessas propriedades é uma tendencia a formação de agrupamentos que podem ser descritos como comunidades, e essas em muitos sistemas tem a característica de serem organizadas de forma auto semelhantes, isso é, comunidades que são compostas por sub comunidades, formando uma estrutura aninhada. Comunidades também tendem, em alguns sistemas do mundo real, a apresentarem áreas de sobreposição, onde nodos pertencem simultaneamente a múltiplas comunidades. Este trabalho apresenta um modelo algorítmico de geração de redes complexas com comunidades hierarquicamente aninhadas e com comunidades sobrepostas. O objetivo principal do modelo é a parametrização e controle dessas propriedades durante o processo de construção do grafo para a disponibilização de uma ground truth contra a qual algoritmos de detecção de comunidades podem ser avaliados.

Palavras-chave: Redes complexas. Geração de redes complexas. Comunidades. Comunidades sobrepostas. Comunidades hierárquicas.

ABSTRACT

It is not rare that real world systems get modeled as attributed graph, meaning a data structure where there is the categorization of the nodes, and also the relationships between nodes. In this graphs from the real world, some properties naturally happen in the network topography. One of this properties is the tendency to form clusters that can be described as communities, in many systems those communities are organized in a self similar way, e.g. communities composed by sub communities, forming a nested structure. Communities also tend, in some real world systems, to have overlapping regions, where nodes belong to both communities. This paper presents an algorithmic model for generating complex networks with hierarchical communities and with overlapping communities. The main goal of this model is the parameterization and control of those properties during the building process of the graph to make available a ground truth against witch detection algorithms can be tested.

Keywords: Complex networks. Complex networks generation. Communities. Overlapping communities. Hierarchical communities

LISTA DE FIGURAS

| Figura 1 – | Exemplo de grafo | 16 |
|------------|---|----|
| Figura 2 – | Exemplo de grafo com comunidades hierárquicas | 21 |
| Figura 3 – | Demonstração dos resultados de diferentes algoritmos de detecção em | |
| | um grafo com comunidades hierárquicas e com sobreposição | 22 |
| Figura 4 – | M_0 renderizado aproximando os vértices adjacentes | 47 |
| Figura 5 – | M_0 renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos | 48 |
| Figura 6 – | ${\cal M}_0$ renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos (apenas | |
| | arestas) | 49 |
| Figura 7 – | B_0 renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos \dots | 50 |
| Figura 8 – | B_0 renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos (apenas | |
| | arestas) | 50 |

LISTA DE QUADROS

| Quadro 1 — Características da modelagem |
|---|
| Quadro 2 — Características da modelagem |
| Quadro 3 – Fase 1 do modelo |
| Quadro 4 — Fase 2 do modelo, construção dos lotes |
| Quadro 5 – Fase 2 do modelo, processamento dos lotes |
| Quadro 6 – Fase 2 do modelo, função choose Communities (v,\mathcal{G}_p) |
| Quadro 7 – Fase 2 do modelo, função edges Within (v, \mathcal{G}_p, C, n) |
| Quadro 8 – Fase 2 do modelo, função $edgesBetween(v,\mathcal{G}_p,C_c,m)$ |
| Quadro 9 – Fase 3 do modelo, adição final de arestas |
| Quadro 10 – Parâmetros básicos |

LISTA DE TABELAS

| Tabela 1 – | Modularidade com os parâmetros básicos | 42 |
|------------|--|----|
| Tabela 2 – | Modularidade com $K = (9, 2, 2, 2) \dots \dots \dots \dots \dots$ | 43 |
| Tabela 3 – | Modularidade com variação de K | 43 |
| Tabela 4 – | Homogeneidade e homofilia com os parâmetros básicos | 45 |
| Tabela 5 – | Homofilia e Homogeneidade com $K = (9, 2, 2, 2) \dots \dots \dots$ | 46 |
| Tabela 6 – | Homofilia e Homogeneidade com θ variável | 46 |

SUMÁRIO

| 1 | INTRODUÇÃO | 14 |
|---------|--|----|
| 1.1 | OBJETIVOS | 15 |
| 1.2 | ESTRUTURA | 15 |
| 2 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | 16 |
| 2.1 | REDES COMPLEXAS E COMUNIDADES | 16 |
| 2.2 | PROPRIEDADES DE REDES COMPLEXAS | 19 |
| 2.2.1 | Mundo pequeno, Anexação preferencial e Liberdade de escala | 19 |
| 2.2.2 | Cluster e comunidades | 20 |
| 2.2.3 | Homofilia e Homogeneidade de comunidades | 20 |
| 2.2.4 | Agrupamentos hierárquicos e sobreposições | 21 |
| 2.3 | ESTADO DA ARTE | 23 |
| 2.3.1 | RTG: a recursive realistic graph generator using random typing | 23 |
| 2.3.2 | Generating Attributed Networks with Communities | 24 |
| 3 | MODELO | 26 |
| 3.1 | HIPÓTESE | 26 |
| 3.1.1 | A Representação do grafo | 26 |
| 3.1.2 | Propriedades desejáveis do modelo | 27 |
| 3.2 | IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO | 30 |
| 3.2.1 | Parâmetros | 30 |
| 3.2.2 | Inicialização do grafo | 30 |
| 3.2.3 | Processamento dos vértices | 33 |
| 3.2.3.1 | Seleção de comunidades | 35 |
| 3.2.3.2 | Geração de arestas | 36 |
| 3.2.3.3 | Atualização do estado | 38 |
| 3.2.4 | Adição final de arestas | 39 |

| 4 | RESULTADOS EXPERIMENTAIS | 41 |
|-------|---------------------------|----|
| 4.1 | COMUNIDADES | 41 |
| 4.2 | HOMOFILIA E HOMOGENEIDADE | 43 |
| 4.2.1 | Inercia | 44 |
| 4.2.2 | Distância esperada | 44 |
| 4.2.3 | Resultados | 45 |
| 4.3 | VISUALIZAÇÃO | 46 |
| 5 | CONCLUSÕES | 51 |
| 5.1 | EXTENSÕES | 51 |
| | | |
| | REFERÊNCIAS | 53 |

1 INTRODUÇÃO

Redes complexas, como definido por Metz et al. (2007), são grafos com uma topologia não trivial. Isso é, são grafos onde parte ou toda a informação de interesse está contida não nos vértices e arestas individualmente, mas em propriedades do conjunto de vértices e arestas. Esses grafos e as suas propriedades são aplicáveis as mais diversas áreas, como por exemplo na propagação de uma epidemia Stegehuis, Hofstad e Leeuwaarden (2016).

Como apontado por Girvan e Newman (2002), um dos sistemas do mundo real que se pode modelar em uma rede complexa é o conjunto de relações sociais. Uma modelagem simplista desse sistema é a representação de cada indivíduo como um vértice, e vértices adjacentes sendo pares de indivíduos que se conhecem. Nesse tipo de sistema um sub grafo completo, denominado clique (FORTUNATO, 2010), pode ser interpretada como uma propriedade relevante a indicação de que desse conjunto de indivíduos onde todos conhecem todos.

Girvan e Newman (2002) também aponta que outros sistemas, como cadeias alimentares, cadeias de metabolização, redes de transmissão elétrica e redes de computadores podem ser representadas como redes complexas. Muitas vezes propriedades que se observam em redes complexas de um domínio estão presentes também nas redes complexas de outros domínios, mas com interpretações distintas sobre o objeto modelado. O trabalho de Fortunato (2010) indica isso na discussão de múltiplas interpretações do que constitui uma comunidade em uma rede complexa, dividindo-se principalmente em características estruturais, e por semelhança de vértice.

Largeron et al. (2015) descreve o que é chamado na literatura de um modelo de geração algorítmica de redes complexas onde os vértices do grafo estão dispostos em uma nuvem de ponto e a distribuição deles em diferentes comunidades leva em conta sua posição espacial, e as arestas são construídas em função desse pertencimento a uma comunidade. Akoglu e Faloutsos (2009) descreve um modelo mais primitivo, que não realiza a atribuição explicita de comunidades, mas que gera um grafo com essas comunidades ainda assim. Indica-se, observando o trabalho de Fortunato (2010) de que há uma vasta literatura a respeito dos processos de detecção dessas comunidades. Observando-se a literatura da qual os trabalhos de Largeron et al. (2015), Akoglu e Faloutsos (2009) e Slota et al. (2019), é indicada a existência dos modelos necessários para a geração de redes complexas com comunidades. No entanto propriedades adjacentes a presença de comunidades para os quais existe literatura a respeito da detecção, como comunidades hierárquicas e comunidades sobrepostas, parecem estar pouco presentes em modelos de geradores de redes complexas.

Tendo esse contexto, este trabalho pretende adaptar os modelos presentes na literatura de geração de redes complexas para a incorporação dessas propriedades, comunidades sobrepostas e comunidades hierárquicas.

1.1 OBJETIVOS

O objetivo desse trabalho é a construção de um modelo de geração algorítmica de redes complexas com comunidades hierarquicamente organizadas e com comunidades sobrepostas.

Os objetivos específicos são:

- a) a construção de um modelo algorítmico de geração de redes complexas que inclua a propriedade de comunidades;
- b) a especificação de uma ground truth de quais vértices pertencem a quais comunidades;
- c) a possibilidade de comunidades hierárquicas e de comunidades sobrepostas;
- d) a representação dos vértices como uma nuvem de pontos, para a definição de semelhança de vértices por distância.

1.2 ESTRUTURA

Esse trabalho se estrutura em quatro capítulos sendo o primeiro uma introdução aos temas abordados, bem como a apresentação dos objetivos do trabalho.

O segundo capítulo apresenta a fundamentação teórica da pesquisa, descrevendo o estado da arte do objeto de estudo.

O terceiro capítulo discute o desenvolvimento do modelo algorítmico proposto, incluindo ferramentas e técnicas utilizadas. Também são apresentados os blocos de pseudo código do modelo.

O quarto capítulo compõe os dados obtidos na avaliação dos resultados, bem como quaisquer discussões de implementações futuras ou outras formas de continuação.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Grafos podem trivialmente ser definidos como $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ onde \mathcal{V} é um conjunto dos vértices de \mathcal{G} e \mathcal{E} é um conjunto de pares não ordenados de vértices adjacentes em \mathcal{G} , i.e. as arestas.

V₁ V₂ V₂

Figura 1 – Exemplo de grafo

Fonte: elaborado pelo autor.

No exemplo da Figura 1, pode se representar o mesmo grafo com $\mathcal{V} = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$ e $\mathcal{E} = \{\{v_1, v_2\}, \{v_2, v_3\}, \{v_3, v_4\}, \{v_4, v_1\}, \{v_1, v_5\}, \{v_2, v_5\}\}$. Dentro desse grafo, o subgrafo formato pelos vértices v_1, v_2 e v_5 é também um grafo completo. A esse conjunto de vértices que forma um subgrafo completo dá-se o nome de clique (FORTUNATO, 2010).

2.1 REDES COMPLEXAS E COMUNIDADES

A definição de clique pode ser utilizada como um ponto de partida para conceito de comunidade, partindo de uma perspectiva local (FORTUNATO, 2010). É facilmente observável, no entanto, que essa é uma definição muito limitante de comunidade, é raro que comunidades de pessoas apresentem tanta homogeneidade a ponto de todos os membros conhecerem todos os outros membros. De fato, Fortunato (2010) indica que a definição do que é uma comunidade varia de acordo também com o contexto de estudo, mas que algumas características são universais. Uma comunidade, dentro de qualquer definição, deve ser um sub grafo conexo, por exemplo (FORTUNATO, 2010).

