UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRENTO

Dipartimento di Ingegneria e Scienza dell'Informazione

Corso di Laurea in
Informatica

Percrso di studio
Scienze e Tecnologie Informatiche

Elaborato finale

Titolo?

Sottotitolo (alcune volte lungo - opzionale)?

Supervisore
Alberto Montresor

Laureando
Stefano Leonardi

Anno accademico 2017/2018

Ringraziamenti

...thanks to...

Indice

1 Sommario

Questa tesi va a ripercorrere il lavoro svolto da Stefano Leonardi durante il tirocinio svolto all'interno dell'università, con la supervisione del dottorando Nasrullah Sheikh, per il professore Alberto Montresor.

1.1 Introduzione

Il tirocinio è basato sull'articolo intitolato "Community-enhanced Network Representation Learning for Network Analysis"[19] abbreviato dalla sigla CNRL . Questo articolo propone un innovativo metodo per l'individuazione delle comunità all'interno dei grafi. Lo scopo di questo tirocinio è stato quindi quello di replicare i risultati ivi proposti, una volta compreso il codice che ne è la base, e, dove possibile, cercare di migliorare le prestazioni dell'algoritmo, anche sfruttando elementi non originariamente considerati.
L'algoritmo proposto nell'articolo sfrutta diverse tecniche, alcune delle quali dettagliatamente spiegate negli articoli:

- "DeepWalk: Online Learning of Social Representations"[14]
- "node2vec: Scalable Feature Learning for Networks"[4]
- "How exactly does word2vec work?"[12]

Segue la spiegazione del perché l'individuazione di comunità è una tecnica così importante.

1.2 Cosa sono i grafi e cosa le comunità

La base sono i grafi, una particolare struttura dati composta da nodi/vertici V (dove $n = |V|$) e archi/bordi/lati E (dove $m = |E|$). I primi possono rappresentare un entità eventualmente anche con l'aiuto di attributi. Diversamente gli archi sono dei collegamenti che legano due nodi, possono essere interamente orientati/diretti o non orientati/indiretti. Questa struttura dati permette di rappresentare tantissime situazioni per tale motivo è così importante.
Lo scopo dell'individuazione di comunità è, scovare delle comunità, ossia dei gruppi di nodi simili fra loro.
Si noti che i nodi risultano essere simili per diverse ragioni, possono avere le stesse caratteristiche strutturali in quanto sono dei cardini che legano molti altri elementi, magari dei punti isolati da tutto il resto, o più semplicemente hanno dei valori analoghi sugli attributi.
Gruppi di nodi simili possono essere gestiti in maniera omogenea, questo permette di sfruttarne le peculiarità. La versatilità d'applicazione dei grafi conferisce ad algoritmi che vi lavorano sopra, come l'individuazione di comunità, una grande importanza.

1.3 Come si valutano le comunità

Date due partizioni differenti su un grafo, è necessario capire quale di queste due è la migliore. Intuitivamente se il grafo è molto piccolo, tanto da poterlo comprendere guardando unicamente una sua rappresentazione grafica, e le comunità individuate sono poche allora si potrebbe decidere anche ad occhio qual è la migliore partizione.
Se però le comunità individuate sono tante e il grafo non è più piccolo, allora non è più facile effettuare una scelta e ancor meno riuscire a giustificarla. Esistono metodi formali per analizzare e decidere quale partizione andare a scegliere, questi metodi prendono il nome di modularità.

Le partizioni vengono così definite:

- Una partizione è un insieme di comunità

- Non tutte le comunità hanno le stesse dimensioni, ossia lo stesso numero di nodi che vi appartengono
- Le comunità non hanno né una dimensione massima né una dimensione minima.
  In realtà si può considerare che la loro dimensione cada nell'intervallo $[1, n]$, dove il limite inferiore 1 è dato dal fatto che devono contenere almeno un elemento, mentre il limite superiore n è dato dal fatto che non possono contenere più nodi di quelli esistenti nel grafo (che sono in numero di n)
- È possibile che un nodo non appartenga a nessuna comunità
- Un nodo del grafo può appartenere a più di una comunità, potenzialmente anche a tutte quelle presenti, se questo accade significa che c'è una sovrapposizione di comunità

La metrica di valutazione di una partizione è la modularità (il cui simbolo è Q). Questo nome può essere associato a diverse metriche infatti a seconda di cosa cerchiamo avremo interesse a valorizzare alcuni aspetti e penalizzarne altri. Per tale motivo la modularità è solo il nome usato per indicare il valore dato dalla valutazione di una partizione.
Durante il tirocinio sono stati adottati tre metodi differenti: mod_withMax , mod_overlap e modularità modificata . I primi due nomi non sono ufficiali in quanto sono stati scelti al solo scopo di riconoscerle, mentre l'ultimo modularità modificata è quello utilizzato nell'articolo su CNRL [19].
I dettagli sul funzionamento e sulla motivazione del perché sono state scelte sono all'interno dell'apposito capitolo sulle metriche di valutazione.

1.4 I cambiamenti apportati

Per calcolare una partizione il codice di CNRL utilizza un sistema di visite random e grazie a questo ricostruisce le possibili somiglianze fra i nodi. Non volendo toccare questa sezione le modifiche da noi riportate si inseriscono all'interno della creazione, grazie a tali visite, dei cammini.
Una cammino è definito come una sequenza di nodi, e preso un elemento qualsiasi fra questi deve esser possibile arrivare all'elemento successivo attraversando un solo arco, ossia i due elementi devono essere direttamente connessi, almeno nel senso di percorrenza.
L'algoritmo genera x cammini, ognuno di lunghezza massima l, sul grafo, dove $x = n \cdot w$:

- n: è il numero di nodi del grafo
- w: è il numero di cammini che si fanno partire da ogni singolo nodo
- l: è la lunghezza massima di ogni cammino

Con questi dati l'algoritmo di CNRL calcola la suddivisione in comunità, si può notare come tutti questi dati vengano estratti esclusivamente dalla struttura del grafo, ossia da come nodi ed archi sono interconnessi.
L'intuizione sfruttata per modificare l'algoritmo sta nel fatto che esistono altri dati non utilizzati, ossia gli attributi dei nodi. Tramite la creazione di nuovi particolari cammini è possibile far risultare due nodi in precedenza lontani, in quanto non direttamente connessi, vicini, dal momento che questi due nodi condividono uno o più attributi. L'introduzione di tutti questi nuovi dati porta ad un radicale cambiamento della suddivisione in comunità.
L'idea di introdurre gli attributi per migliorare l'efficienza dell'algoritmo è sorta grazie agli articoli:

- "Attributed social network embedding"[9]
- "Network Representation Learning with Rich Text Information"[20]

1.5 Risultati

Parte temporaneamente mancante...

2 Implementazione

In questo capitolo vengono spiegati i metodi utilizzati per cercare di migliorare le prestazioni dell'algoritmo di CNRL pippo [**?**].

2.1 Come funzionano le dinamiche di CNRL

In prima istanza vengono presi in input tutti i dati necessari, tra cui il grafo su cui si andrà a lavorare, questo vien caricato dal formato edgelist, ossia una lista d'archi identificati da nodo di partenza più nodo d'arrivo. Il grafo vien dunque preprocessato per andare ad utilizzare l'algoritmo di Node2Vec per effettuare le visite. Node2Vec è un algoritmo che regola le visite sulla base di due parametri p e q, questi due valori possono far variare l'esplorazione del grafo da una visita similare a quella in ampiezza fino ad una visita similare a quella in profondità, permettendo anche delle varianti intermedie.
I cammini individuati dalle alle visite effettuate con questo algoritmo sottostanno a ben definite caratteristiche. Da ogni nodo (in tutto n) sono fatti partire w cammini, per un totale di $w \cdot n$ cammini generati tutti di lunghezza al più l. Tali cammini sono lunghi al più l e non esattamente l in quanto quest'algoritmo gestisce sia grafi orientati che non. Di conseguenza se si visita un grafo orientato è possibile imbattersi in un pozzo, è possibile immaginarlo come un vicolo cieco, in tali situazioni la visita si ferma in quanto non è più possibile procedere, pertanto si avrà una lunghezza inferiore a l. Diversamente se si parla di grafi non orientati tale problema non si pone in quanto, anche se si arrivasse ad un pozzo, sarebbe sempre possibile tornare indietro, infatti Node2Vec permette di ritornare su nodi già visitati.

