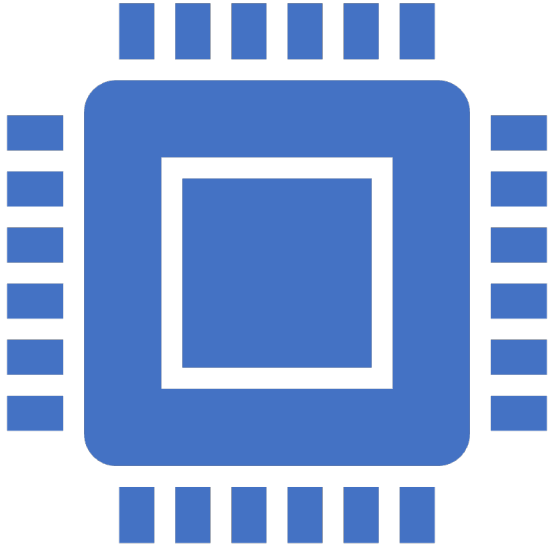
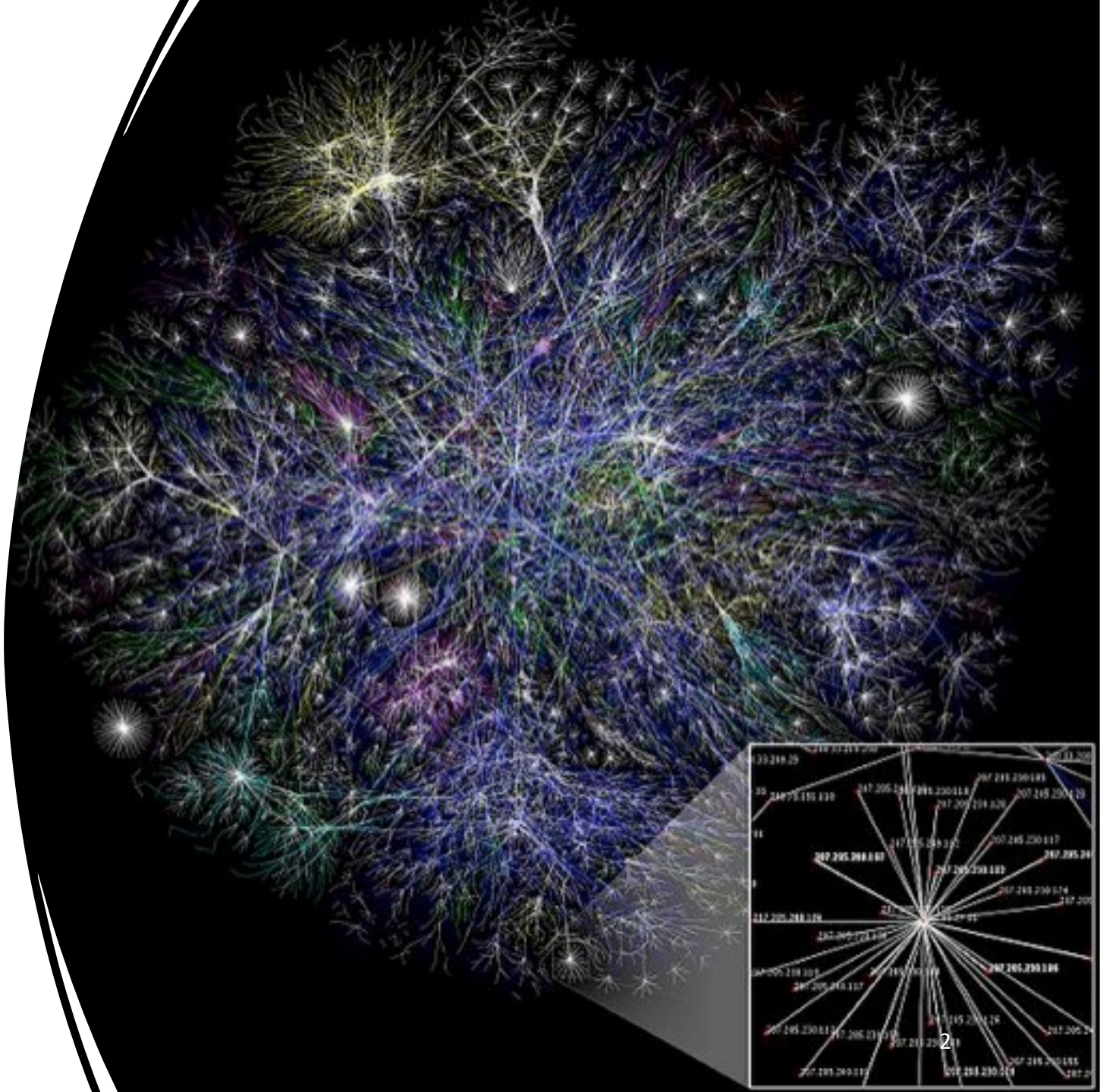