Largeron et al. (2015) define comunidade como uma classe de estrutura topológica comum a redes complexas, essas comunidades são categorizadas por terem uma densidade de vértices elevada. Shen et al. (2009) entende que comunidades sejam estruturas que contenham múltiplos cliques dentro de si, e que essas comunidades se dispões em uma

estrutura recursiva. Akoglu e Faloutsos (2009) descreve comunidades como estruturas modulares, onde nodos de um vértice formam grupos distintos entre si por que os membros do grupo tem maior chance de estarem conectados entre si do que estarem conectar com membros de outros grupos. Girvan e Newman (2002) define "Cluster" e comunidade como duas propriedades distintas, o primeiro sendo a probabilidade de dois nodos ambos adjacentes a um terceiro serem também adjacentes entre si, e a segunda como sendo condutos de vértices densamente conectados entre si, e esparsamente conectados para além de si.

As definições são agrupadas em três classes distintas por Fortunato (2010): definição local; definição global; e definição por similaridade de vértice. Essas definições não são mutuamente exclusivas, mas também não são ortogonais uma a outra. Segundo Fortunato (2010), a definição local parte das características topológicas internas á comunidade. Nominalmente, isso significa a existência de um conjunto considerável de arestas internas a comunidade e um conjunto limitado de arestas para além da comunidade.

A definição global de comunidades é aplicada aos casos onde a presença de clusters é uma característica inerente ao grafo ao qual se está estudando Fortunato (2010). Essa propriedade inerente ao grafo pode ser definida como alguma propriedade dos vértices do objeto em questão e que partindo disso se atribui pertencimento á comunidades, ou ainda por comparação com um exemplo nulo Fortunato (2010). No caso de comparação com um exemplo nulo, define-se uma comunidade pela característica de uma não ser presente dentro do que é chamado de "grafo aleatório" (FORTUNATO, 2010). Essa definição de um modelo nulo é crucial para o trabalho de Girvan e Newman (2002), o modelo nulo considerado é um modelo de um grafo construído a partir do grafo original onde os vértices tem o mesmo grau, mas a probabilidade de dois vértices estarem ligados é constante independente de quais os vértices.

A definição de comunidade por similaridade de vértice se baseia na tendencia de que em muitas aplicações, membros de comunidades são mais similares entre si do que seria esperado de um conjunto do mesmo tamanho escolhido aleatoriamente (FORTUNATO, 2010). Essa definição se faz visível no trabalhos de Akoglu e Faloutsos (2009) e de Largeron et al. (2015). Na observação desses dois trabalhos também é interessante o questionamento de como se define semelhança, Akoglu e Faloutsos (2009) representa os vértices como sequencias de caracteres de tamanhos variáveis em que a probabilidade de dois vértices estarem ligados é maior conforme mais caracteres eles compartilham; e Largeron et al. (2015) representa os vértices como pontos em um espaço n-dimensional e define que vértices

são mais semelhantes quando a distância euclideana deles é menor.

Também independente de qual definição de comunidade que se esteja utilizando, existem os conceitos de partição e cobertura. Segundo Fortunato (2010), uma partição é uma divisão dos vértices de um grafo tal que cada vértice pertença a um e exatamente um cluster. O caso de um vértice "livre", não pertencendo a nenhuma comunidade, é trivialmente resolvido incluindo ele á comunidade com a qual ele tem mais adjacências. Mas o caso de vértices que pertençam a mais de uma comunidade, i.e. comunidade que se sobreponham, é mais interessante. Fortunato (2010) define uma cobertura como uma divisão dos vértices em clusters onde cada vértice pertence a um ou mais clusters. Fortunato (2010) também descreve o conceito de comunidades hierárquicas, como sendo comunidades cuja estrutura interna também se organiza em clusters de escala menor do que o original.

Fortunato (2010) oferece também o conceito de "função de qualidade", sendo uma função que mapeia uma partição para um espaço de comparação, usualmente em números reais, onde partições que mapeiem para valores maiores são consideradas melhores. Segundo Fortunato (2010) função de qualidade mais comumente utilizada é a modularidade Q de Girvan e Newman (2002).

$$Q = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left(A_{ij} - \frac{K_i K_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j)$$
 (2.1)

Essa função no entanto não se aplica adequadamente ao caso de comunidades sobrepostas ou comunidades hierárquicas, para tanto, é necessário utilizar a função de modularidade estendida, conforme desenvolvido por Shen et al. (2009).

$$EQ = \frac{1}{2m} \sum_{i} \sum_{v \in C_i, w \in C_i} \frac{1}{O_v O_w} \left[A_{vw} - \frac{K_v K_w}{2m} \right]$$
 (2.2)

Tanto no caso da fórmula da equação 2.1 quanto no da 2.2 a função definida é uma somatórias em que alguns termos se repetem. Primeiramente, é preciso descrever que a função $\delta(C_iC_j)$ retorna um se C_i for igual a C_j , e zero noutro caso (FORTUNATO, 2010). Considerando isso, no caso de uma partição (sem comunidades hierárquicas, e sem comunidades sobrepostas), as duas somatórias iteram sobre os mesmos valores, a primeira com os vértices i e j e a segunda com os vértices v e w.

Essa iteração olha para todos os pares de vértices que compartilham alguma comunidade, e soma o valor de A_{ij} , sendo A a tabela de adjacência do grafo em questão. Então é subtraído um valor $K_iK_j/2m$, onde K_i é o grau do vértice i e m é a quantidade de

arestas no grafo (2m portanto é a soma dos graus de todos os vértices). Esse valor é o a probabilidade de uma aresta entre os vértices i e j no modelo nulo de Girvan e Newman (2002), considerando que os graus se mantém mas que a probabilidade da presença de uma aresta é uniforme.

A fórmula EQ de Shen et al. (2009) contém também o termo escalar $^{1}/o_{v}o_{w}$. Nesse caso o valor O_{i} é a quantidade de comunidades a qual pertence o vértice i. Isso permite a aplicação da modularidade estendida para os casos de grafos com comunidades sobrepostas. Vértices que estejam em duas comunidades contribuirão para a modularidade a partir das duas, mas tendo a magnitude da sua contribuição escalada à metade.

2.2 PROPRIEDADES DE REDES COMPLEXAS

Além de estruturas topológicas que podem ser denominas comunidades, redes complexas tem algumas propriedades topológicas bastante comuns e relevantes. São algumas delas: mundo pequeno; anexação preferencial; liberdade de escala; e homofilia.

2.2.1 Mundo pequeno, Anexação preferencial e Liberdade de escala

Largeron et al. (2015) descreve a propriedade de mundo pequeno como a característica de um sistema de ter um diâmetro logaritmicamente proporcional a quantidade de vértices em um grafo. Isso é, a distancia entre os dois vértices que estão a mais arestas de distância, denominada diâmetro, cresce logaritmicamente conforme observa-se exemplos maiores de grafos do sistema. Essa propriedade implica que em sistemas bastante grandes, é preciso uma quantidade relativamente pequena de saltos de nodo a nodo para se atingir qualquer membro do grafo. Essas propriedades serão exploradas a diante.

Largeron et al. (2015) define a anexação preferencial como uma propriedade de um sistema em que vértices tendem a se ligar com outros vértices que sejam parecidos e que tenham grau elevado. A implicação é que dado um sistema onde se vai adicionar um vértice, a maior parte das arestas desse novo vértice devem ligá-lo a outro com grau igual ou maior do que o próprio.

Para atingir essa distribuição característica, o modelo de Slota et al. (2019) faz com que os vértices se dividam em diferentes escalas, de forma que os vértices de uma escala se liguem apenas entre si e com os membros das escalas imediatamente vizinhas. De grafos com essa distribuição onde o grau relativo de dois vértices adjacentes tende a não apresentar saltos demasiadamente grandes, se diz que são livres de escala (LARGERON

et al., 2015).

2.2.2 Cluster e comunidades

Girvan e Newman (2002) diferenciam explicitamente entre a definição de clusters e de comunidades. Os autores apontam um cluster como sendo um triângulo, em outras palavras, um subgrafo completo com três vértices. Essa definição aparentemente arbitrária é relevante no entendimento do coeficiente de clusterização, definido como a proporção de quantas triplas conexas são triângulos.

$$C = \frac{3 \times (\text{número de triângulos do grafo})}{(\text{número de triplas conexas do grafo})}$$
(2.3)

A conceitualização de um cluster é relevante dentro do estudo de redes complexas na medida em que a implicação é de dois vértices serem ligados por compartilharem uma relação com um terceiro. O coeficiente C sendo igual a 1 implica que o grafo é um grafo completo (GIRVAN; NEWMAN, 2002). Mais que isso, esse coeficiente, dado um vértice, é a probabilidade de quaisquer dois vértices adjacentes a ele serem adjacentes entre si.

2.2.3 Homofilia e Homogeneidade de comunidades

Homofilia é a tendencia em um sistema de que dois vértices conectados sejam semelhantes entre si (AKOGLU; FALOUTSOS, 2009). Essa propriedade está intimamente ligada á definição de comunidade por semelhança de vértices. Essa definição de semelhança é deliberadamente vaga, pois dentro de sistemas distintos é trivial imaginar funções de semelhança distintas. Observa-se que em grafos obtidos em sistemas do mundo real, não raro a topografia otimiza alguma função de forma aos vértices serem mais parecidos com os vértices aos quais são adjacentes (LARGERON et al., 2015).

Homofilia como propriedade é intimamente ligada a uma outra característica que se observa de grafos do mundo real, em diferentes aplicações as comunidades tendem a ser mais homogêneas do que o grafo ao qual pertencem (LARGERON et al., 2015). Pode-se afirmar que um grafo onde isso ocorra tem a propriedade de "comunidades homogêneas".

O exemplo da Figura 2 demonstra como a homofilia as vezes pode ter a presença visualmente verificada. Considerando que a posição dos vértices na imagem corresponde a duas características ortogonais, a distância entre os vértices pode ser interpretada como uma função de similaridade de dois vértices. Nesse caso é intuitivamente entendido que vértices mais parecidos de conectam mais do que vértices mais dissemelhantes.

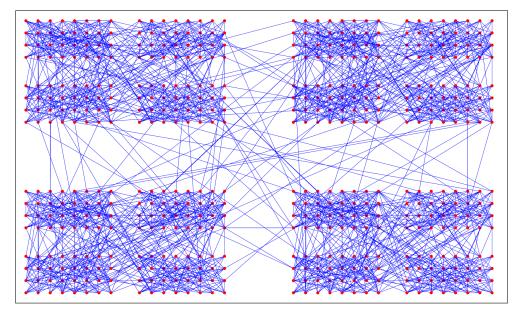


Figura 2 – Exemplo de grafo com comunidades hierárquicas

Fonte: Fortunato (2010)

2.2.4 Agrupamentos hierárquicos e sobreposições

No exemplo de grafo da Figura 2 é possível demonstrar um entendimento intuitivo de como comunidades se organizam. A estrutura topológica de grupos densamente conectados fica visualmente identificável, onde cada quadrante contém uma comunidade coesa. Também visualmente acessível, cada comunidade desse exemplo tem uma estrutura interna auto semelhante.