Ecco alcuni casi limite, perfettamente gestiti dall'algoritmo, che possono accadere durante la creazione dei cammini:

- **nodo isolato su grafo orientato:** si avrà un cammino di lunghezza 1, che comprende unicamente quel nodo
- **nodo isolato su grafo non orientato:** si avrà un cammino lungo l contenente l'ID di quel nodo in continuazione
- **loop su grafo orientato:** questa è una sequenza di nodi che si ripete costante attraverso il cammino, è possibile iniziare con un nodo già presente nel loop o arrivarci dopo svariati passaggi
- **sequenze fisse finali su grafo orientato:** è possibile che tanti cammini terminino con la stessa sequenza di nodi, questo è dovuto al fatto che sul grafo vi è un percorso senza possibilità di scelta che porta ad un pozzo, quindi una volta imboccato tale percorso il cammino andrà a terminare sempre con la stessa sequenza

Una volta che Node2Vec ha generato i cammini è compito di un'altra sezione ricavarne le comunità, questo può essere fatto mediante due approci differenti. Il primo, il più noto, è Word2Vec che va a considerare gli ID dei nodi come se fossero parole di conseguenza un cammino ossia un array di nodi vien considerato come un array di parole interpretabili come una frase. I dettagli del funzionamento si possono trovare nell'articolo "How exactly does word2vec work?"[12].
Diversamente il codice di CNRL utilizza, di default, un metodo alternativo chiamato Latent Dirichlet Allocation (LDA)[1] o una sua variante detta HalfLDA, entrambe le varianti si basano ancora su Word2Vec . Le meccaniche esatte di questi metodi, non erano di nostro interesse pertanto non sono state e non verranno approfondite.
Per ora è ininfluente l'algoritmo utilizzato, in quanto entrambi ritornano un insieme di comunità che formano la partizione che stiamo cercando. Per dare una misurazione al lavoro svolto è ora possibile calcolare la modularità (spiegata in dettaglio nell'apposito capitolo sui metodi di valutazione).

2.2 Introduzione degli attributi

Per individuare le comunità esistenti CNRL sfrutta unicamente la struttura del grafo.
Tuttavia entrambi i dataset su cui si è lavorato durante il tirocinio, denominati Cora e Citeseer (meglio spiegati nel capitolo sugli esperimenti) presentano oltre al file che delinea la struttura del grafo anche un secondo file, con estensione ".content", che contiene per ogni nodo una lista di valori binari, il cui significato è:

- 0 il nodo non ha l'attributo identificato da questa colonna
- 1 il nodo ha l'attributo identificato da questa colonna

Tutte le informazioni contenute in questo file non sono considerate dal codice di CNRL per questo motivo si è deciso d'introdurle. La finestra di codice in cui è possibile apportare modifiche è compresa fra il caricamento dei dati dall'input, e l'inizio del processo d'estrazione delle comunità, ciò significa che la sola sezione in cui è possibile intervenire apportando delle modifiche è la generazione dei cammini lungo il grafo.
I cammini generati allo stato attuale non danno informazioni sugli attributi, pertanto è necessario oltre a questi aggiungerne altri che considerino tali informazioni. In particolare due nodi sono legati unicamente se vi è un arco che va da uno all'altro, intuitivamente si può dire che due nodi sono vicini e quindi legati se sono simili.
Questa somiglianza, se riportata sugli attributi, è possibile definirla come: due nodi sono simili se condividono uno o più attributi, contrariamente non sono simili se non condividono nessun attributo. Data la definizione di somiglianza di due nodi attraverso gli attributi, si nota che non è presente alcun verso per applicarla, pertanto verrà rappresentata attraverso un arco non orientato invece che uno orientato.
Si crea quindi un nuovo grafo indiretto che tiene conto di tutte le somiglianze derivanti dagli attributi, e su questo si richiama l'algoritmo di Node2Vec per generare i nuovi cammini.

2.3 Grafo degli attributi

In questa sezione viene formalizzato il concetto di grafo degli attributi ed una volta descritte le due alternative vengono esposti i necessari paragoni.
In partenza si rimuovono gli archi originari del grafo, in quanto se si tenessero si rischierebbe di generare una seconda volta gli stessi cammini. Diversamente i nodi vanno conservati, in quanto sono questi i punti che si vogliono nuovamente collegare, da ora in avanti questo insieme di nodi prende il nome di **N1**.
Se due nodi condividono lo stesso attributo, sono simili e quindi connessi, esistono tuttavia due metodologie per connettere i due nodi, a e b, in maniera diretta o indiretta.

- **diretta** consiste nel creare un arco non orientato (l'arco (a, b)) fra i due nodi, risulta essere il metodo semplice
- **indiretta** consiste nel creare un nuovo nodo c, che verrà inserito nell'insieme **N2**, e creare due archi che collegano ogni nodo originario a c, quindi si creano i due archi (a, c) e (b, c)
  questo metodo andrà a formare un nodo per ogni attributo esistente sul grafo, e andrà ad inserirli in N2

Nelle Figure **??** e **??** sono mostrati i due possibili metodi di collegamento dei nodi attraverso gli attributi. In ambo le Figure possiamo osservare tre scene:

1. ci sono unicamente i nodi appartenenti all'insieme N1 a cui vanno aggiunti gli archi
2. è mostrato il collegamento diretto. Da ogni punto raggiungo qualsiasi altro elemento attraversando esattamente un arco, ossia devo fare un singolo passo
   Questa nuova struttura prende ora il nome di ipergrafo

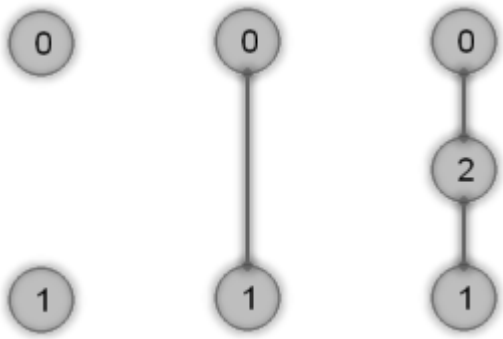


Figura 2.1: Due nodi condividono un attributo, ecco come possono essere legati, 1-nessun arco, 2-ipergrafo (completo), 3-grafo bipartito (a stella)

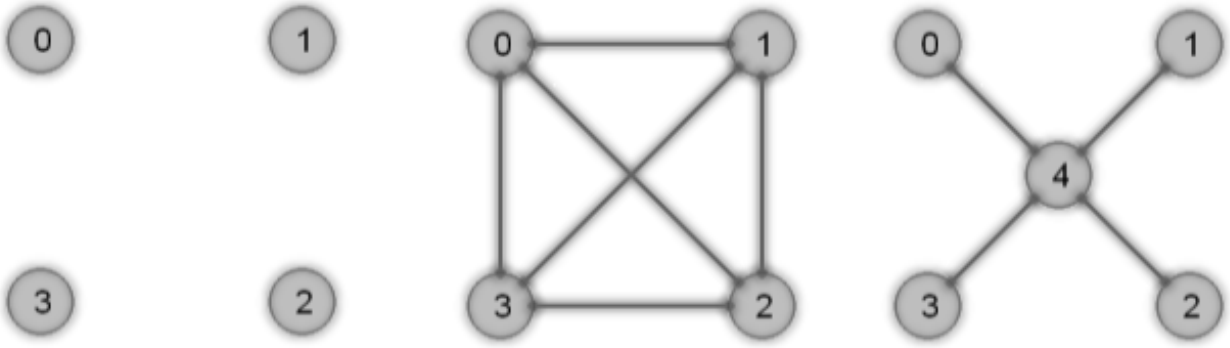


Figura 2.2: Quattro nodi condividono un attributo, ecco come possono essere legati, 1-nessun arco, 2-ipergrafo (completo), 3-grafo bipartito (a stella)