Анализ графов

О чем поговорим

- Основные понятия теории графов
- Библиотека Networkx (CPU)
- Библиотека cuGraph (GPU/Multi-GPU)



Теория сложных сетей

Теория сложных сетей (теория графов) изучает сложные взаимодействующие системы, которые могут быть представлены в виде графа

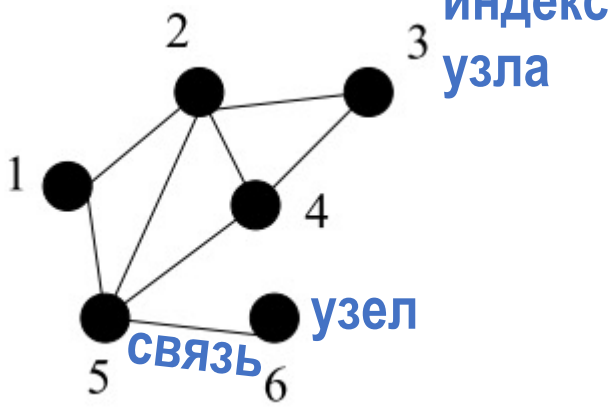
Примеры:

- Коммуникационные сети (звонки, email…)
- Интернет и веб граф (связь между роутерами, ссылки в интернете)
- Рекомендательные сервисы (сети музыки, фильмов, товаров)
- Социальные сети (друзья, сообщения)
- Семантические сети (связь слов, понятий)
- Технологические, транспортные сети (сети дорог, транспорта, сети электропередач)

Основные понятия теории графов

Сеть(граф) – множество узлов (вершин) и связей (ребер), соединяющий пары узлов.

Сеть



Матрица смежности сети

$$A = (a_{ij}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Список связей сети

$$(1,2), (1,5), (2,3), (2,4), (2,5), (3,4), (4,5), (5,6)$$

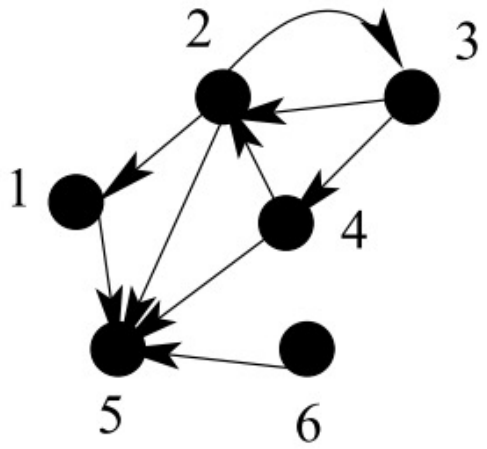
Интегральные характеристики

Количество узлов – N=6; количество связей – L=8 .