Essa construção de estruturas topológicas recursivas é denominada por Girvan e Newman (2002) como "meta grupo", onde as propriedade topológicas relativas a agrupamentos podem ser encontradas se repetindo em em escalas menores dentro das componentes de escalas maiores. Comunidades podem funcionalmente ser compostas por comunidades menores. Esse mesmo conceito recebe uma outra nomenclatura nos trabalhos de Largeron et al. (2015), Shen et al. (2009) e Fortunato (2010), onde são descritas como comunidades hierárquicas.

Essas estruturas seguem uma característica recursiva, como demonstrado pelo processo de detecção proposto por Shen et al. (2009), podendo ser concebidos exemplos de sistemas com qualquer sorte de diferentes níveis. E a elas também se aplica a compreensão de partição ou cobertura, na Figura 2 as comunidades de primeiro e de segundo nível caracteristicamente não compartilham vértices. No caso do que demonstra Shen et al. (2009) não só é possível que um vértice pertença a duas comunidades, é possível que ele pertença a duas comunidades de níveis distintos. Na Figura 3, os resultados de Shen et al.

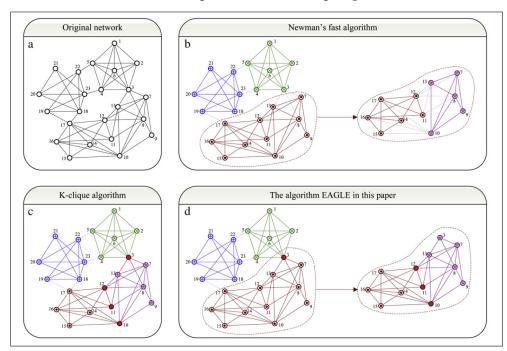


Figura 3 – Demonstração dos resultados de diferentes algoritmos de detecção em um grafo com comunidades hierárquicas e com sobreposição

Fonte: Shen et al. (2009)

(2009) são demonstrados no quadro a respeito do algoritmo EAGLE, o vértice denotado como 3 é compartilhado entre duas comunidades de primeira ordem, mas em uma delas o vértice 3 encontra-se como membro de uma comunidade de segunda ordem.

Ressaltando que a exata definição de comunidade é altamente dependente do contexto (FORTUNATO, 2010), parece ser consenso na literatura que quando se consideram comunidades hierárquicas, todos os membros de uma comunidade de primeiro nível, devem fazer parte de uma das comunidades que compõe a primeira, como observado nos trabalhos de Fortunato (2010) e Shen et al. (2009). I.e.: nenhum vértice pertence exclusivamente a uma comunidade sem pertencer a alguma das sub comunidades. Alternativamente claro, o exemplo da Figura 3 mostra que a implementação de Girvan e Newman (2002) (quadrante superior direito) é capaz de produzir partições recursivas (note-se a distinção entre uma cobertura e uma partição).

Essa distinção entre cobertura e grafo implica também na definição de comunidades sobrepostas. Em sistemas do mundo real que produzem redes complexas, é possível que comunidades compartilhem vértices pois alguma parte de um sistema é componente em dois grupos estruturalmente significantes (SHEN et al., 2009). Diz-se de duas comunidades que compartilham vértices que elas são comunidades sobrepostas.

O método de detecção de comunidades por K-cliques oferece alguma inspiração no

entendimento das propriedades de comunidades sobrepostas. Fortunato (2010) descreve que a forma como esse método trabalha é pivotando subgrafos completos do grafo. Isso é, dado que um K-clique é um subgrafo completo de k vértices, se dois k-cliques compartilham k-1 vértices, todos os K+1 vértices fazem parte de uma mesma comunidade. Com isso é possível propor que uma cobertura ideal deveria priorizar comunidades com grandes subgrafos completos internamente, mas de que os vértices da intersecção de duas comunidades deveriam participar de k-cliques distintos, preferencialmente não estando adjacentes. A ideia por trás disso é que se a intersecção de duas comunidades deveria ser parte da periferia das respectivas comunidades (FORTUNATO, 2010). Se a intersecção fosse tão densamente conexa quando o centro das duas comunidades, esses vértices não seriam mais valores intersectados entre duas comunidades distintas, e as comunidades seriam apenas uma só.

2.3 ESTADO DA ARTE

Existe uma literatura muito prolífica de aplicações dos conceitos de redes complexas, como por exemplo o trabalho de Stegehuis, Hofstad e Leeuwaarden (2016), que faz uma análise do espalhamento de doenças em uma rede com comunidades, onde é demonstrado que a presença das comunidades tem um efeito significativo. Muitos métodos para a detecção de comunidades foram propostos, como fica evidente na ampla revisão feita por Fortunato (2010). Por fim, existe uma literatura também cobrindo diferentes modelos para a geração de redes complexas com comunidades, apesar de bastante mais escassa.

2.3.1 RTG: a recursive realistic graph generator using random typing

Akoglu e Faloutsos (2009) desenvolveram um modelo que gera redes complexas com uma série de proporções que conhecidamente ocorrem em sistemas do mundo real. Isso é, construindo grafos que se assemelhem aos produzidos pelos sistemas do mundo real. O modelo também demonstradamente produz grafos com a presença de comunidades.

A implementação realizada por Akoglu e Faloutsos (2009) se baseia em um gerador de arestas que tem as probabilidades tendenciosas. Esse gerador é o que os autores chamam de um teclado recursivo, na realidade é uma matriz de possibilidades de escolha de uma característica discreta para a origem e o destino em simultâneo. Nominalmente, os vértices são uma sequência aleatória de caracteres de um conjunto finito de possibilidades, é repetidamente escolhido uma letra para o destino e uma para a origem simultaneamente. Com um parâmetro controlando um reforço que é feito para que a célula da matriz

escolhida a cada interação seja da diagonal principal, existe uma tendencia de que vértices adjacentes tenham as mesmas letras nas mesmas posições.

Essas regras simples são o bastante para que o modelo de Akoglu e Faloutsos (2009) tenha como emergentes algumas das propriedades desejáveis em um modelo de geração de redes complexas. Além das proporções, mundo pequeno, anexação preferencial e homofilia, o sistema de Akoglu e Faloutsos (2009) gera comunidades homogêneas.

Existe também um interesse relevante em quanto os algoritmos de geração de redes complexas precisam em tempo. Nesse quesito, a implementação de Akoglu e Faloutsos (2009) apresenta algumas das características mais desejáveis, ele é totalmente paralelizável, significando que para a construção de um grafo com o dobro de arestas, é possível dobrar a quantidade de recursos de processamento e assim dobrar a quantidade de arestas produzidas em um tempo constante.

2.3.2 Generating Attributed Networks with Communities

Largeron et al. (2015) apresenta um modelo algorítmico de geração de redes complexas com explícita e deliberada para quais condicionantes são utilizadas para afetar quais propriedades. Para isso, em uma fase inicial gera-se uma nuvem de pontos com uma distribuição aleatória e uma amostra dessa população é usada para inicializar as comunidades. Essa amostragem é processada em um algoritmo k-means, gerando os clusters iniciais, e as arestas iniciais são geradas. Uma segunda fase processa os demais vértices, escolhendo qual a comunidade serão inseridos se baseando na distância euclideana (homofilia), e gerando os vértices baseado na distribuição de graus. Numa última fase, opcional, é realizada a introdução de novas arestas, essas arestas são escolhidas de forma a fecharem triângulos, para aumentar o coeficiente de clusterização C.

Notadamente, a modelagem de grafo utilizada por Largeron et al. (2015) é $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathcal{A})$ onde \mathcal{A} é um conjunto de atributos dos vértices vértices, de forma que cada $v \in \mathcal{V}$ é um vetor de valores v_A . A modelagem tem acompanhando o grafo também um conjunto \mathcal{P} , composto por conjuntos de vértices, isolando assim as partições. Essa abordagem oferece uma funcionalidade bastante desejável, que é gerar um catálogo de qual vértice pertence a qual comunidade, dessa forma criando um "ground truth" contra o qual o desempenho de alguns algoritmos pode ser testado. Considerando os trabalhos que utilizam análise de redes complexas como Stegehuis, Hofstad e Leeuwaarden (2016), a possibilidade regerar um grafo com características topológicas conhecidas, podendo-se manipular o coeficiente de clusterização por exemplo, existem um conjunto de possíveis análises com

relevância acadêmica. Para muitas dessas análises, as possibilidades de parametrização do modelo de Largeron et al. (2015) parece ser interessante. É feita também uma discussão de performance por parte de Largeron et al. (2015), mas é possível fazer algumas críticas a forma como o modelo foi desenhado, que previnem a paralelização do processo de construção dos grafos.

3 MODELO

Este trabalho propõe um modelo algorítmico de geração de redes complexas que produza grafos mais realistas. Realista nesse contexto é entendido como tendo a presença de um conjunto de propriedades que se observam em grafos do mundo real. A proposta desse trabalho é a extensão do modelo de Largeron et al. (2015) para a construção de grafos em que se apresentem também as propriedades de comunidades hierárquicas e comunidades sobrepostas. A modelagem proposta se baseia na construção de uma cobertura (em oposição á construção de uma partição) recursiva, de forma semelhante ao que é produzido pelo algoritmo de detecção proposto por Shen et al. (2009).

3.1 HIPÓTESE

Esse trabalho se propõe a validar se o modelo a descrito a baixo satisfaz um conjunto de propriedades desejáveis. Para tanto, estende-se a representação clássica de grafo para a inclusão de uma cobertura, bem como a delimitação dos vértices como vetores em um espaço de p dimensões.

3.1.1 A Representação do grafo

O model gera um grafo com atributos e uma cobertura de comunidades hierarquicamente dispostas.

$$\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n)$$

$$\mathcal{V} \subset \mathbb{Q}^p$$

$$\mathcal{E} \subset \{ v_1, v_2 \mid v_1 \in \mathcal{V}, v_2 \in \mathcal{V} \}$$

$$C_0 \subset \{ v \mid v \in \mathcal{V} \}$$

$$C_n = \{ C_{n-1_0}, C_{n-1_1}, \dots, C_{n-1_m} \}$$
(3.1)

Os vértices em \mathcal{V} são uma nuvem de pontos em um espaço de p dimensões, cada um sendo um vetor com p valores racionais (representados com ponto flutuante). As arestas em \mathcal{E} são simples pares não ordenados de vértices. A cobertura C_n é uma estrutura recursiva de conjuntos com n níveis, onde o conjunto C_n é composto por m conjuntos C_{n-1} . No último níveo o conjunto C_0 é composto por vértices do grafo, esses conjuntos são as comunidades folha, significando que elas não são compostas por outras comunidades.

Essa estrutura recursiva é a representação das comunidades hierárquicas, onde os vértices que pertencem a uma comunidade C, denotado V_C são os membros do conjunto união dos membros de C, isso é, $\bigcup_{S \in c} V_S$. Como característica dessa modelagem, os vértices da comunidade representada por C_n são a totalidade dos vértices do grafo, portanto $V_{C_n} = \mathcal{V}$. Isso implica que para qualquer vértice em \mathcal{V} , ele deve de estar presente pelo menos uma comunidade folha. Ao estar presente em uma comunidade folha, o vértice é considerando também parte de todas as comunidades compostas por esta comunidade folha.

A cardinalidade de cada um dos conjuntos que formam a cobertura é variável de acordo com o nível, isso é, dado um nível x todas as coberturas C_{n-x} possuem a mesma quantidade de elementos, mas conjuntos de níveis distintos podem possuir quantidades de elementos distintas. É considerada também a existência de um vetor, denotado K, em um espaço de n-1 dimensões, que denota a cardinalidade das coberturas compostas por outras coberturas. Todas as comunidades do grafo \mathcal{G} contém pelo menos um membro.