3. il collegamento è indiretto in quanto si passa attraverso il nodo 2 in Figura **??** e attraverso il nodo 4 in Figura **??**, questo nodo di collegamento è quello generato dagli attributi e pertanto apparterrà ad N2 è necessario utilizzare esattamente due passi per raggiungere un altro nodo di N1
   Questa nuova struttura prende ora il nome di grafo bipartito

Si può notare come i due modelli siano molto differenti nella seconda scena viene a creato un grafo completo, ciò sta ad indicare che il numero di archi presenti è altissimo infatti segue la legge binomiale $\binom{n}{2}$ dove n rappresenta il numero di nodi coinvolti.
Per il caso in Figura **??** vengono aggiunti $\binom{4}{2} = 6$ archi però il numero di nodi rimane invariato.
Diversamente nella terza scena viene costruito un grafo a stella, si ha ossia un nodo centrale che fa da fulcro per collegare tutti gli altri nodi che sono legati esclusivamente a lui. Questo comporta che sempre in Figura **??** vengano aggiunti n archi e un nodo.

Dipendentemente dalla situazione si andrà a preferire uno piuttosto che l'altro, ecco le motivazioni che hanno spinto noi alla scelta.
Se vi sono tanti attributi e ognuno di questi appartiene ad un estremamente ristretto numero di nodi allora ci si può permettere di creare degli ipergrafi. Diversamente se ci sono anche pochi attributi che sono condivisi fra un alto numero di nodi la scelta ricade sul grafo bipartito.
Un esempio di quest'ultimo caso è facile da ideare, se esiste un attributo condiviso fra 100 nodi questo significa che con il grafo bipartito andremo ad aggiungere un nodo e 100 archi, mentre con l'ipergrafo non si aggiungerà nessun nodo ma in compenso bisogna creare $\binom{100}{2} = 4950$ nuovi archi.
Nei casi che è stato necessario gestire situazioni come quella presentata in quest'esempio erano presenti e quindi per limitare il numero di archi da maneggiare si è optato per il grafo bipartito.

È importante far presente che quando si effettuano visite sul grafo bipartito si incontrano tutti i nuovi nodi dell'insieme N2, che sono sconosciuti alle altre parti dell'algoritmo di CNRL , per questo motivo una volta che Node2Vec ha generato i cammini su tale grafo bisogna rimuovere da ognuno di questi gli ID dei nuovi nodi generati, altrimenti i futuri passaggi potrebbero ritornare un errore. Questo non sarebbe necessario se si fosse scelto l'ipergrafo in quanto non va a creare nessun nuovo nodo.

2.3.1 Grafo bipartito e ipergrafo, origine dei nomi

Si è parlato di ipergrafo e grafo bipartito senza però spiegarne le origini. Le Figure **??** e **??** mostrano la situazione di alcuni nodi prendendo in considerazione un unico attributo. Tuttavia nei casi reali vi sono molti attributi di conseguenza entrambe le nuove strutture sono un insieme di tante piccole sezioni, il grafo bipartito è un insieme di grafi a stella, mentre l'ipergrafo è un insieme di grafi completi. Nel dettaglio:

Grafo bipartito

Il grafo è detto bipartito in quando vi sono due insiemi di nodi, quelli che in precedenza son stati chiamati N1 (nodi originali) ed N2 (nodi derivanti dagli attributi). Tutti gli archi del grafo vanno da un nodo di N1 ad un nodo di N2 e viceversa visto che sono indiretti. Non esistono archi che vanno da N1 a N1 o da N2 a N2.
Questo è esattamente quello che ci si aspetterebbe dalla situazione, un arco da N1 ad N1 è un arco originario, che quindi non necessita dell'attributo per passare da un punto ad un altro, ma questi sono stati rimossi in principio. Mentre un arco da N2 a N2 semplicemente non avrebbe significato, due attributi legati non hanno motivo d'esistere.

Ipergrafo

Gli ipergrafi nella loro definizione formale non presentano semplici archi ma dispongono di iperarchi. I normali archi possono essere rappresentati mediante una linea in quanto presentano due estremità

entrambe legate ad un nodo. Diversamente gli iperarchi non possono essere rappresentati da una linea in quanto potrebbero arrivare ad avere infinite estremità, o meglio n estremità dove n è sempre il numero di nodi nel grafo. Tutti i nodi che sono estremità di un iperarco possono raggiungere una qualsiasi delle altre estremità con un passo di lunghezza uno. Se si volesse rappresentare ciò su un grafo normale è necessario costruire un grafo completo per ogni iperarco.
È dunque chiaro il collegamento con la situazione presentata, ogni attributo altro non è che un iperarco. Nel nostro caso è stato necessario rappresentare gli iperarchi come archi normali in quanto l'algoritmo di Node2Vec non è pensato per gestire la reale sintassi degli ipergrafi.

2.4 Creazione del grafo - esempio

In questa sezione viene mostrato come un grafo viene trasformato partendo dalla struttura di base fino a diventare un grafo bipartito o ipergrafo.

node	ID attributi	
1	11	
2	11	12
3	10	12
4	11	13
5	11	12
6	12	13
7	13	14

Tabella 2.1: Ad ogni nodo è associata la lista degli attributi che possiede

att	ID nodi			
10	3			
11	1	2	4	5
12	2	3	5	6
13	4	6	7	
14	7			

Tabella 2.2: Ad ogni attributo è associata la lista dei nodi a cui appartiene

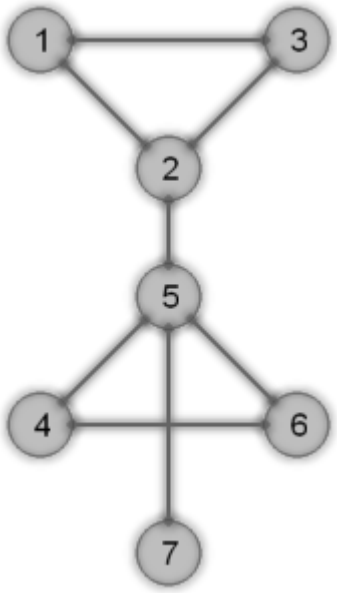


Figura 2.3: Rappresentazione della struttura originaria del grafo

Nella Figura **??** si vede la struttura del grafo di partenza.
Nella Tabella **??** si ha la lista di attributi che ogni nodo possiede.
Mentre la Tabella 2.2 è l'inversa della precedente (**??**) in quanto per ogni attributo sono mostrati tutti i nodi a cui appartiene.
Sono riportate entrambe le tabelle per comodità di comprensione, tipicamente solo una è sufficiente.
Ecco come i due tipi di grafi vengono generati.
Si osservi per primo l'ipergrafo mostrato in Figura **??**.