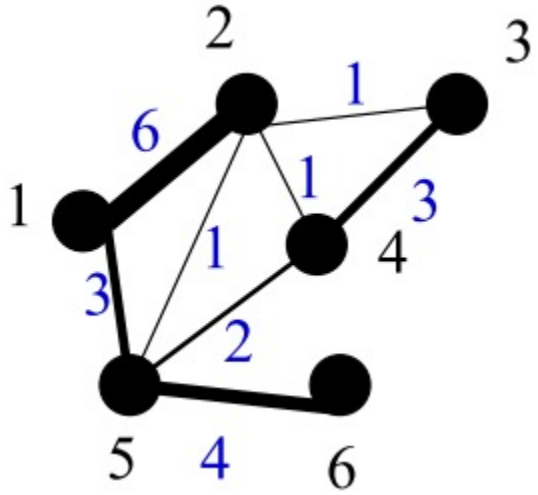
Средняя степень узлов сети: $< k >= \frac{2L}{N}$ =16/6=2,67

Основные понятия теории графов

Ориентированная сеть – сеть, в которой связь имеет направление;
Взвешенная сеть – сеть, в которой ребра имеют вес (например, вес характеризует расстояние);
Степень узла – количество связей у узла;
Средняя степень узлов сети - $< k > = \frac{2L}{N}$, где N – число узлов, L – количество связей
Расстояние от одного узла до другого – наикратчайший путь от одного узла к другому
Диаметр сети – максимальное расстояние между узлами сети



Ориентированная сеть



Взвешенная сеть

Мера центральности

В графе есть узлы, связи. Но можно ли ответить на вопрос, на сколько конкретный узел (связь) важен для сети?

Важность можно толковать различными способами:

- Узел пропускает большое количество сетевого трафика
- Узел является узким местом сети
- Связь является единственной при соединении двух крупных подграфов
- Узел является наиболее цитируемым
- …

Основное предположение: важные узлы или связи находятся в центре сети.
Наиболее популярные меры центральности:

- Центральность по степени (degree centrality);
- Центральность по близости (closeness centrality);
- Центральность по посредничеству (betweenness centrality);
- Центральность по собственному вектору (eigenvector centrality).

Мера центральности

Центральность по степени (degree centrality) – центральность узла равна степени узла. Часто степень узла нормируется на максимальное возможное количество связей у узла.

$$C_{DN}(i) = \frac{k_i}{N-1}, C_{DN}(i) \in [0,1]$$

Интерпретация: кто является наиболее активным участником сети.

Центральность по близости (closeness centrality) – суммируются все кратчайшие пути от узла до остальных узлов сети l_{ij} и находится обратная величина.

$$C_C(i) = 1 / \sum_j l_{ij}$$

Обычно она также нормируется на максимально возможное количество связей.

$$C_{CN}(i) = (N-1) / \sum_{j \neq i} l_{ij}, C_{CN}(i) \in [0,1]$$

Интерпретация: на сколько быстро доходит информация в сети от данного узла к остальным.

Мера центральности

Центральность по посредничеству (betweenness centrality) – для всех пар узлов кроме рассматриваемого вычисляется доля кратчайших путей, проходящих через рассматриваемый узел, затем эти доли суммируются (количество кратчайших путей между j и k : σ_{jk} - всего; $\sigma_{jk}(i)$ - проходящих через узел i):

$$C_B(i) = \sum_{j<k;j,k\neq i} \sigma_{jk}(i)/\sigma_{jk}$$

Центральность по посредничеству обычно нормируется по количеству пар узлов в сети (без рассмотрения текущего узла):

$$C_{BN}(i) = C_B(i)/[(N-1)(N-2)/2], C_{BN}(i) \in [0,1]$$

Интерпретация: центральность по посредничеству – это мера контроля, определяющего важность того или иного узла как передаточного звена. Если у какого-либо узла высокий показатель центральности по посредничеству, можно предположить, что он – единственная связь между различными частями сети.