Uma característica de notação é a função flat que mapeia uma comunidade para um conjunto de quais as comunidades que a compõe. Para efeito de notação flat (C_n) é um conjunto com todas as comunidades do grafo, incluindo a comunidade global. E o mapa L, que relaciona cada comunidade com a quantidade de ancestrais que a comunidade possui, ou seja, com a quantidade de comunidades que ela compõe. As notações utilizadas serão L_C , leia-se nível de C, ou L, leia-se níveis. A raiz da cobertura é o nível zero $(L_{C_n} = 0)$ e a o nível de um nó folha é igual a n $(L_{C_0} = n)$ As características que devem ser verdadeiras se um grafo for representado nesta modelagem encontram-se descritas no Quadro 1.

Além dessa estruturação de \mathcal{G} , o modelo faz uso de uma segunda representação do grafo, denotada $\mathcal{G}_p = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n, R)$. Ela representa um estado parcial do grafo sendo gerado, neste estado parcial o grafo não necessariamente é conexo e vértices com grau zero não fazem parte de nenhuma comunidade definida na cobertura C_n . Nessa representação também é incluso um novo dado R, que identifica os representantes de uma determinada comunidade, isso é, os membros eleitos durante o processo com quem se compara um vértice v ao considerar introduzir este à comunidade.

3.1.2 Propriedades desejáveis do modelo

Largeron et al. (2015) implementa um modelo algorítmico de geração de redes complexas que mantém uma série de propriedades desejáveis. Como a implementação proposta se baseia no modelo de Largeron et al. (2015), é desejável que as propriedades

Quadro 1 – Características da modelagem

| Característica | Formalismo |
|--|--|
| Para toda a comunidade C , se ela não for folha, a função flat dela é a união de C com a função flat de seus componentes. | $\forall C(L_C < n \implies \text{flat}(C) = C \cup \bigcup_{S \in C} \text{flat}(S))$ |
| Para toda a comunidade C , se ela for folha, a função flat dela é um conjunto consigo. | $\forall C(L_C = n \implies \text{flat}(C) = \{C\})$ |
| A comunidade raiz engloba todos os vértices do grafo. | $V_{C_n} = \mathcal{V}$ |
| Para todas as comunidades C , se C não for folha, os vértices englobados em C são a união dos vértices englobados em seus componentes | $\forall C(L_C > 0 \implies V_C = \bigcup_{S \in C} V_S)$ |
| Para todas as comunidades C , se C for folha, os vértices englobados em C seus componentes | $\forall C(L_C = 0 \implies V_{C_0} = C_0)$ |
| Para todos os vetores do grafo, existe uma comunidade folha a qual ela pertence | $\forall v (\exists C (v \in C \land L_C = n))$ |
| Pra todo vértice v , pra todo l , existe uma comunidade C que contenha o vértice e seja do nível l | $\forall v \forall l (\exists C (v \in V_{C_x} \land L_C = l))$ |
| Todos as comunidades não folha tem a mesma quantidade de componentes se forem do mesmo nível, a cardinalidade de uma comunidade não folha é expressa num vetor K | $\exists K(K \in \mathbb{I}^{n-1} \land \forall C(L_C < n \implies K_{L_C} = C))$ |
| Toda a comunidade tem pelo menos uma componente e engloba pelo menos um vértice | $\forall C(C \ge 1 \land V_C \ge 1)$ |

Fonte: elaborado pelo autor

sejam mantidas. Nominalmente, são elas:

- a) mundo pequeno: O diâmetro das redes complexas geradas pelo modelo deve ter uma relação logarítmica com a quantidade de vértices no modelo;
- b) distribuição de graus em lei de potência: Os graus dos vértices devem estar distribuídos com uma lei de potência
- c) homofilia: O grafo gerado deve apresentar uma tendência de priorização da adjacência com vértices semelhantes;
- d) estrutura de comunidades: O grafo gerado deve de ter comunidades, conforme etiquetadas na cobertura, de forma que todo vértice pertença a uma ou mais comunidades, e as comunidades se organizem em uma estrutura hierárquica;
- e) comunidades homogêneas: As comunidades devem ser coesas não apenas na perspectiva topológica, mas em similaridade.

Para tanto, a abordagem do modelo é a construção explicita das comunidades com base na similaridade dos vértices. Para isso, a similaridade dos vértices é definida com base na distância euclideana dos vetores de atributos dos vértices. As arestas do grafo são definidas com base nas comunidades das quais o vértice faz parte.

Essa implementação visa garantir a homogeneidade das comunidades e a homofilia ao selecionar os membros das comunidades estocasticamente preferindo vértices com menor distância euclideana. A construção das arestas é feita priorizando a introdução de vértices a vértices com mais arestas dentro da comunidade, de forma a reforçar a distribuição de graus em lei de potência e a estrutura de comunidade, bem como a propriedade de mundo pequeno.

É introduzida também a conceitualização de ortogonalidade de comunidades. É trivial a identificação, em sistemas do mundo real, de grupamentos que se sobrepõe devido ao compartilhamento de características distintas, isso é, cada uma das comunidades na área sobreposta tem como definição uma característica distinta. Em uma definição de comunidade por semelhança de vértice, dado um sistema onde os vértices são caraterizados por dois ou mais características independentes, cada comunidade pode ter uma semelhança não em função da soma das características, mas de uma categorização em específico. Considerando comunidades de indivíduos caracterizados por sua área de atuação e por sua crença religiosa, assumindo que não há uma influencia direta entre essas duas características, uma comunidade de membros de uma religião poderia estar sobreposta a uma comunidade de profissionais de uma determinada área. Essas duas comunidades seriam ortogonais.

3.2 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO

A implementação do modelo se divide em três etapas, que consumindo um conjunto de parâmetros produzem um grafo conforme a representação previamente descrita. As etapas inicialmente constroem uma nuvem de pontos e os cluster iniciais para as comunidades. Com esses vértices e as comunidades iniciais, iterativamente são adicionados novos vértices ás comunidades, e são geradas arestas nesse processo. Por fim, as arestas finais são adicionadas.

3.2.1 Parâmetros

As propriedades descritas podem ser controladas utilizando uma série de parâmetros. Os parâmetros seguem descritos no Quadro 2. Eles são uma adaptação bastante direta dos parâmetros do modelo de Largeron et al. (2015), a diferença mais significativa é no parâmetro K, que é um vetor multi dimensional de inteiros maiores que 1. Isso se deve à construção de uma árvore de comunidades hierarquicamente aninhadas.

Quadro 2 – Características da modelagem

| Parâmetro | Descrição |
|---|--|
| $N \in \{ n \in \mathbb{N} \mid n \ge 1 \}$ | Quantidade de vértices. |
| $E_{\text{wth}}^{\text{max}} \in \{ i \in \mathbb{N} \mid i \ge 1 \}$ | Número máximo de arestas (internas a comunidade) inseridas a um vértice ao introduzir ele a uma comunidade. |
| $E_{\text{btw}}^{\text{max}} \in \{ i \in \mathbb{N} \mid i \ge 1 \}$ | Número máximo de arestas (externas a comunidade) inseridas a um vértice ao introduzir ele as comunidades. |
| $MTE \in \{ m \in \mathbb{N} \mid m \ge 1 \}$ | Número mínimo de arestas no grafo produzido. |
| $\mathcal{A} \in \{ a \in \mathbb{Q} \mid a > 0 \}^{ \mathcal{A} }$ | Vetor de desvios padrão dos atributos dos vértices. |
| $K \in \{k \in \mathbb{N} \mid k \ge 2\}^{ K }$ | Vetor de quantidade de comunidades por nível |
| $\theta \in \{ t \in \mathbb{Q} \mid 0 \ge t \ge 1 \}$ | Valor de interpolação entre homogeneidade por distância euclideana e distância por ortogonalidade de comunidade. |
| $NbRep \in \{ n \in \mathbb{N} \mid n \ge 1 \}$ | Número de representantes por comunidade. |

Fonte: elaborado pelo autor

3.2.2 Inicialização do grafo

A primeira fase do algoritmo é a inicialização dos vértices e das comunidades. Conforme definido no Quadro 3.

Quadro 3 – Fase 1 do modelo

```
Output: \mathcal{G}_p = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n, R)
 1
       \mathcal{V} \leftarrow \emptyset
 2
       \mathcal{E} \leftarrow \emptyset
 3
        while |\mathcal{V}| < N do
 4
        begin
 5
                  v \leftarrow (\mathcal{N}(0, \sigma_{\mathcal{A}_0}), \mathcal{N}(0, \sigma_{\mathcal{A}_1}), \dots, \mathcal{N}(1, \sigma_{\mathcal{A}_{|\mathcal{A}|-1}}))
 6
                  \mathcal{V} \leftarrow \mathcal{V} \cup \{v\}
 7
       end
 8
        Function cover (l, p)
 9
        begin
10
                   if l = |K| then
11
                  begin
12
                              for v \in p do
13
                             begin
14
                                        p' \leftarrow \{ v' \in p \mid \{ v, v' \} \notin \mathcal{E} \land \{ v, v' \} \notin \mathcal{E} \land v' \neq v \}
15
                                        s \leftarrow \text{Rand}_{\text{Uni}}([1, |p'|])
16
                                        for v' \in \text{Sample}(p', s) do \mathcal{E} \leftarrow \mathcal{E} \cup (v, v')
17
                             end
18
                             return p
19
                  \quad \text{end} \quad
20
                  s \leftarrow \text{NbRep} \times \prod_{i=l}^{|K|-1} K_i
21
                  p' \leftarrow \text{Sample}(p, \min \{ s, |p| \})
22
                  k \leftarrow K \text{ Medoids}(p', K_l)
23
                  c \leftarrow \{ \operatorname{cover}(l+1,q) \mid q \in k \}
24
                  p' \leftarrow \{ \operatorname{Rand}_{\operatorname{Uni}}(c') \mid c' \in V_c \}
25
                  \mathcal{E} \leftarrow \mathcal{E} \cup \{ \{ p'_i, p'_{i+1} \} \mid i \in \{1, 2, \dots \mid p' \mid -1 \} \}
26
                   return c
27
28
        end
        C_n = \operatorname{cover}(0, \mathcal{V})
29
30
        for C_i \in \text{flat}(C_n) do
31
                   if C_i = \operatorname{flat}(C_i) then R_{C_i} \leftarrow C_i
32
                   else R_{C_i} \leftarrow \emptyset
33
       \mathcal{G}_p \leftarrow (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n, R)
34
        return \mathcal{G}_p
35
```

Fonte: elaborado pelo autor

O processo da inicialização se divide em gerar a nuvem de pontos e inicializar as comunidades. A linha quatro inicializa \mathcal{V} com um conjunto vazio, e o laço de repetição das linhas 6 á 10 insere vetores neste conjunto enquanto ele tiver menos de N membros. O vetor em si é definido como uma série de distribuições aleatórias com o centro em zero e o desvio padrão informado pelo parâmetro \mathcal{A} .

O processo de geração das estruturas de comunidade é mais complexo, exigindo uma função para possibilitar recursividade. A função cover tem como condicionante a característica de que a comunidade que se está processando é ou não folha, isso é, se ela possuirá ou não subdivisões internas. Na linha 14 é feita essa ramificação, considerando que l, um parâmetro de controle que é incrementado a cada chamada recursiva. Se l for igual á cardinalidade de k, isso indica que se está processando o último nível a ser gerado, uma folha, o comportamento deixa de ser recursivo.