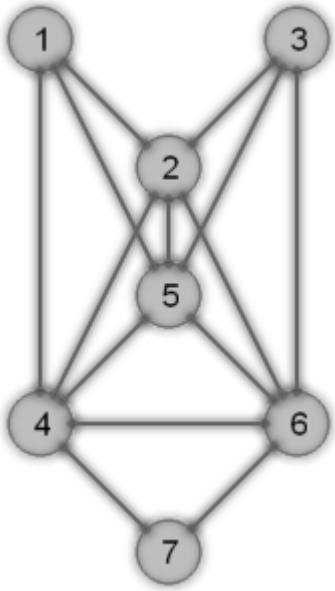


Figura 2.4: Rappresentazione dell'ipergrafo generato

- si può vedere come alcuni archi non sono più presenti, due esempi sono $(1, 3)$ e $(5, 7)$, si ricorda che non sono questi due archi ad essere stati rimossi in quanto tutti sono stati rimossi, semplicemente tutti gli altri sono stati nuovamente aggiunti al contrario di questi due
- i nodi che condividono gli stessi attributi vanno a formare un grafo completo, due esempi sono $[1, 2, 4, 5]$ con l'attributo 11 e $[4, 6, 7]$ con l'attributo 13
- se solo un nodo dispone di un particolare attributo, nessun arco sarà creato, questo è il caso dei due attributi 10 e 14.
  Questo può essere spiegato intuitivamente, in quanto si farebbe partire un arco da un nodo, ma questo non avrebbe mai una seconda estremità, non ha quindi senso di esistere. Oppure matematicamente in quanto è questo un caso limite infatti $\binom{1}{2} = error$ la linea numero 1 del triangolo di tartaglia è "1 1" non esiste il terzo elemento

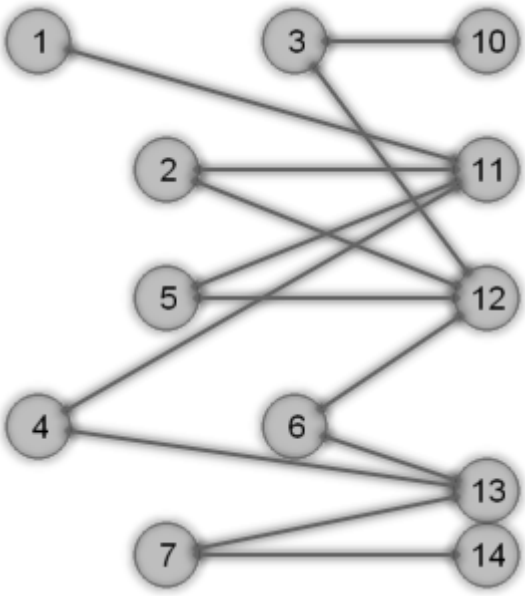


Figura 2.5: Rappresentazione del grafo bipartito generato

Si osservi ora la più complessa situazione del grafo bipartito mostrato in Figura **??**. Non è facile capire cosa succede.
I nodi dall'1 al 7, sulla sinistra, sono i nodi originali, mentre i nodi dal 10 al 14 (maggiori o uguali a 10), sulla destra, sono i nuovi nodi generati dagli attributi.

- i nodi sulla sinistra e sulla destra sono separati da un immaginaria linea verticale, e rappresentano i due insiemi di cui si parlava in precedenza, N1 e N2
- tutti gli archi attraversano la linea immaginaria, andando da sinistra a destra e viceversa
- tutti gli archi presenti nella struttura originaria di Figura **??** non sono più presenti in quanto son stati rimossi e mai più rimpiazzati, perché non possono esistere archi da N1 a N1
- i nodi che condividono un attributo creano un grafo a stella, due esempi sono $[1, 2, 4, 5]$ con l'attributo 11 e $[4, 6, 7]$ con l'attributo 13
- se solo un nodo possiede un particolare attributo questo non fa la differenza, infatti i due attributi 10 e 14 sono comunque legati alla parte sinistra come ci si aspetterebbe dalle tabelle

3 Metodi di valutazione

Questo capitolo è dedicato alla spiegazione di come si va a valutare una partizione creata dagli algoritmi d'individuazione delle comunità, com'è stato introdotto nel sommario, il metodo scelto nel corso del tirocinio è stato la modularità il cui simbolo è Q.
La modularità altro non è che un valore solitamente compreso all'interno dell'intervallo $[-1, 1]$, anche se questo non è sempre vero in quanto dipende strettamente da quale metodo d'implementazione si va ad utilizzare. Le prime persone che hanno lavorato sulla modularità sono state Newman e Girvan , in quanto necessitavano di un metodo formale per decidere fra due partizioni di nodi, quale fosse la migliore.
Newman e Girvan quando hanno scritto le prime applicazioni della modularità sono partiti da una semplice assunzione, un nodo non può appartenere a più di una comunità, questo elimina tutti i problemi dovuti alla sovrapposizione delle comunità. Per i casi studiati durante il tirocinio quest'assunzione non è sempre valida, ma inizialmente è molto comoda in quanto permette di ridurre notevolmente la complessità del calcolo della modularità.

Durante tutto il lavoro svolto si è passati attraverso tre differenti metodi, tutti e tre verranno ora mostrati ed ove possibile spiegati, si parte dal più semplice fino ad arrivare al più complesso.
Durante la spiegazione di ogni metodo viene assunto di lavorare con grafi non orientati, alla fine di ogni sezione sono indicati gli eventuali cambiamenti da applicare in caso si abbia invece a che fare con grafi orientati.

3.1 Modularità con massimi (mod_withMax)

È stato scelto questo nome in quanto questo metodo gestisce al massimo una comunità per ogni nodo, andando a ricalcare l'assunzione base di Newman e Girvan .
L'idea di base è che questo metodo va a calcolare un valore di modularità per ogni comunità, tutti questi elementi sono poi sommati fra loro per andare a creare il valore di modularità del grafo in se. È necessario far notare che questo metodo non permette la sovrapposizione delle comunità, per l'assunzione fatta, di conseguenza è impossibile che la sommatoria finale vada a considerare più di una volta i valori raccolti, da un qualsiasi elemento del grafo.
Questo metodo si basa sull'osservazione che è possibile identificare una comunità sulla base della frequenza degli archi contenuti al suo interno. Di fatto se un insieme di nodi dispone di una grande quantità di archi che li collegano direttamente allora questi nodi dovrebbero essere una comunità a sé

stante o almeno far parte della stessa, se così non è allora la valutazione della partizione sul grafo deve essere penalizzata in quanto non ha considerato questi nodi come parte dello stesso gruppo.
Il motivo per cui è stato scelto questo metodo, oltre al fatto che è semplice da calcolare, è proprio perché va a penalizzare le partizioni che non considerano una comunità molto evidente.
Di seguito la Formula completa:

$$Q = \sum_{c}^{C_r} \left(\frac{l_c}{L} - \left(\frac{d_c}{2L} \right)^2 \right) \tag{3.1}$$

Dove gli elementi dell'equazione sono:

- Q è il simbolo di modularità
- C_r è l'insieme delle comunità calcolate
- c è l'iteratore sulle comunità
- L è il numero totale di archi all'interno del grafo, solitamente indicato con m
- l_c è il numero totale di archi interni alla comunità c, questo significa che ognuno degli archi qui contati ha ambo i nodi alle estremità appartenenti alla comunità c
- d_c è il grado della comunità c, definito come la sommatoria dei gradi dei nodi che vi appartengono

Si può notare che $\frac{l_c}{L}$ è il peso della comunità c rispetto al resto del grafo, in quanto si calcola la percentuale di archi di cui la comunità c dispone. Mentre $\frac{d_c}{2L}$ è la densità di archi con cui la comunità c ha a che fare, ossia quanto, rispetto al totale, sono importanti i nodi che appartengono a questa comunità.