Центральность по собственному вектору (eigenvector centrality) - скажи мне кто твой друг и я скажу кто ты. Узел имеет высокую центральность по собственному вектору, если он соединен с большим количеством узлов или соединен с другими узлами с высокой центральностью.

$$\frac{1}{\lambda}\sum_j a_{ij}x_j = x_i \quad \Rightarrow \quad A^T\vec{x} = \lambda\vec{x}$$

(в матричном виде) (задача поиска собственного вектора)

PageRank

В чем заключается подход?
Когда страница А ссылается на страницу Б, то:

1. Автор А считает, что в Б содержится интересная и важная информация;
2. Ссылка из А и Б добавляет репутации странице Б

Отсюда еще один аспект – не все ссылки одинаковы. Чем «важнее» страница, тем «дороже» ссылка от нее

PageRank – постановка задачи

«Авторитет» каждой страницы разделяется между всеми ссылками с этой страницы. Суммарный «авторитет» страниц равен 1:

$$\sum_j a_{ij}(x_j/k_j^{out}) = x_i$$
$$\sum_j x_j = 1$$

=>

(в матричном виде)

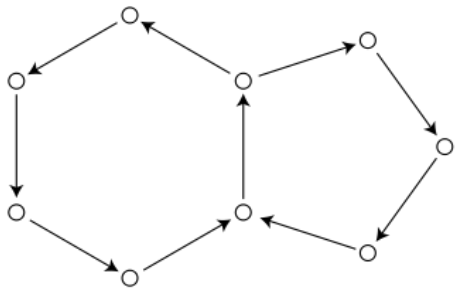
$$M^T\vec{x} = \vec{x}$$

M – нормированная по строкам *A* (м-а смежности)

(задача поиска собственного вектора, отвечающего собственному значению 1)

Задача имеет решение, если:

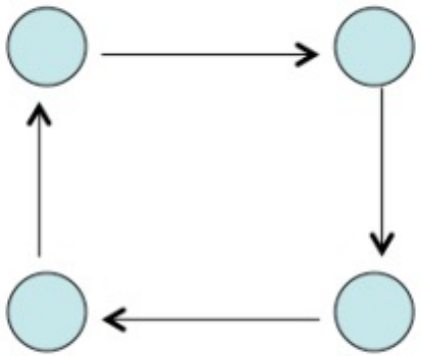
- Ориентированный граф сильно связный (т.е. из любого узла можно построить путь до любого узла)
- Граф апериодический (нет никакого целого числа k> 1, которое делит длину каждого цикла в графе).

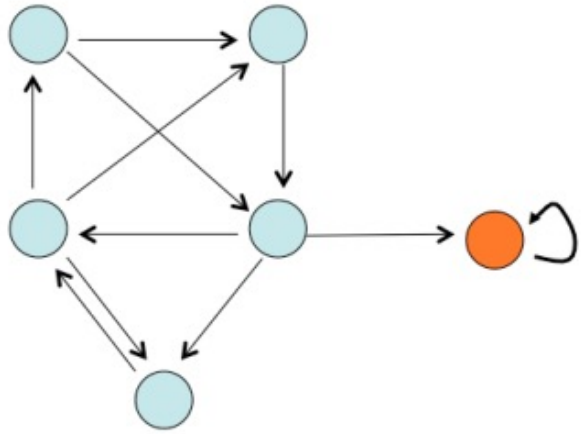


PageRank – ограничения

Для поиска решения задачи $M^T\vec{x} = \vec{x}$ существуют существенные ограничения на сеть.

Проблемы:





Задача имеет решение, если:

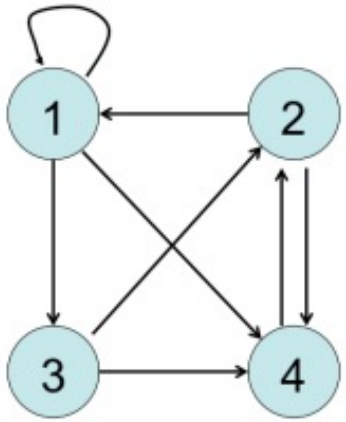
Граф апериодический (нет никакого целого числа k> 1, которое делит длину каждого цикла в графе).

Ориентированный граф сильно связный (т.е. из любого узла можно построить путь до любого узла)

PageRank – снятие ограничений

Подход: рассчитать, как будет обходить сеть посетитель, случайно выбирающий ссылки.