Este último nível gerado compõe um conjunto de arestas entre os membros da comunidade folha. Nas linhas 16 até 20 é iterado sobre os vértices, os vértices com quem é possível formar arestas, nomeado p', são definidos como os vértices em p diferentes de v com quem v não é adjacente. Nas linhas 17 e 18 uma quantidade aleatória das arestas possíveis são construídas.

As funções $Rand_{Uni}$ e Sample são duas funções de escolha aleatória uniformes. Sample(P, l) escolhe um sub conjunto de P com l elementos uniformemente distribuído, i.e., todos os membros de P tem a mesma chance de estar presente no conjunto construído. $Rand_{Uni(P)}$ funciona da mesma forma, mas retorna um único membro de P.

No caso de não ser uma comunidade folha, o processo de construção da comunidade encontra-se nas linhas 22 até 28. Para isso primeiramente é definido um tamanho de amostragem s. Esse tamanho é definido como um produto dos valores de K, filtrando para o nível atual em diante. Com isso, buscasse uma amostra p', com tamanho s ou o valor máximo possível se s for maior que a quantidade de membros em p.

Com essa amostra, é realizado um agrupamentos utilizando o algoritmo K Medoids (LARGERON et al., 2015). Nesses clusters iniciais é realizada a chamada recursiva da função cover, que faz a construção da comunidade composta pelos vértices do cluster. Com as comunidades definidas e agrupadas no conjunto c, que representa a comunidade que se está processando, é realizada a introdução de arestas para que a comunidade seja conexa. Assumindo que todas as comunidades geradas por meio da função cover sejam conexas, é construído um caminho que liga um membro de cada comunidade. A função se conclui retornando a comunidade criada.

A chamada original para a função $\operatorname{cover}(l,p)$ é feita com l sendo zero e p sendo a nuvem de pontos. Por fim, o processo também realiza a atribuição dos representantes de cada comunidade folha como sendo a totalidade dos membros da comunidade, e mantendo as demais comunidades sem representantes.

3.2.3 Processamento dos vértices

O processamento dos vértices, isso é, a sistemática introdução deles á comunidades bem como a definição de arestas que reforcem a comunidade considerando os membros introduzidos, é esperado que seja mais custoso. Esse processo tem um forte componente do custo relacionado á quantidade de vértices do grafo final, isso é, o parâmetro N. Para tanto, as principais distinções do modelo proposto para com o modelo de Largeron et al. (2015) são para possibilidade de paralelização do processo.

Quadro 4 – Fase 2 do modelo, construção dos lotes

```
Output: B \subset \{ B' \mid B' \subset \mathcal{V} \}
 1
 3 \mid B' \leftarrow \{ v \in \mathcal{V} \mid \neg \exists v'(\{v, v'\} \in \mathcal{E}) \}
    B_s' \leftarrow (B_s, 2B_s, 4B_s, \dots, \lceil \log_2 \frac{5000}{B_s} \rceil B_s)
      for s \in B'_s do
 7
      begin
 8
               B_i \leftarrow \{ sample(B', s) \}
 9
               B' \leftarrow B' \setminus B_i
10
               B \leftarrow B \cup B_i
11
12
      end
      while |B'| > 5000 do
13
      begin
14
               B_i \leftarrow B \cup \{ sample(B', Rand_{Uni}(5000, 5001, 5002, \dots, 10000)) \}
15
               B' \leftarrow B' \setminus B_i
16
               B \leftarrow B \cup B_i
17
      end
18
      B \leftarrow B \cup B'
19
```

Fonte: elaborado pelo autor

A implementação trabalha com lotes que serão processados sequencialmente, os membros de cada lote serão processados de forma assíncrona. Para isso, as arestas adicionadas no processamento de cada vértice individual não serão consideradas como existentes no processamento de vértices do mesmo lote. No mesmo sentido, os vértices processados individualmente não serão considerados como membros de comunidade alguma enquanto

o lote é processado. Em outros termos, é estabelecido um estado do grafo que será considerado imutável, e cada vértice será processado com o mesmo estado, acumulando as informações geradas no processamento e cada vértice para a construção de um novo estado quando da conclusão de todos os vértices do lote. Para tanto, os lotes são construídos e processados de acordo com o Quadro 4

Os lotes tem tamanhos definidos, o tamanho base B_s é dado pela quantidade total de comunidades $|\text{flat}(C_n)|$. E a sequência de tamanhos B'_s é dada pelas potencias de dois, multiplicadas por B_s , até o primeiro valor que seja maior ou igual a cinco mil. Os lotes gerados depois dessa primeira sequência tem tamanho definido aleatoriamente entre cinco mil e dez mil. O consumo desses lotes para a construção das comunidades hierárquicas e sobrepostas é implementada conforme descrição no Quadro 5.

Quadro 5 – Fase 2 do modelo, processamento dos lotes

```
Output: \mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n)
  1
 2
        Function introduce(v, \mathcal{G}_p)
 3
        begin
 4
                  C_c \leftarrow \text{chooseCommunities}(v, \mathcal{G}_p)
 5
 6
                  t_{\mathcal{E}} \leftarrow \emptyset
  7
                  for C_i \in C_c do t_{\mathcal{E}} \leftarrow t_{\mathcal{E}} \cup \text{edgesWithin}(v, \mathcal{G}_p, C_i, |C_c|)
  8
                  t_{\mathcal{E}} \leftarrow t_{\mathcal{E}} \cup \text{edgesBetween}(v, \mathcal{G}_p, C_c, |t_{\mathcal{E}}|)
 9
                  t_C \leftarrow \{ (v, C_i) \mid C_i \in C_c \}
10
                  return t_C, t_{\mathcal{E}}
11
        end
12
13
        for b \in B do
14
        begin
15
                   for v \in b do # esse laço pode ser realizado paralelamente
16
17
                             t_C, t_{\mathcal{E}} \leftarrow \operatorname{introduce}(v, \mathcal{G})
18
                             T_C \leftarrow T_C \cup t_C
19
                             T_{\mathcal{E}} \leftarrow T_{\mathcal{E}} \cup t_{\mathcal{E}}
20
                  end
21
                  \mathcal{E} \leftarrow \mathcal{E} \cup t_{\mathcal{E}}
22
                  C_n \leftarrow \text{buildCover}(C_n, T_C)
23
                   R \leftarrow \text{electRepresentants}(C_n)
24
       end
25
       \mathcal{G} \leftarrow (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n)
26
        return \mathcal{G}
27
```

Fonte: elaborado pelo autor

possa ser executada paralelamente. Isso é, fazendo uso de um estado $\mathcal{G}_p = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n, R)$ imutável, o processamento de cada vértice de um lote pode ser feito de forma distribuída. Ao final desse processamento, é trivial acumular os dados gerados por cada execução, e com esses dados gerar um novo estado do grafo.

A implementação da função introduce em si se dá pela escolha de um conjunto de comunidades C_c por meio da função chooseCommunities (v, \mathcal{G}_p) , seguido pela geração de arestas. São geradas as arestas internas a comunidade dentro de uma função edgesWithin (v, \mathcal{G}_p, C_i) e as externas ás comunidades edgesBetween $(v, \mathcal{G}_p, C_c, |t_{\mathcal{E}}|)$. Ambas as funções de geração de arestas retornam um conjunto de pares não ordenados.

Assumindo que as implementações dessa funções se dá de forma a reforçar as propriedades desejadas, isso é: as comunidades escolhidas serem estocasticamente selecionadas para que os membros sejam semelhantes ao vértice v; e as arestas criadas reforçarem as características estruturais da comunidade. É esperado que as propriedades de homofilia, comunidades homogêneas, entre outras emerjam naturalmente.

3.2.3.1 Seleção de comunidades

A seleção de comunidades, realizada dentro da função chooseCommunities (v, \mathcal{G}_p) visa reforçar as características de semelhança dos membros das comunidades. Para tanto, a comunidade escolhida deveria, estocasticamente, ter os vértices mais semelhantes ao vértice v. No entanto, para essa comparação não é viável, dado o custo de processamento, comparar todos os vértices já processados com o vértice v. Realiza-se portanto uma amostragem, na qual para cada comunidade é considerado um número de representantes, que devem caracterizar significativamente o perfil dos membros da comunidade.

Os representantes de uma comunidade, denota-se R_C , são, em um primeiro momento definidos como a totalidade dos membros da comunidade se essa for uma comunidade folha. A cada lote processado, o processo de construção de um novo estado para o grafo, realiza uma nova seleção dos representantes de cada comunidade.

Conforme apresentado no Quadro 6, tendo os representantes definidos, é utilizada a função Rand_{PL}, definida por Largeron et al. (2015), para escolher um par ordenado de comunidade e representante. Essa função escolhe um membro de um conjunto ordenado de cardinalidade m com a distribuição $x \mapsto \frac{x^{-2}}{\sum_{i=1}^{m} i^{-2}}$. Para tanto, os pared ordenados de comunidade e representante são ordenados pela função de semelhança d.

$$d(v, v') = (1 - \theta)|v - v'| + \theta|v_a - v'_a|$$
(3.2)

Quadro 6 – Fase 2 do modelo, função chooseCommunities (v, \mathcal{G}_p)

```
Function chooseCommunities(v, \mathcal{G}_p)
P \leftarrow \text{ o conjunto } \{ (C_i, r) \mid C_i \in \text{flat}(C_n) | r \in R_{C_i} \} \text{ ordenado pela função } d
C \leftarrow \text{Rand}_{PL}(P)
(C', C'') \leftarrow (C, C)
\text{while } C' \neq \text{flat}(C') \text{ do } C' \leftarrow \text{Rand}_{PL}(\{ p \in P \mid p_0 \in \text{flat}(C'_0) \land p \neq C' \})
\text{while } C'' \neq \text{flat}(C'') \text{ do } C' \leftarrow \text{Rand}_{PL}(\{ p \in P \mid p_0 \in \text{flat}(C''_0) \land p \neq C'' \land p \neq C' \})
\text{return } \{ C'_0, C''_0 \}
\text{end}
```

Fonte: elaborado pelo autor

Onde θ é o parâmetro do modelo, e a é o eixo em que a comunidade com a qual se contextualiza essa distância é menos esparso. Isso é, a função d é dependente do contexto de qual comunidade se está comparando, e θ controla a proporção entre considerar a distância euclideana ou a diferença em um eixo específico. $\theta = 0$ indicando que é considerada apenas a distância euclideana e $\theta = 1$ indicando que não se considerará ela.

O eixo a utilizado na função d é dependente de comunidade e é definido como a dimensão em que a comunidade é menos esparsa. Para tanto, identifica-se que a função de inercia de um conjunto de pontos, como utilizado por Largeron et al. (2015), pode ser expressa como uma soma da inercia consistindo apenas uma dimensão por vez.

$$\sum_{v \in C} |g - v|^2 = \sum_{a=0}^n \sum_{v \in C} (g_a - v_a)^2$$
(3.3)

Considerando n como o índice do último componente dos vetores em C e g sendo o centro de gravidade de g. O eixo considerado em d é aquele com a menor contribuição para a inercia.

Com a ordenação definida, a função escolhe uma comunidade C á qual adicionar o vértice v. Se essa comunidade for uma comunidade folha, os dois laços de repetição não serão executados e o conjunto $\{C'_0, C''_0\}$ terá apenas uma comunidade (C' = C''). Caso a comunidade possua sub comunidades, o processo de escolha executado iterativamente com as variáveis C' e C'', restringindo para que sejam escolhidas apenas comunidades contidas nas variáveis. É restringido também, na seleção de C'' que este não seja igual à C'.