Quando si parla di grafo orientato l'unica parte da modificare è $\frac{d_c}{2L}$ che diventa $\frac{d_c}{L}$, in quanto in un grafo non orientato un arco incrementa di uno il grado di due nodi quello di partenza e quello d'arrivo, mentre se l'arco fosse orientato questo non accadrebbe in quanto aumenterebbe solamente il grado del nodo di partenza, da qui quel fattore moltiplicativo 2 di differenza.

3.2 Modularità con sovrapposizione (mod_overlap)

L'algoritmo qui descritto è preso dall'articolato intitolato "Modularity measure of networks with overlapping communities"[6].
Come si può intuire dal nome questo metodo permette a due comunità di condividere uno o più nodi e quindi d'aver una sovrapposizione. In linea con diversi altri metodi la modularità generata da questo algoritmo cade nell'intervallo $[-1, 1]$.
Se nel metodo precedente si calcolava un valore di modularità per ogni comunità e poi li si sommava in quanto non era prevista la sovrapposizione, qui la gestione è analoga si calcola un valore per ogni comunità e poi, invece di sommarli, se ne ricava una media in quanto la sovrapposizione è concessa e quindi uno stesso nodo può portare il suo contributo a diversi elementi della sommatoria.
Di seguito la Formula completa:

$$Q = M^{ov} = \frac{1}{K} \sum_{r=1}^{K} \left[\frac{\sum\limits_{i \in c_r} \left(\frac{\sum\limits_{j \in c_r, i \neq j} (a_{ij}) - \sum\limits_{j \notin c_r} (a_{ij})}{d_i \cdot s_i} \right)}{n_{c_r}} \cdot \frac{n^e_{c_r}}{\binom{n_{c_r}}{2}} \right] \tag{3.2}$$

Dove gli elementi dell'equazione sono:

- C_r è l'insieme delle comunità calcolate
- K è il numero di comunità calcolate, pari a $|C_r|$

- c_r è la comunità attuale
- n_{c_r} rappresenta il numero di nodi interni alla comunità c_r
- $n^e_{c_r}$ rappresenta il numero di archi interni alla comunità c_r
- $\binom{n_{c_r}}{2}$ è il numero massimo di archi potenzialmente presenti nella comunità c_r
- d_i è il grado del nodo i
- s_i è il numero di comunità a cui il nodo i appartiene
- a_{ij} vale 1 se l'arco dal nodo i al nodo j esiste, altrimenti prende il valore di 0

Ecco spiegati dettagli presenti all'interno di quest'Equazione 2.2.
Come per il metodo precedente si va a calcolare la densità della comunità (attraverso la Formula 2.3), tuttavia ora si confronta il numero di archi interni presenti rispetto al potenziale numero massimo, ossia il numero di archi presenti in un grafo completo con lo stesso numero di nodi.

$$\frac{n^e_{c_r}}{\binom{n_{c_r}}{2}} \tag{3.3}$$

In aggiunta, si considera la relazione fra il numero di archi interni e quelli uscenti (tramite la Formula 2.4), di conseguenza sembrerebbe che se il numero di archi uscenti è maggiore rispetto al numero di archi interni il valore di modularità vada ad assumere un valore negativo, in caso contrario positivo.

$$\sum_{i \in c_r} \left(\frac{\sum\limits_{j \in c_r, i \neq j} (a_{ij}) - \sum\limits_{j \notin c_r} (a_{ij})}{d_i \cdot s_i} \right) \tag{3.4}$$

In realtà non è sempre così, in quanto si deve tener conto anche del peso degli elementi d_i e s_i, questi due parametri hanno il compito di assegnare ad ogni arco un valore rappresentativo della sua importanza, che sia questo interno o uscente è completamente indifferente. Si può notare come il valore di un arco possa variare all'interno dell'intervallo $]0, 1]$ in quanto un arco ha inizialmente valore 1 e viene poi diviso per due interi positivi moltiplicati fra loro, in seguito viene considerato con peso positivo se favorisce la comunità ossia se è interno, negativo se così non è.
d_i è importante perché va a premiare gli archi che partono da un nodo con un basso grado. Il nodo avendo pochi archi, fa si che ognuno di questi sia molto importante, in quanto la somma totale dei pesi degli archi di un nodo è un valore costante uguale per tutti i nodi. Inoltre si premiano i nodi che appartengono a poche comunità, in quanto tali nodi meglio rappresentano la loro comunità d'appartenenza. Se un nodo è comune a tutte le comunità del grafo non è per nulla rappresentativo e quindi ogni volta avrà un influenza estremamente bassa.

È stato scelto questo metodo in quanto permette la sovrapposizione di comunità, ma anche perché andando a calcolare un valore di modularità per ogni comunità individuata nel grafo si può facilmente capire quale di queste dà un maggior contributo al risultato finale e quale invece tende solo a penalizzare la partizione a causa della sua bassa coesione.
Compresa la Formula generatrice, si può notare che un particolare valore di modularità può rivelare due importanti dettagli del grafo:

- un valore negativo sta a significare che i gruppi di nodi non sono densamente connessi al loro interno ma piuttosto sono legati a punti esterni. Pur con un valore negativo è possibile che gli archi interni siano in numero maggiore rispetto agli archi esterni, ma se ciò accade è perché i parametri di d_i e s_i hanno dato maggior rilevanza agli archi esterni
- se la modularità ha un valore, che in valore assoluto, si avvicina molto allo zero, sta a significare che il grafo valutato è estremamente sparso infatti il fattore moltiplicativo mostrato nell'Equazione 2.3 va a collassare i vari elementi della Formula vicino allo zero, di conseguenza anche la sommatoria non si allontanerà di molto da quel valore

Quando si parla di grafo orientato l'unica differenza di cui si deve tener conto la si applica alla Formula 2.3, si dà il caso che il numero massimo di archi in un grafo orientato sia il doppio del numero di archi per lo stesso grafo non orientato, questo per il semplice motivo che si possono creare due archi leganti gli stessi due nodi se presentano versi opposti. Pertanto il numero massimo cambia da $\binom{n_{c_r}}{2}$ per diventare $2\binom{n_{c_r}}{2}$.

3.3 Modularità modificata

Questo Algoritmo[24] è preso dall'articolo intitolato "Incorporating Implicit Link Preference Into Overlapping Community Detection"[23].
Questo è l'algoritmo che è stato scelto da chi ha scritto l'articolo di CNRL ed è per questa ragione che è stato adottato anche da noi. È estremamente importante perché permette di replicare i risultati illustrati nel documento cui facciamo riferimento, si ha quindi un punto fisso da cui partire e con cui all'occorrenza confrontarsi.
Sfortunatamente questo è il più lento dei tre metodi che vengono illustrati in questo capitolo, per il semplice motivo che è il più complesso sia logicamente che computazionalmente.
Di seguito vi sono due versioni della stessa Formula (senza 2.5 e con sistema 2.6):

$$Q = \frac{1}{M} \cdot \sum_{u,v \in V} \left[\left(A\left[u,v\right] - \frac{d_{in}\left(u\right) \cdot d_{out}\left(v\right)}{M} \right) \cdot \left| C_u \cap C_v \right| \right] \tag{3.5}$$

$$Q = \frac{1}{M} \cdot \sum_{u,v \in V} \begin{cases} 0 & \left| C_u \cap C_v \right| = 0 \\ \left[\left(A\left[u,v\right] - \frac{d_{in}(u) \cdot d_{out}(v)}{M} \right) \cdot \left| C_u \cap C_v \right| \right] & altrimenti \end{cases} \tag{3.6}$$

Dove gli elementi delle equazioni sono:

- M può assumere due valori a seconda che il grafo sia orientato o no, ossia misura m se indiretto assume invece il valore $2m$ se diretto.
  In tutto questo m è il numero di archi del grafo, ossia come di norma $m = |E|$
- u, v sono gli iteratori sui nodi del grafo, chiamati come di consueto V
- $A\left[u,v\right]$ rappresenta il peso assunto dall'arco (u,v), se tale arco non esiste il valore è 0, mentre se l'arco esiste e non è specificato diversamente il valore considerato è 1. Altri valori maggiori possono essere accettati, ma non quelli negativi
- $d_{in}\left(u\right)$ e $d_{out}\left(u\right)$ sono i gradi entranti e uscenti del nodo u, questi rispettivamente contano il numero di archi entranti e uscenti dal nodo.
  Se il grafo è indiretto, questi due valori preso un qualsiasi nodo saranno perfettamente uguali
- C_u è l'insieme delle comunità a cui il nodo u appartiene
- $|C_u \cap C_v|$ è il numero totale di comunità condivise fra i nodi u e v

Come per i metodi precedenti segue una spiegazione delle varie sezioni di tale Formula 2.5.
Cominciando dalla fine vi è l'elemento $|C_u \cap C_v|$, questo fattore moltiplicativo ci permette d'ignorare gli archi che legano nodi che non condividono nessuna comunità. Per capire il suo scopo si può pensare ad una partizione che non presenta sovrapposizioni, in questo caso tale componente permetterà di ignorare tutti gli archi che non sono interni ad una singola comunità ma passano da una all'altra. Ignorando ora l'assunzione base di Newman e Girvan si può dire che gli unici archi considerati sono quelli che rimangono interni ad almeno una comunità anche se è permesso loro essere di collegamento fra altre. Il funzionamento di questo componente è illustrato bene nella seconda versione della Formula 2.6, grazie al sistema si nota che se la condizione è verificata si può ignorare tutta la prima parte.

Oltre a filtrare gli archi utilizzabili questo componente assegna un importanza maggiore a quegli archi che connettono nodi che condividono molte comunità.

$$\frac{d_{in}(u) \cdot d_{out}(v)}{M} \tag{3.7}$$

La base che si ignora o moltiplica è un valore positivo, se l'arco esiste (questo grazie ad $A[u, v]$), mentre assume un valore negativo se l'arco non c'è, in quanto al peso 0 dell'arco inesistente si sottrae il fattore definito nella Formula 2.7.
Quest'espressione rappresenta la rilevanza di un arco, indipendentemente dalla sua esistenza. Se tale arco collega due nodi con gradi elevati risulta essere uno fra molti e quindi ha un'importanza limitata, se diversamente collega nodi con gradi bassi allora assume molta più importanza perché è un caso isolato e quindi prezioso.

4 Esperimenti

4.1 Origini dei grafi

In questa sezione vengono spiegati i dataset utilizzati e le loro origini.
Si possono dividere in due gruppi, non solo perché tali gruppi al loro interno presentino caratteristiche d'affinità, ma anche in quanto i grafi che vi appartengono sono stati utilizzati nel corso del tirocinio per due applicazioni differenti. Nella Tabella 3.1 sono elencati i dettagli tecnici di ogni dataset.

grafi	nodi	archi	archi/nodi	diretto	etichette	attributi
Cora	2708	5429	2.0	sì	7	1433
Citeseer	3312	4732	1.4	sì	6	3703
BlogCatalog	10312	333983	32.4	no	39	0
Gnutella	6301	20777	3.3	no	0	0
Dolphins	62	159	2.6	no	0	0
Karate	35	78	2.2	no	0	0

Tabella 4.1: Per ogni grafo sono indicate le sue caratteristiche principali

Esperimento principale: Cora - Citeseer

[11][17] Il dataset di **Cora** è un grafo diretto che rappresenta una rete di articoli scientifici sull'apprendimento automatico, ogni nodo è un articolo. Mentre ogni arco rappresenta il collegamento fra un documento è l'altro, se il documento A cita il documento B si avrà l'arco (A, B). La rete è costruita in modo che ogni nodo abbia almeno un arco entrante o uscente.
Ogni articolo appartiene ad esattamente una classe identificata da un etichetta. Ogni attributo rappresenta la presenza (deve apparire almeno 10 volte) o meno di una determinata parola nel testo del documento.

Il dataset di **Citeseer** è un grafo diretto che rappresenta una rete analoga a quella di Cora, anche qui si hanno articoli scientifici che si citano vicendevolmente. L'etichetta è la classe d'appartenenza cui l'articolo appartiene, e gli attributi son nuovamente la presenza o meno di certe parole nel testo.

Grafi per esperimenti minori

Questi quattro grafi vengono presentati in ordine decrescente nel numero dei nodi, così come fatto nella seconda parte della Tabella 3.1.

- **BlogCatalog**[7] rappresenta la rete di relazioni, di conoscenza, fra gli utenti di alcune piattaforme per blog

- **Gnutella**[8][15] questo grafo si rifà alla rete peer-to-peer per lo scambio di file di Gnutella nell'agosto 2002. Ogni nodo rappresenta un host e ogni arco un collegamento fra due host
- **Soc-Dolphins**[3][16] riporta la rete sociale di un gruppo di delfini al largo della Nuova Zelanda nel 2003
- **Karate**[22] raccoglie lo storico degli incontri in un club di karate universitario nel 1977. Ogni nodo è un membro del club, ogni arco indica uno scontro terminato in pareggio

4.2 Modello di un grafo

In questa sezione viene spiegato cosa si intende per modello di un grafo, e perché è tanto importante per gli algoritmi che vi sono costruiti sopra.
Come descritto nel capitolo sull'implementazione è necessario visitare il grafo per generare su di questo dei cammini. Questi vengono presi in input dall'algoritmo di Word2Vec che tramite una rete neurale va a descrivere ogni nodo che s'individua tramite un vettore di valori reali, mentre CNRL utilizza un metodo alternativo chiamato Latent Dirichlet Allocation (LDA)[1] o una sua variante detta HalfLDA.

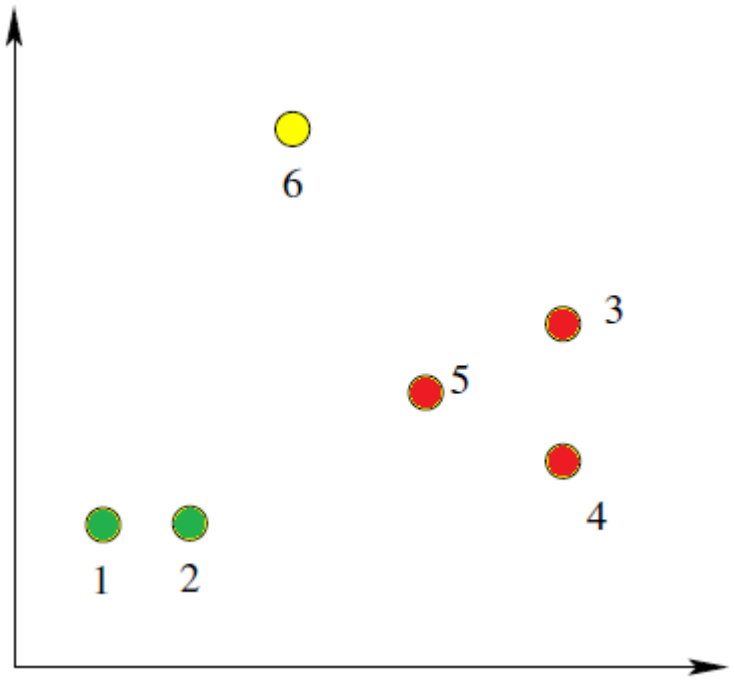


Figura 4.1: Son visualizzati i nodi d'un grafo che vengono rappresentati da un modello che dispone di due dimensioni