С каждой страницы (узла) посетитель может равновероятно перейти на любую страницу, на которую ссылается данная страница. Вероятность посещения каждой страницы после очень длительного блуждания и есть ее «авторитет»



$$M^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{x}(t) = M^T \vec{x}(t\text{-}1)$$

$$t \to \infty$$

$$\vec{x} = M^T \vec{x}$$

$\vec{x}(0)^T = (1, 0, 0, 0)$

$\vec{x}(1)^T = (1/3, 0, 1/3, 1/3)$

$\vec{x}(2)^T = (0.11, 0.50, 0.11, 0.28)$

…

$\vec{x}(10)^T = \vec{x}(11)^T = (0.26, 0.35, 0.09, 0.30)$

PageRank – снятие ограничений

Подход: добавить возможность случайного равновероятного перехода на любую из страниц (узлов) сети.

С вероятностью $(1-\alpha)$ случайно перемещаемся на любую из страниц сети (E - единичная матрица, размера N*N). Стохастическая матрица M преобразуется в стохастическую матрицу G, для которой ограничения выполнены апериодичности и сильной связности выполняются автоматически.

$$G = \alpha M + (1-\alpha)\frac{1}{N}E \quad \Rightarrow \quad G^T\vec{x} = \vec{x}$$

(задача поиска собственного вектора, отвечающего собственному значению 1)

- **Граф для G сильно связный (т.е. из любого узла можно построить путь до любого узла).**
- **Граф для G – апериодический**

Обычно реализуют данный вариант при $\alpha = 0.85$

Выявление сообществ (кластеризация)

Необходимо находить такие сообщества (кластеры), чтобы связи внутри них были сильными, а связи между кластерами были слабыми.

Есть множество алгоритмов кластеризации.

- **Алгоритм Гирвана-Ньюмена (Girvan-Newman)**. Идея заключается в подсчете количества проходов кратчайших путей через ребра и удаляем ребро с максимальным посредничеством. После каждого удаления у нас образуются сообщества и алгоритм работает до формирования заданного количества сообществ.
- **Алгоритм Лёвина (Louvain) (**http://arxiv.org/abs/0803.0476**)**. Состоит следующих этапов:

1) Каждый узел – уникальное сообщество (кластер);
2) Для каждого узла рассматриваем возможность его перехода в соседнее сообщетсво при условии увеличения меры модулярности;
3) Каждое новое сообщество – новый узел;
4) Связь между новыми узлами определяется количеством связей исходных узлов;
5) Повторяем все этапы до достижения максимума меры модулярности.

Мера модулярности (modularity) — показатель качества сообщества (отношение количества связей внутри сообществ к связям вовне).

Выявление сообществ (кластеризация)

Алгоритм распространения меток. Каждый узел – сообщество. На каждом шаге узел выбирает себе то сообщество, с которым он имеет связь и сообщество должно быть самым крупным. Если их несколько, то выбор происходит случайным образом.

Spectral clustering. Кластеризация на основе разрезов сообществ таким образом, чтобы минимизировать количество внешних ребер.

И многие другие методы.

Networkx

- Библиотека написана для анализа графов в Python. Является очень удобной и легкой в освоении, но есть недостаток – медленная для больших графов и работает только на CPU.
- Но очень много всего уже реализовано.

Немного про синтаксис

Создание графа

```
G = nx.Graph()
```

Добавление связей

```
G.add_edges_from([(1, 2), (1, 3)])
```

Добавление нод как по 1, так и по несколько.

```
G.add_node(1)
```

```
G.add_nodes_from([2, 3])
G.nodes
```