3.2.3.2 Geração de arestas

O processo de geração das arestas internas às comunidades às quais se está adicionando o vértice se dá conforme descrito no Quadro 7. Primeiramente, é definida uma

quantidade máxima de arestas m como sendo o mínimo entre o parâmetro $E_{\text{wth}}^{\text{max}}$ e a quantidade de vértices já presentes na comunidade C. Essa quantidade máxima é escalonada de acordo com a quantidade de comunidades em que o vértice v será adicionado, o máximo é o próximo inteiro maior ou igual a enésima raiz de m. A quantidade final de arestas a serem selecionadas é definida com a função Rand_{PL}.

Quadro 7 – Fase 2 do modelo, função edgesWithin (v, \mathcal{G}_p, C, n)

```
Function edgesWithin(v, \mathcal{G}_p, C, n)

m \leftarrow \min(E_{\text{wth}}^{\text{max}}, |V_C|)

e \leftarrow \text{Rand}_{\text{PL}}(1, 2, 3, ..., \lceil \sqrt[n]{m} \rceil)

W \leftarrow \emptyset

for i \in \{1, 2, 3, ..., e\} do W \leftarrow W \cup \{\text{Rand}_{\text{EdgeWth}}(V_C \setminus W)\}

return \{\{v, u\} \mid u \in W\}

end
```

Fonte: elaborado pelo autor

Uma quantidade e de arestas é gerada utilizado a função Rand_{EdgeWth}(W), definida por Largeron et al. (2015). Essa função escolhe um vértice u aleatório dentre o conjunto W, utilizando a densidade probabilística descrita na equação 3.4. A probabilidade de escolher um vértice é proporcional a seu grau dividido pela soma dos graus em W.

$$u \mapsto \frac{\deg(u)}{\sum_{u' \in W} \deg(u')} \tag{3.4}$$

As arestas que ligam o vértice v a outros com os quais ele não compartilha comunidades se dá conforme a função $edgesBetween(v, \mathcal{G}_p, C_c, m)$, como descrito no Quadro 8. A função elenca um conjunto p de vértices que podem ser escolhidos. Esse conjunto é a união de todos os representantes de comunidades nas quais o vértice v não está sendo introduzido.

O máximo de arestas é definido como m sendo o mínimo entre a cardinalidade conjunto de adjacências possíveis, a quantidade de arestas internas á comunidades, e o parâmetro $E_{\rm btw}^{\rm max}$. A quantidade de arestas a serem geradas e é definida com a função Rand_{PL}, de zero a m. As arestas em si são construídas com base na função Rand_{EdgeBtw}(W) (LARGERON et al., 2015), que escolhe o representante com o qual o vértice se ligará usando a densidade probabilística descrita na equação 3.5. Ressalta-se que com a adaptação que foi realizada a função d é dependente da comunidade que contextualiza a semelhança

Quadro 8 – Fase 2 do modelo, função $edgesBetween(v, \mathcal{G}_p, C_c, m)$

```
Function edgesBetween(v, \mathcal{G}_p, C_c, n)
1
2
                p' \leftarrow \text{flat}(C_n) \setminus C_c
               p \leftarrow \bigcup_{C \in p'} \left\{ \left\{ C, r \right\} \mid r \in R_C \right\}
3
               m \leftarrow \min(E_{\text{btw}}^{\text{max}}, |p|, n)
4
                e \leftarrow \text{Rand}_{\text{PL}}(0, 1, 2, \dots, m)
5
                W \leftarrow \emptyset
6
                for i \in \{1, 2, 3, \dots, e\} do W \leftarrow W \cup \{\text{Rand}_{\text{EdgeBtw}}(p \setminus W)\}
7
                return \{\{v, u_0\} | u \in W\}
8
     end
```

Fonte: elaborado pelo autor

entre os vértices.

$$u \mapsto \frac{d(v, u)^{-1}}{\sum_{u' \in W} d(v, u')^{-1}}$$
 (3.5)

3.2.3.3 Atualização do estado

A parte final de cada iteração de lote de vértices, é a construção de um novo estado, isso é, a redefinição de \mathcal{G}_p para que este seja usado no processamento do lote que sucede o que se está terminando de processar. A expansão das arestas \mathcal{E} é apenas a união das arestas geradas no processamento de cada vértice. A reconstrução da cobertura C_n é trivial, abstraído para dentro da função buildCover (C_n, T_C) , a árvore de comunidades mantém a mesma topologia, mas nas comunidades folhas são adicionados os vértices conforme mapa em T_C .

A eleição dos novos representantes apresenta um ponto de interesse mais relevante, considerando o impacto que a escolha de quais vértices representam a comunidade pode ter. A alternativa utilizada neste trabalho é a seleção dos representantes mais próximos ao centro de gravidade da comunidade. A quantidade de representantes é o menor valor entre NbRep e $|V_C|$.

Destaca-se que esses representantes não precisam de ser vértices do grafo, já que são utilizados apenas para a comparação de distância. Em implementações alternativas poderia ser utilizado o centro de gravidade. Alternativamente, poderia se utilizar pontos que maximizam a distância do centro de gravidade, para que os representantes sejam exemplos da periferia da comunidade.

3.2.4 Adição final de arestas

Com a conclusão da segunda fase do algoritmo, tem-se um grafo conexo com uma cobertura que engloba todos os vértices de forma que não hajam comunidades vazias. Para todos os efeitos, o grafo gerado até este ponto já tem a maioria das propriedades que o modelo se propõe a gerar. Esta etapa final de geração de arestas é executado para o reforço dessas características.

Quadro 9 – Fase 3 do modelo, adição final de arestas

```
Output: \mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, C_n)
 2
      l \leftarrow \max(\{L_C \mid C \in \text{flat}(C_n)\})
 3
       while |\mathcal{E}| < MTE \land \mathcal{G} \neq K_{|\mathcal{V}|} do
 4
       begin
5
                  T \leftarrow \{\{v, v'\} \mid v, v', v'' \in \mathcal{V} \mid \{v, v''\} \in \mathcal{E} \land \{v', v''\} \in \mathcal{E} \land \{v, v'\} \notin \mathcal{E}\}
 6
                  T' \leftarrow \{ e \in T \mid \exists C \in \text{flat}(C_n) (\forall v \in e(v \in C) \land L_C = l) \}
 7
                  if T' = \emptyset then l \leftarrow l - 1
 8
                  else \mathcal{E} \leftarrow \mathcal{E} \cup \{ \operatorname{Rand}_{\operatorname{Uni}}(T') \}
 9
      end
10
```

Fonte: elaborado pelo autor

O processo descrito no Quadro 9 inicia identificando o nível máximo que uma comunidade pode possuir, l. Com esse valor, é iniciado um processo iterativo, enquanto forem encontradas triplas conexas dentro de comunidades com este nível, ele se mantém. Quando todas as comunidades desse nível forem subgrafos completos o valor de l é decrementado.

O laço em si itera enquanto a quantidade de arestas no grafo não for igual ao parâmetro MTE e o grafo não for um grafo completo. Isso é, se o parâmetro denotar uma quantidade de arestas superior ao que é possível com a quantidade de vértices, este não serás um laço infinito.

O processo interno ao loop é a identificação das arestas que se adicionadas ao grafo completariam mais um triângulo. Depois, essas arestas são filtradas para considerar apenas as que seriam internas a alguma comunidade de nível l. Se T' é vazio, isso indica que todas as comunidade de nível l ou superiores são grafos completos (ou seriam grafos desconexos, o que é trivialmente demonstrável como impossível neste ponto do algoritmo). Neste caso, l é decrementado para que se considerem as comunidades hierarquicamente superiores a estas. Caso T' seja não vazio, é escolhido uma aresta aleatória para ser preenchida no grafo.

Essa implementação deliberadamente otimiza o coeficiente de clusterização, definido na equação 2.3. Assumindo que as propriedades de homofilia estejam presentes, esse processo deveria de ter pouco ou nenhum impacto na mesma, pela característica transitiva da semelhança como distância euclideana. Isso é, qualquer aresta adicionada nesse processo que ligue dois vértices a e b que compartilham um vizinho c não vai ter uma distância maior que soma das duas arestas já presentes no grafo.

$$0 \le d(a,b) \le d(a,c) + d(b,c) \tag{3.6}$$

Da mesma forma, o impacto desse processo na distribuição de graus intuitivamente parece ser mínimo. A proporção de triplas conexas a qual um dado vértice v é diretamente proporcional ao grau de v. No entanto é possível demonstrar que valores mais elevados de MTE tem o efeito de diminuir a quantidade de vértices com grau um.

Da perspectiva das características estruturais de uma comunidade, é intuitiva também a compreensão de que valores razoáveis do parâmetro reforçarão a estrutura, construindo novas arestas nas comunidades folha. Mas também é perceptível que a geração de arestas a ponto de transformar comunidades que não são folha em cliques faz com que a estrutura das comunidades folha contidas nesta sejam destruídas. Mas essas influências da parametrização são melhor exploradas com resultados experimentais.

4 RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Foi realizada uma implementação do algoritmo descrito na linguagem python 3.8. A partir desse, foram executados os testes para avaliar a presença das propriedades desejadas no modelo. Para os testes iniciais, foram utilizados valores descritos no Quadro 10.

Quadro 10 – Parâmetros básicos

| N | $E_{\mathrm{wth}}^{\mathrm{max}}$ | $E_{\mathrm{btw}}^{\mathrm{max}}$ | MTE | \mathcal{A} | K | θ | NbRep |
|------|-----------------------------------|-----------------------------------|------|---------------|--------|----------|-------|
| 1000 | 45 | 3 | 7000 | (1, 1) | (6, 2) | 1/10 | 20 |

Fonte: elaborado pelo autor

4.1 COMUNIDADES

A presença de comunidades como uma propriedade de redes complexas está tipicamente atrelada a ideia de haverem mais arestas internas a uma comunidade do que arestas que atravessem a fronteira entre duas comunidades. Esse entendimento é solidificado na função de modularidade Q de Girvan e Newman (2002), conforme descrito na equação 2.1. Shen et al. (2009) descreve uma adaptação, modularidade estendida EQ, para a aplicação em coberturas (em oposição a partições), conforme equação 2.2. Essa aplicação em coberturas destaca a possibilidade de comunidades sobrepostas. A aplicação de EQ recursivamente, de forma a considerar o subgrafo com os membros da comunidade dividido entre as comunidades que a compõe descreve a propriedade de comunidades hierárquicas.

$$O_i = \left[\sum_{c \in C_n \mid L_c = i-1} V_c \right] - \left[\sum_{c \in C_n \mid L_c = i} V_c \right]$$

$$(4.1)$$

A presença de sobreposição nas comunidades pode ser medida como um função O_i que calcula a quantidade de vértices presentes em mais de uma comunidade de nível i. O valor é dado pela diferença da quantidade de vértices em comunidades de nível i e a quantidade de vértices em comunidades de nível i+1. O efeito disso é que vértices que estejam em duas comunidades distintas de nível i+1 ou menores, serão contados duas vezes, mas os que pertencem a duas comunidades de nível i ou menores serão compensadas. Por fim, a soma de O_i para todos os níveis será anotada como O.

Observa-se na Tabela 1 os valores de EQ para 10 execuções do modelo com os parâmetros básicos (B_0 a B_9). Para as comunidades de primeiro nível, isso é, as que são compostas por sub comunidades, a função gera uma média de aproximadamente 0,8 o que

indica uma estrutura de comunidade muito expressiva. No segundo nível, o valor médio foi de aproximadamente 0,6 indicando comunidades menos expressivas mas ainda presentes.

Tabela 1 – Modularidade com os parâmetros básicos

| Execução | EQ_1 | EQ_2 | O_1 | O_2 |
|----------|---------|---------|-------|-------|
| B_0 | 0.71695 | 0.79204 | 16 | 235 |
| B_1 | 0.72441 | 0.79760 | 18 | 211 |
| B_2 | 0.70039 | 0.79391 | 14 | 252 |
| B_3 | 0.73633 | 0.79622 | 13 | 190 |
| B_4 | 0.71758 | 0.78549 | 26 | 235 |
| B_5 | 0.73179 | 0.79201 | 33 | 224 |
| B_6 | 0.74779 | 0.79828 | 15 | 213 |
| B_7 | 0.73912 | 0.80411 | 20 | 200 |
| B_8 | 0.74237 | 0.80504 | 19 | 194 |
| B_9 | 0.71339 | 0.79877 | 17 | 237 |
| Média | 0.73701 | 0.79635 | 19 | 219 |

Fonte: elaborado pelo autor

A Tabela 1 indica também os valores de sobreposição entre comunidades de primeiro (O_1) e segundo nível (O_2) . Os valores indicam quem em média, dos mil vértices presentes em um grafo como o observado, dezessete estarão em duas comunidades de primeiro nível e em média duzentos e vinte e cinto vértices estarão em duas comunidades de segundo nível. O que esses valores indicam é que até vinte e quatro por cento dos vértices, para essa parametrização, estariam distribuídos em mais de uma comunidade.

Naturalmente, a escolha de valores distintos para os parâmetros pode ser feita para reforçar as características desejáveis. Limitando o valor de MTE e considerando uma estrutura de comunidades gerada com K=(9,2,2,2), obteve-se os dados distritos na Tabela 2. Observa-se que a redução do número mínimo foi feita para evitar a descaracterização das comunidades folha, considerando que o valor de K gera 72 dessas.

O incremento nos valores obtidos é atribuível à existência de mais comunidades para as quais distribuir os vértices, não apenas em profundidade mas em diâmetro também. Descartando-se a possibilidade de ser a alteração do valor de MTE ao realizar testes com este zerado mas mantendo o K padrão. Em compensação, essa parametrização faz com que a escolha de comunidades folha se torne muito mais provável, anulando a possibilidade de comunidades sobrepostas. Esse comportamento ocorre por no processo de escolha das comunidades a ordenação das comunidades se dá por escolher quais comunidades tem os

| Execução | EQ_1 | EQ_2 | EQ_3 | EQ_4 | O |
|------------------|---------|---------|---------|---------|---|
| $\overline{M_0}$ | 0.96702 | 0.95833 | 0.93128 | 0.87673 | 0 |
| $\overline{M_1}$ | 0.96721 | 0.95979 | 0.93388 | 0.88221 | 0 |
| $\overline{M_2}$ | 0.96514 | 0.95933 | 0.93357 | 0.87722 | 0 |
| $\overline{M_3}$ | 0.96541 | 0.95711 | 0.92974 | 0.87888 | 0 |
| | | | | | |

Tabela 2 – Modularidade com K = (9, 2, 2, 2)

Fonte: elaborado pelo autor

0.95868

0.95865

0.93582

0.93286

0.88090

0.87919

0.96672

0.96630

representantes mais próximos, e as comunidades folha por serem em maior quantidade são muito mais prováveis de serem escolhidas.

Outros testes descritos na Tabela 3, onde com MTE = 0 realizou-se uma exploração dos valores de EQ para diversos valores em K. Note-se o caso M_9 como contra exemplo do impacto de K na modularidade, bem como o exemplo M_6 , que nas comunidades de primeiro teme EQ = 0, 5.

Tabela 3 – Modularidade com variação de K

| Execução | K | Média de EQ |
|------------------|-----------|---------------|
| M_5 | (5, 5, 5) | 0.77889 |
| M_6 | (2,4,8) | 0.77721 |
| $\overline{M_7}$ | (8, 2, 4) | 0.92434 |
| $\overline{M_8}$ | (100) | 0.95152 |
| M_9 | (3) | 0.49024 |

Fonte: elaborado pelo autor

Alternativamente, é possível modificar significativamente os valores obtidos para a modularidade com os parâmetros $E_{\rm btw}^{\rm max}$ e $E_{\rm wth}^{\rm max}$. Na execução M_{10} utilizou-se os demais parâmetros nos valores padrão, mas com $E_{\rm btw}^{\rm max}=45$ e K=(2,2), para um EQ médio de 0,46.

4.2 HOMOFILIA E HOMOGENEIDADE

 M_4

Média

Homogeneidade é a principal propriedade das comunidades definidas por semelhança de vértices, ela está intimamente ligada à propriedade de homofilia. Assumindo a distância euclideana como função de semelhança, a forma natural de medir a homogeneidade das

comunidades descritas por uma cobertura é a inercia e a razão da inercia entre diferentes níveis de comunidades.

4.2.1 Inercia

Inercia, definida como a soma dos quadrados das distancias de cada membro de um conjunto com a média do conjunto, sumariza quão semelhantes ou dissemelhantes os membros são. A razão entre a inercia em diferentes níveis é facilmente extrapolada do conceito de razão de inercia introduzido por Largeron et al. (2015). Assumindo que as comunidades de uma rede complexa sejam homogêneas e hierárquicas, é natural que as comunidades mais específicas (sub comunidades), tenham menos diversidade que as comunidade mais generalistas. Tendo em vista que a inercia calculada com uma cobertura deve levar em conta que vértices serão contados múltiplas vezes se estiverem presentes em múltiplas comunidades, a inercia para um nível l segue descrita na equação 4.2. Considerando que C_l é o conjunto de comunidades de nível l.

$$I_{l} = \sum_{c \in C_{l}} \frac{\sum_{v \in c} |v - g_{c}|^{2}}{|c|}$$
(4.2)

 I_l apresenta uma forma de comparação entre diferentes coberturas, de forma a identificar qual seria mais homogênea dado um mesmo conjunto do vértices. A extensão do conceito de inercia para a razão entre a inercia aplicada a dois níveis distintos se dá para isolar o fator de escala. Isso é, I_l/I_0 descreve não apenas quão homogêneo são os agrupamentos estabelecidos, mas o quão mais homogêneos eles são em relação à população em geral. Note-se que I_0 nesse contexto se refere à comunidade C_n , isso é, a comunidade que contém todos os vértices.

4.2.2 Distância esperada

A homofilia, como propriedade de redes complexas onde os vértices tendem a estarem adjacentes à vértices semelhantes. Em um sistema com atributos discretos, é facilmente estabelecido uma função Δ que descreve o quão mais semelhantes os vértices adjacentes são do que seria esperado em um modelo nulo. O modelo nulo trivial neste caso é a consideração de vértices conectados com igual probabilidade, mantendo-se a mesma quantidade de vértices e arestas, conforme descrito por Easley e Kleinberg (2010).

A adaptação para um modelo de um espaço contínuo de múltiplas dimensões se dá calculando uma aproximação da distância média entre cada par de vértices, essa média,

 H_e , é o valor que seria esperado se o grafo não fosse homofílico. O valor real é calculado como a média da distância dos pontos adjacentes, H_r .

4.2.3 Resultados

Na Tabela 4 estão discriminados os valores de inércia médios para as comunidades organizadas por nível. A leitura que se pode fazer desses dados, em especial das médias, é: em média uma comunidade de primeiro nível tem 38% da diversidade que se encontra na população geral; e em média uma comunidade de segundo nível (sub comunidade) tem 33% da diversidade presente na população em geral. Por fim, em média a distância entre dos vértices adjacentes é metade do que seria esperado sem a homofilia, indicando a presença dessa propriedade.

Tabela 4 – Homogeneidade e homofilia com os parâmetros básicos

| Execução | I_1/I_0 | I_2/I_0 | $I_1 + I_2/2I_0$ | H_r/H_e |
|------------------|-----------|-----------|------------------|-----------|
| B_0 | 0.38193 | 0.34155 | 0.36174 | 0.45942 |
| B_1 | 0.34067 | 0.30168 | 0.32118 | 0.45920 |
| $\overline{B_2}$ | 0.34262 | 0.29697 | 0.31980 | 0.49265 |
| B_3 | 0.35961 | 0.29986 | 0.32974 | 0.48305 |
| $\overline{B_4}$ | 0.41670 | 0.37592 | 0.39631 | 0.52725 |
| B_5 | 0.35321 | 0.28246 | 0.31784 | 0.46047 |
| B_6 | 0.37795 | 0.29310 | 0.33553 | 0.46127 |
| B_7 | 0.35209 | 0.29903 | 0.32556 | 0.45348 |
| B_8 | 0.36251 | 0.32820 | 0.34536 | 0.46364 |
| B_9 | 0.36874 | 0.32936 | 0.34905 | 0.50499 |
| Média | 0.36560 | 0.31481 | 0.34021 | 0.47654 |

Fonte: elaborado pelo autor

Naturalmente, existe uma influencia significativa que a quantidade de comunidades tem neste valor. Observe-se na Tabela 5, com mais comunidades para distribuir os vértices, as comunidades ficam significativamente mais homogêneas. Como efeito disso, a distância entre vértices conectados é bastante reduzida.

Também de forma natural, existe uma relação entre o parâmetro θ e a inercia. É apontado na tabela Tabela 6 a variação da inercia conforme se altera θ . Duas características dos dados descritos são relevantes, primeiramente com $\theta=1$ se a ortogonalidade das comunidades não estivesse tendo efeito, seria de se esperar comunidades onde a diversidade interna se aproximaria da diversidade da população geral, mas não é isso o que se observa.

Tabela 5 – Homofilia e Homogeneidade com K=(9,2,2,2)

| Execução | I_1/I_0 | I_2/I_0 | I_3/I_0 | I_4/I_0 | H_r/H_e |
|------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| M_0 | 0.18740 | 0.11020 | 0.05650 | 0.03240 | 0.15975 |
| $\overline{M_1}$ | 0.18766 | 0.11563 | 0.06017 | 0.03277 | 0.16491 |
| M_2 | 0.18446 | 0.11812 | 0.05993 | 0.03526 | 0.17281 |
| $\overline{M_3}$ | 0.18566 | 0.11307 | 0.06003 | 0.03169 | 0.16211 |
| $\overline{M_4}$ | 0.18111 | 0.11163 | 0.05563 | 0.03016 | 0.16158 |
| Média | 0.18526 | 0.11373 | 0.05845 | 0.03246 | 0.16423 |

Fonte: elaborado pelo autor

Isso é, em um modelo nulo, onde não existisse correlação entre os atributos do vértice e a comunidade em que ele participa, seria esperado uma razão de inercia que tendesse as um.