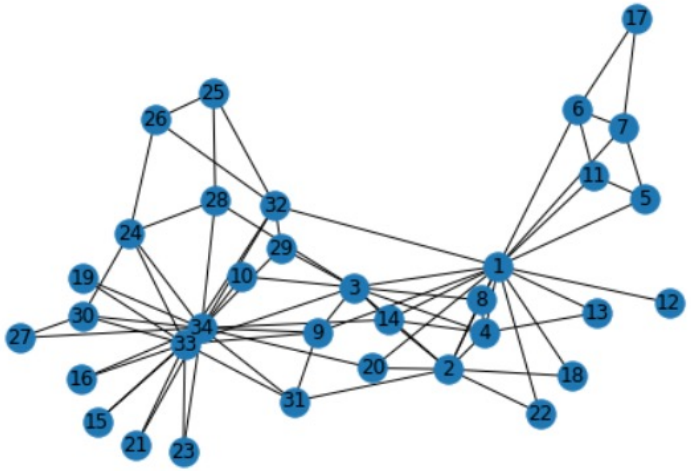
```
NodeView((1, 2, 3))
```

Можно все красиво добавить из pandas

```
G = nx.Graph()
G = nx.from_pandas_edgelist(edges, source='source', target='destination')
```

Визуализация в networkx

```
nx.draw(G, with_labels=True)
```



Есть один нюанс…При каждой визуализации положение узлов может меняться, но через параметр pos можно зафиксировать положение узлов.

```
pos=nx.spring_layout(G)
nx.draw(G, pos=pos)
```

node_color – цвет узлов;

node_size – размер узлов; можно разным узлам давать разный размер;

labels – подписи узлов;

cuGraph

- Библиотека экосистемы rapids. А если мы говорим про rapids, то это сразу говорит нам о GPU и Multi-GPU, но с жертвованием разнообразием реализованного.

Немного про синтаксис

Создание графа

```
G_gpu = cg.Graph()
```

Add_node нет, только через add_nodes_from

```
G_gpu.add_nodes_from([1])
G_gpu.nodes()
```

В cuGraph нельзя, к сожалению, добавлять новые ноды или связи в граф. Это обусловлено сложностью реализации данного процесса на GPU. Но всегда есть выход – можно вытянуть cudf.DataFrame со всеми связями, добавить туда новые записи и инициализировать новый граф.

```
G_gpu.edges()
```

	src	dst
0	1	2
1	1	3

```
appended_values = cudf.DataFrame({
    'source': [2],
    'destination': [3]
})
edge_list = edge_list.append(appended_values, ignore_index=True)
```

```
G_gpu = cg.Graph()
G_gpu.from_cudf_edgelist(edge_list, source='source', destination='destination')
```

Кластеризация в cuGraph

Пока в networkx почти ничего нет в части кластеризации графов, в cuGraph постарались решить эту проблему и подготовили уже готовые решения.

- ECG
- K-Truss
- Leiden
- Louvain
- Spectral Clustering
- Subgraph extraction
- Triangle Counting

Алгоритм Louvain, пример

Совместимость Networkx и cuGraph

Можно удобно создать граф в networkx, что-то с ним сделать, а для анализа передать уже в cuGraph.

```
import networkx as nx
import time
import operator


# create a random graph
G = nx.barabasi_albert_graph(N, M)

... do some NetworkX stuff ..

t1 = time.time()
bc = nx.betweenness_centrality(G)
t2 = time.time() - t1

print(t2)
```

NetworkX

```
import networkx as nx
import time
import operator
import cugraph as cnx

# create a random graph
G = nx.barabasi_albert_graph(N, M)

... do some NetworkX stuff ..

t1 = time.time()
bc = cnx.betweenness_centrality(G)
t2 = time.time() - t1

print(t2)
```

NetworkX + RAPIDS cuGraph

https://docs.rapids.ai/api/cugraph/stable/nx_transition.html

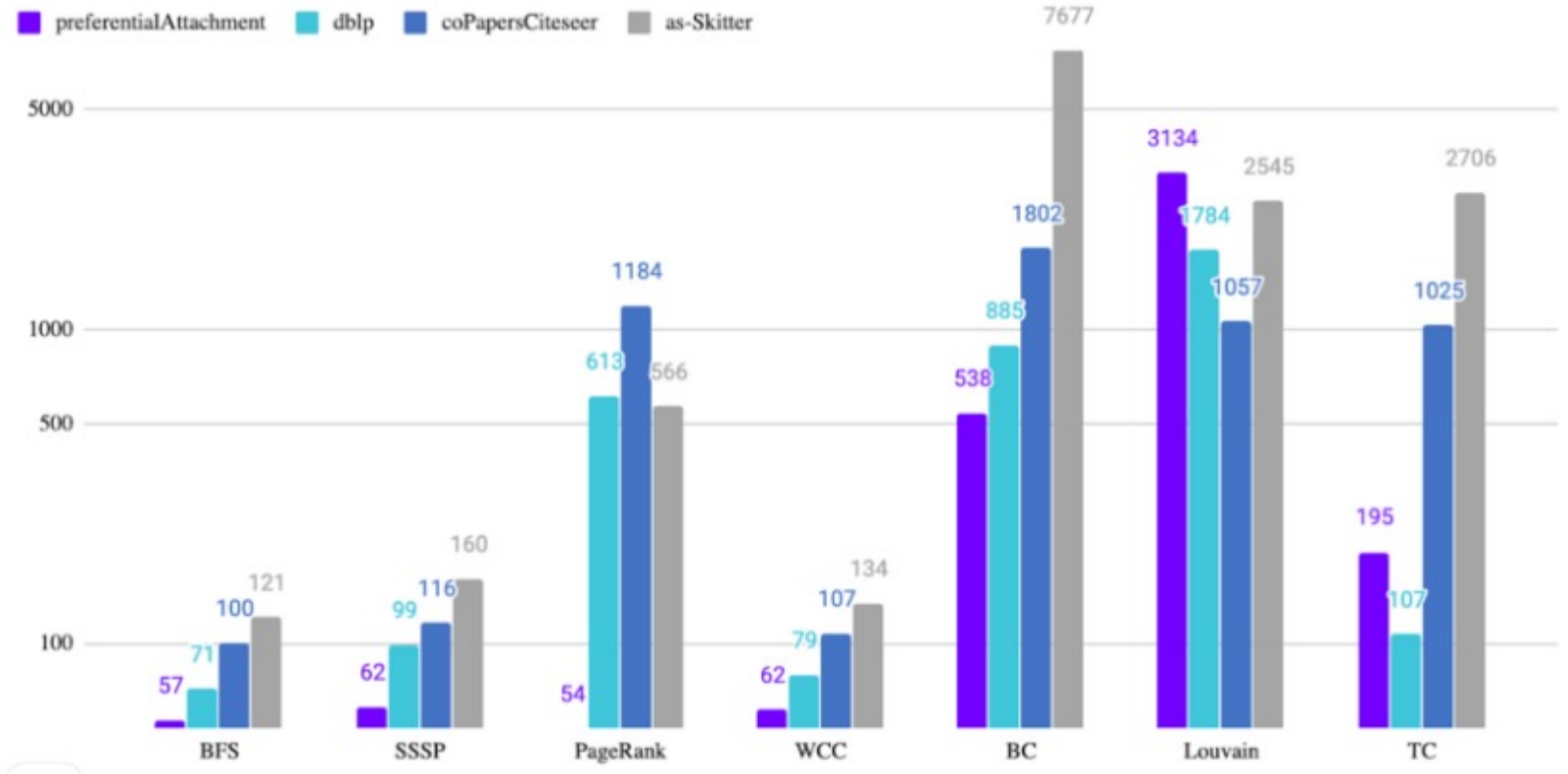
Немного бенчмарков

Считали betweenness centrality

Node	Edges	Speedup	NetworkX Runtime (sec)	cuGraph Runtime (sec)
100	1,344	0.45	0.05	0.11
200	2,944	1.14	0.20	0.18
400	6,144	2.64	0.84	0.32
800	12,544	5.26	3.84	0.73
1,600	25,344	12.99	17.51	1.35
3,200	50,944	26.5	78.10	2.95
6,400	102,144	48.62	338.73	6.97
12,800	204,544	89.81	1,539.73	17.14
25,600	409,344	180.42	7,804.06	43.25
51,200	818,944	328.05	47,763.09	145.60

https://medium.com/rapids-ai/rapids-cugraph-networkx-compatibility-d119e417557c

Немного бенчмарков



https://medium.com/rapids-ai/rapids-cugraph-networkx-compatibility-d119e417557c