Tabela 6 – Homofilia e Homogeneidade com θ variável

| Execução | θ | I_1/I_0 | I_2/I_0 | Média |
|----------|----------|-----------|-----------|---------|
| I_0 | | 0.78255 | 0.73782 | |
| I_1 | 1.00 | 0.70558 | 0.67610 | 0.71637 |
| I_2 | | 0.70773 | 0.68841 | |
| I_3 | | 0.40448 | 0.34173 | |
| I_4 | 0.66 | 0.40280 | 0.33749 | 0.36539 |
| I_5 | | 0.37041 | 0.33541 | |
| I_6 | | 0.34582 | 0.29460 | |
| I_7 | 0.33 | 0.36632 | 0.30172 | 0.34005 |
| I_8 | | 0.40126 | 0.33059 | |

Fonte: elaborado pelo autor

O segundo ponto a ser destacado é que θ não é um controle direto sobre a inercia, nos casos com $\theta = 0.66$, $\theta = 0.33$ e $\theta = 0.1$ (Tabela 4), a razão se manteve em um mesmo patamar, entre 34% e 40%. Existem outros fatores que afetam diretamente a homogeneidade das comunidades, e que são mais dificilmente controlados por parâmetros.

4.3 VISUALIZAÇÃO

Uma das características da propriedade de existência de comunidades é que a definição de comunidade é dependente de contexto. Ainda assim, parece haver um entendimento natural de comunidades e de suas propriedades a partir da visualização das mesmas. Segue a baixo a renderização dos grafos B_0 e M_0 , gerados respectivamente com os parâmetros

padrão e com os parâmetros otimizando para a modularidade (mais valores em K e valores maiores).

A renderização desses grafos conta com uma codificação de forma que vértices que estejam na mesma comunidade de primeiro nível compartilhem o formato, e vértices que estejam na mesma comunidade de segundo nível compartilhem as cores, como é observável na Figura 4. Vértices que estejam em mais de uma comunidade de segundo nível terão a cor branca, e vértices que estejam em mais de uma comunidade de primeiro nível terão o formato de círculo. Dessa forma, é possível identificar as áreas de sobreposição, bem como os primeiros níveis da hierarquia de comunidades.

Figura $4 - M_0$ renderizado aproximando os vértices adjacentes

Fonte: elaborado pelo autor.

de forma a minimizar a distância deles na imagem. Além das divisões entre comunidades que estão categorizadas com os formatos e com as cores, é visível uma divisão interna de pequenos grupos densamente conexos. Essa visualização e entendimento intuitivo da divisão é decorrente de uma presença muito acentuada da propriedade de comunidades.

Essa divisão mais presenta, conforme já foi distrito anteriormente, é responsável também pela falta de vértices em regiões sobrepostas, de certa forma sacrificando ganhos nessa propriedade (sobreposição) para ganhar maior definição em outra (comunidades hierárquicas). A Figura 5 e a Figura 6 demonstram isso. Ambas apresentam os vértices posicionados com base nos seus atributos, de forma que o centro (mais próximo a origem) e mais densamente povoado, no entanto a Figura 6 não renderiza os vértices, apenas as arestas. Com isso, é abundantemente claro o quão fortemente delineadas são as comunidades. Demonstra-se que cada comunidade possui um domínio absoluto sobre alguma região do espaço onde os vértices se encontram.

Figura 5 – M_0 renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos

Fonte: elaborado pelo autor.

A Figura 7 e a Figura 8 fazem a mesma distinção, mas bom o grafo B_0 . B_0 apresenta um conjunto de comunidades onde ocorre a sobreposição, não apenas no sentido de comunidades sobrepostas, mas em um sentido mais simples, de que há vértices que não pertencem a comunidade (e que não tem ligações com ela) ocupando o mesmo espaço. Novamente, esse é um efeito de uma menor proporção de comunidades.

A visualização das arestas mostra uma divisão visual das comunidades, com uma comunidade no centro e cinco comunidades rodeando essa. Dessas seis comunidades, é

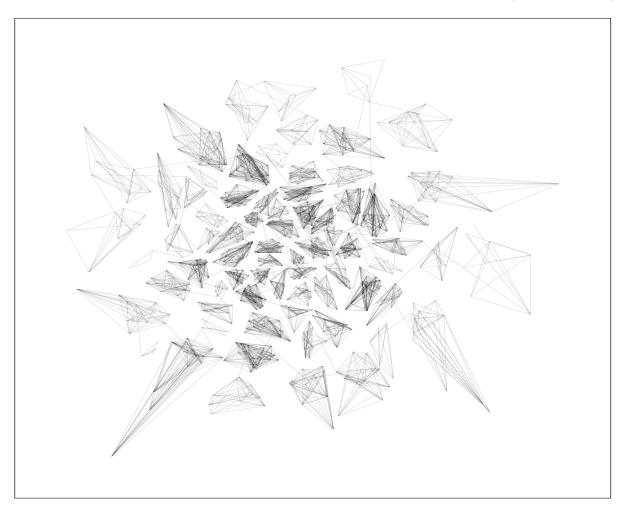


Figura 6 – M_0 renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos (apenas arestas)

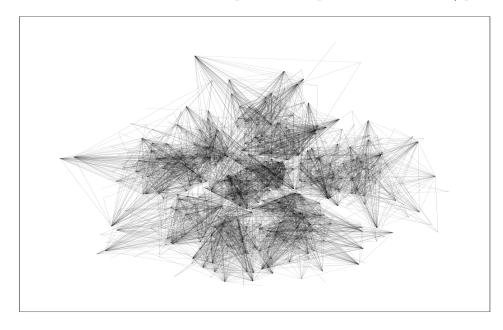
Fonte: elaborado pelo autor.

possível identificar que existem grupos distintos dentro delas, isso é, as sub comunidades são visíveis, mas pela natureza delas (e presença de vértices que certem as duas), são divisões muito menos precisas.

Figura 7 – $B_{\rm 0}$ renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos

Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 8 – B_0 renderizado com os vértices posicionado pelos seus atributos (apenas arestas)



Fonte: elaborado pelo autor.

5 CONCLUSÕES

Este trabalho demonstra um modelo algorítmico para a geração de redes complexas com comunidades hierárquicas e comunidades sobrepostas. Junto do algoritmo foram identificados valores básicos para a parametrização que geram grafos com todas as propriedades desejadas. A fundamentação teórica apresenta uma exploração em língua portuguesa academicamente relevante, descrevendo redes complexas, comunidades e as suas propriedades. Os resultados experimentais demonstram o sucesso nos objetivos gerais e específicos estipulados para o modelo.

Quando ao objetivo específico da inclusão de comunidades na rede gerada, bem como a construção de uma ground truth para quais são os membros das comunidades é demonstrado como bem sucedido na exploração dos resultados da função de modularidade estendida EQ. A presença das comunidades, bem como o pertencimento dos vértices a elas é confirmado pela função de qualidade de cobertura. Notadamente, essa função e a suas aplicação recursiva destacam a presença de comunidades hierarquicamente organizadas, de forma que se aninham em comunidades auto semelhantes, e sobrepostas, de forma a compartilharem vértices. Demonstradamente o compartilhamento de vértices é sensível à parametrização do modelo, se mostrando mais presente em grafos gerados a partir de parâmetros que geram uma estrutura com menos comunidades.

O objetivos relativos á comunidades homogêneas foram bem sucedidos conforme demonstrado experimentalmente, sendo parametrizável o quão pronunciada é essa propriedade. Com a escolha de parâmetros que reforcem comunidades de tamanho reduzido (maiores valores para K) os grafos gerados consistentemente apresentam comunidades com menos de quatro porcento da diversidade global. Os parâmetros básicos, consideravelmente conservadores no quanto eles reforçam características específicas, geram grafos onde as comunidades apresentam consistentemente menos de trinta e quatro por cento da diversidade que o grafo.

5.1 EXTENSÕES

Redes complexas como área de estudo é um campo promissor e mais estudos devem ser realizados. O processo de geração de redes complexas com comunidades é uma área de relevância acadêmica, e o modelo apresentado neste trabalho tem um conjunto de extensões desejáveis, são elas:

A otimização da cobertura gerada para algorítimos de percolação de cliques, por

meio da redução de arestas entre vértices que estejam entre duas comunidades. Isso poderia ser implementado no processo de geração final de arestas, removendo estres vértices e não os considerando na avaliação de se a comunidade é um grafo completo. Idealmente, isso deveria ser parametrizado com um valor entre zero e um, identificando a proporção de arestas entre vértices na mesma área de superposição.

A elaboração de um método mais deliberado nas escolha de comunidades, que permita um controle mais fino da proporção de vértices em áreas de superposição. Uma implementação intuitiva seria a parametrização de uma proporção, quantos vértices estariam em uma comunidade folha apenas, quantos estariam em duas, quantos estariam em três (O modelo não é incompatível com a escolha de três ou mais comunidades) etc. Cada vértice teria primeiramente uma quantidade de comunidades folha decidido com essas proporções, e a escolha poderia ser feita ou repetindo a chamada para a função, ou escolhendo as comunidades mais próximas.

O desenvolvimento de novos modelos de eleição de representantes, considerando que naturalmente a escolha de representantes com características distintas pode otimizar o processo. As escolhas de metodologia naturais seriam a minimação da função d para os vértices já dentro da comunidade, tanto considerando a média dos vértices para com os representantes eleitos, quanto para o seu mínimo.

O desenvolvimento de novos modelos para a função d, especialmente em vista da ortogonalidade. Uma abordagem que se desejaria explorar é a limitação da quantidade de níveis hierárquicos para a quantidade de dimensões nos vértices, para que sejam usados eixos distintos como eixo de ortogonalidade por nível. Isso é, as comunidades de primeiro nível teriam predileção por discriminar seus membros com base em um eixo, as de segundo nível teriam por outro eixo (ortogonal ao primeiro) e assim sucessivamente. De fato, a implementação de uma estrutura assim poderia suplantar a necessidade de um parâmetro de controle θ , pois a variação em $\mathcal A$ seria capaz de modificar esse comportamento controlando inclusive para diferentes níveis.

Um estudo mais aprofundado das proporcionalidades identificadas em sistemas do mundo real e a sua presença nos grafos gerados pelo modelo. Um exemplo disso é a distribuição de graus em função logarítmica, que apesar de ter sido observado em testes, não pode ser avalada mais rigorosamente.

Uma avaliação comparativa da cobertura gerada pelo modelo com as coberturas identificadas por algoritmos de identificação de comunidades canonicamente aceitos na literatura.

REFERÊNCIAS

AKOGLU, L.; FALOUTSOS, C. Rtg: A recursive realistic graph generator using random typing. In: SPRINGER. **Joint European Conference on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases**. [S.l.], 2009. p. 13–28.

EASLEY, D.; KLEINBERG, J. Networks, crowds, and markets: Reasoning about a highly connected world. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.

FORTUNATO, S. Community detection in graphs. **Physics reports**, Elsevier, v. 486, n. 3-5, p. 75–174, 2010.

GIRVAN, M.; NEWMAN, M. E. Community structure in social and biological networks. **Proceedings of the national academy of sciences**, National Acad Sciences, v. 99, n. 12, p. 7821–7826, 2002.

LARGERON, C. et al. Generating attributed networks with communities. **PloS one**, Public Library of Science, v. 10, n. 4, p. e0122777, 2015.

METZ, J. et al. Redes complexas: conceitos e aplicações. São Carlos, SP, Brasil., 2007.

SHEN, H. et al. Detect overlapping and hierarchical community structure in networks. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 388, n. 8, p. 1706–1712, 2009.

SLOTA, G. M. et al. Scalable generation of graphs for benchmarking hpc community-detection algorithms. In: **Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis**. [S.l.: s.n.], 2019. p. 1–14.

STEGEHUIS, C.; HOFSTAD, R. V. D.; LEEUWAARDEN, J. S. V. Epidemic spreading on complex networks with community structures. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 1–7, 2016.