ID	X1	X2
1	1	2
2	2	2
3	7	5
4	7	3
5	5	4
6	3	8

Tabella 4.2: Tabella rappresentativa del modello dei nodi in Figura 3.1

Di norma ogni vettore è lungo 64, e ogni numero reale rappresenta una posizione lungo un asse in un piano a 64 dimensioni. Si può però pensare anche ad un caso più semplice, ad esempio in Figura 3.1 si

possono vedere sei punti che si può immaginare appartenessero ad un grafo e fossero legati fra loro in qualche modo. Una volta che son stati generati i cammini su tale grafo, e questi forniti ad uno dei due algoritmi, viene ritornata la Tabella 3.2 dove ad ogni ID di un nodo vengono associati due valori (qui interi per semplicità), sono usati due valori perché così son facili da mostrare con 64 sarebbe pressoché impossibile. Si possono dunque immaginare come coordinate su un piano cartesiano, ed è così che si arriva alla Figura 3.1, qui visivamente si può dire che esistono 3 gruppi distinti che sono evidenziati dai colori, abbiamo quindi $(1,2) - (3,4,5) - (6)$.
Escludendo l'influenza dei colori, il nostro occhio ci suggerisce l'esistenza di questi 3 gruppi in quanto i nodi che vi fanno parte sono vicini fra loro, questo è esattamente ciò che ci si aspetta dalla definizione di somiglianza, tanto più due nodi sono vicini tanto più questi sono simili. Si ricorda che esistono comunque molte definizioni formali di somiglianza e la distanza euclidea è solo una di queste.

Di conseguenza se due nodi molto simili, e quindi vicini, vengono collegati da un arco allora tale arco assume un valore molto elevato, vicino a 1, diversamente assumerà un valore molto basso, vicino a 0, se i nodi che lega sono diversi ossia molto lontani, questo valore lo chiameremo da ora in avanti coerenza[1] di un arco.

4.3 Link Prediction

Ecco il primo di tre algoritmi, che verranno spiegati in questo capitolo, tutti si basano sul modello del grafo appena spiegato.
L'algoritmo di Link Prediction ha lo scopo d'assegnare un valore al grafo in input, questo valore è una percentuale e per tale motivo ricade nell'intervallo $[0,1]$. Questa percentuale sta a rappresentare la coerenza degli archi del grafo, nel dettaglio un arco è molto coerente se lega due nodi simili, un grafo è tanto più coerente tanti più archi coerenti ha.

4.3.1 Dinamiche di funzionamento

Per primo viene caricato il grafo, sempre come lista d'archi in quanto sono questi il fulcro dell'algoritmo. Si va a spezzare gli archi in due gruppi dopo averli mescolati per non creare delle divisioni sempre uguali, tale rottura viene fatta sulla base del parametro F che indica quale sarà la percentuale degli archi adibiti all'addestramento del modello e quali invece saranno adibiti alla fase di test.
Il numero degli archi usati per il test viene dato dalla Formula 3.1

$$m \cdot \frac{1}{F} \tag{4.1}$$

$$m \cdot \left(1 - \frac{1}{F}\right) \tag{4.2}$$

mentre quelli utilizzati per l'addestramento corrispondono alla Formula 3.2, dove m è il numero di archi del grafo.
Il nuovo grafo (**G1**) creatosi, inseguito alla rimozione degli archi per il test, viene utilizzato per generare il modello.
Per ogni arco appartenente all'insieme di test (**Test=T**) se ne genera un altro (**Check=C**) tramite una coppia di nodi casuali assicurandosi che non corrispondano ad un arco già esistente. Si hanno quindi tre insiemi, il primo adibito all'addestramento stabilisce il modello necessario a discernere quale dei due restanti è la migliore selezione. Per ogni arco, di T e C, si va a veder quanto sono simili i nodi che lega e se ne calcola così la coerenza, grazie all'apposita funzione di similarità, ora disponibile. Gli archi possono essere valutati sulla base di questo nuovo parametro.
Siamo interessati a capire quanto erano buoni gli archi originari del grafo, T, rispetto a quelli generati casualmente, C.

$$\frac{\left(n_1 + \frac{n_2}{2}\right)}{n} \tag{4.3}$$

Si usa perciò la metrica detta AUC[5], che si basa sulla Formula 3.3, dove gli elementi sono:

[1] è il nome migliore che m'è venuto in mente non c'è un vero e proprio termine tecnico per questa definizione

- n è il numero di archi presenti nell'insieme di test, calcolato mediante la Formula 3.1
- $n1$ sono le volte in cui un arco di test T è migliore di un arco casuale di C
- $n2$ sono le volte in cui un arco di test T ha pari valore o quasi rispetto ad un arco casuale di C

Per ogni arco di T se ne associa casualmente un altro di C, e qui si guarda quanto valgono i due archi coinvolti se l'arco di T vale più dell'arco di C si incrementa di 1 il valore di AUC se uguali o quasi si incrementa di 0.5. Avendo fatto ciò con ogni arco se ne calcola la media.

Il valore finale della metrica AUC dipende fortemente da quale metodo si adotta per abbinare gli archi appartenenti a T e C, un accoppiamento sbagliato può fortemente sbilanciare il risultato, è per questo motivo che si va ad utilizzare un abbinamento casuale.
Inoltre si ha il parametro F che influisce infatti più questo si avvicina a 1 più cresce il numero di archi da utilizzare per la fase di test, diminuiscono di conseguenza i dati su cui fare affidamento per creare un buon modello che rappresenti appieno il grafo di partenza, e quindi il valore finale da aspettarsi è tendenzialmente più basso.
È necessario ricordare che la stima qui calcolata dipende fortemente dalla selezione iniziale, ed è per questo motivo che tutto questo processo non viene svolto solo una volta bensì F volte, così da andare a stabilizzare il valore calcolato tramite la media di tutte le iterazioni. Inoltre questo permette di utilizzare via via tutti gli archi per addestrare il modello di **G1**.

L'intero algoritmo si basa su confrontare gli archi grazie al valore che li rappresenta per individuare i più rilevanti, e quindi la parte più importante e critica è la generazione di tale valore mediante la funzione di similarità.
Questa può essere definita in tante maniere differenti in quanto si possono pesare diversi aspetti. Un esempio classico è basato sulla distanza euclidea più due nodi sono distanti nella rappresentazione del modello meno sono simili. Verranno mostrate le applicazioni di altre funzioni di similarità basate su diversi principi che però non verranno qui riportati.

4.3.2 Esempio

arco	autentico	dist	AUC
3-4	sì	2	1
2-6	no	$\sqrt{37}$	
4-5	sì	$\sqrt{5}$	0.5
3-5	no	$\sqrt{5}$	
5-6	sì	$\sqrt{20}$	0
2-5	no	$\sqrt{13}$	
1-2	sì	1	1
1-3	no	$\sqrt{45}$	

Tabella 4.3: Tabella riassuntiva del procedimento di Link Prediction

Consideriamo il modello descritto tramite la Figura 3.1 e la Tabella 3.2. Inoltre sappiamo che $F = 2$, gli archi originali adibiti al test sono $(1, 2), (3, 4), (4, 5), (5, 6)$ mentre quelli generati casualmente sono $(3, 5), (2, 5), (2, 6), (1, 3)$, i due insiemi sono nello stesso numero per creazione e perché così possono essere confrontati.
Nelle prime due colonne della Tabella 3.3 sono riassunti gli archi e la loro origine. Le colonne seguenti rappresentano invece i passaggi successivi dell'algoritmo.
Nella terza colonna si può notare che ad ogni arco è stato associato un valore che rappresenta la distanza euclidea misurata sul piano cartesiano generato dal modello fra i due estremi dell'arco. Qui la funzione di similarità premia i valori più bassi a discapito degli altri. Inoltre la Tabella è stata ordinata in modo che tutti gli archi di un insieme siano associati con uno dell'altro in maniera casuale, si può notare infatti che nella seconda colonna "sì" e "no" si alternano.
Nell'ultima colonna viene rappresentato l'incremento che si andrà ad apportare alla metrica AUC grazie

alla valutazione dei due archi corrispondenti. Questo valore dovrà poi esser diviso per il numero delle coppie in gioco per riportarlo nell'intervallo $[0, 1]$, in questo caso risulta $\frac{(1+0.5+0+1)}{4} = 0.625$
Si possono osservare alcuni peculiarità:

- l'accoppiamento degli archi viene fatto in maniera casuale per evitare uno sbilanciamento
- una selezione a favore degli archi autentici porterebbe ad avere un incremento nullo del valore di AUC, al contrario si potrebbe avere un incremento di due unità se si favorissero gli archi generati casualmente
- non si hanno archi ripetuti perché viene impedito alla creazione ma nulla vieta che un arco di C, corrisponda ad un arco usato in principio per generare il modello
- si può immaginare che più il valore di F è grande e quindi più è grande la selezione di archi per l'addestramento (grazie alla Formula 3.2) più il valore della calcolato cresca

L'algoritmo prevederebbe una seconda iterazione di tutto questo procedimento utilizzando gli archi in principio scartati come nuova base per il modello per poi calcolare la media delle percentuali.
Omettiamo questa fase perché uguale a quella appena illustrata.

4.3.3 Risultati

Le similarità utilizzate in questi esempi sono[10]:

- DW = DeepWalk
- CN = Common Neighbors[13]
- Salton = Salton Index[2]
- Jaccard = Jaccard Index
- RA = Resource Allocation[25]

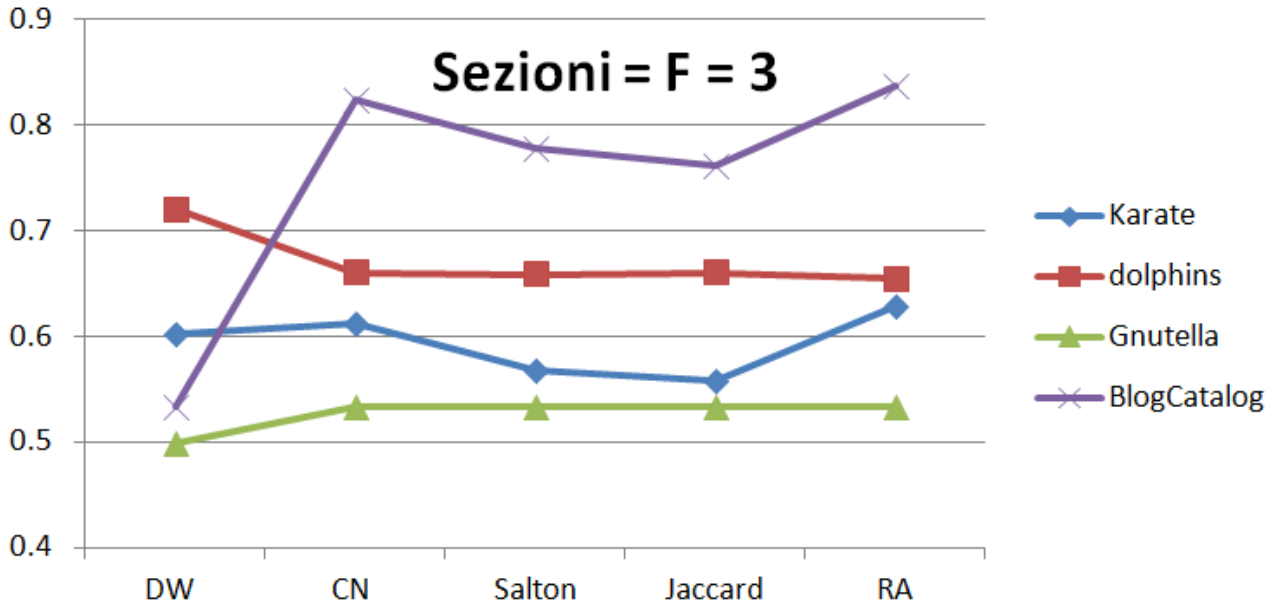


Figura 4.2: Link Prediction con tre sezioni, $F = 3$

Questo algoritmo ha tre possibili variabili su cui si può lavorare:

- **Il parametro** F (dall'inglese fold) che viene bloccato nella Figura 3.2, si può notare come ogni grafo abbia un livello su cui si attesta, BlogCatalog grazie al fatto che è molto denso ha un valore in media molto alto rispetto ai tre grafi restanti

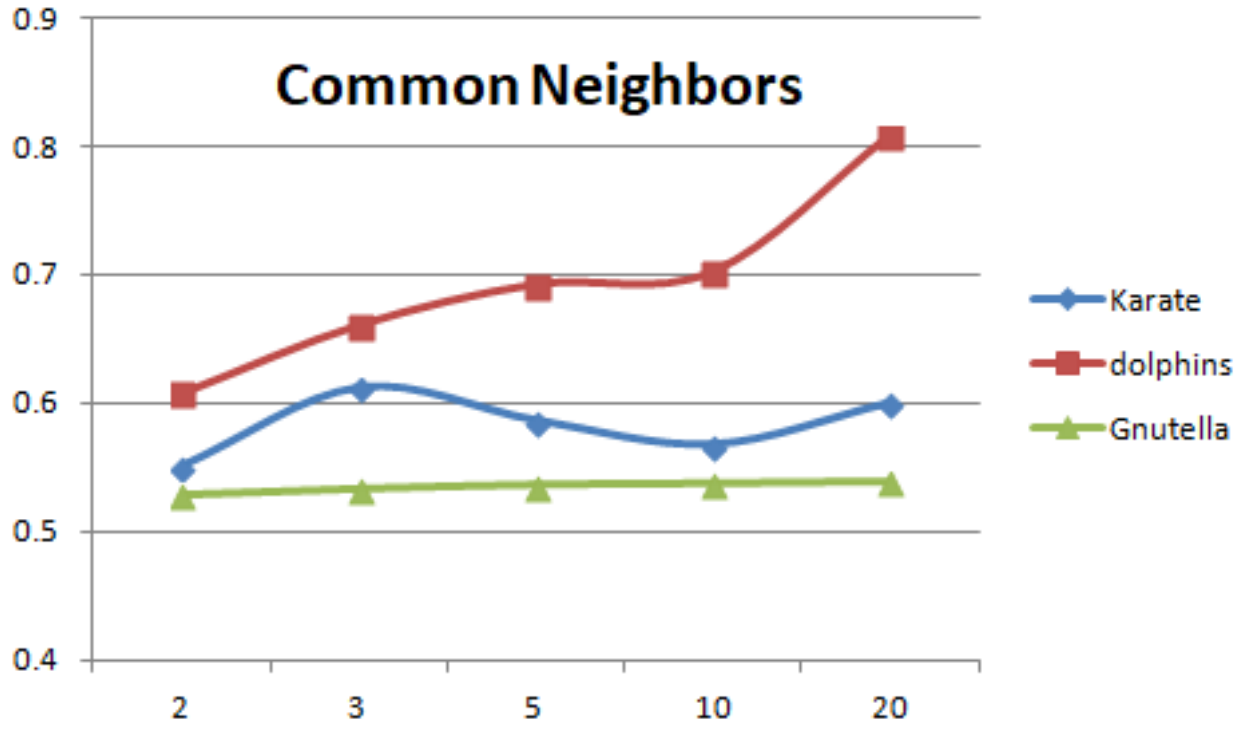


Figura 4.3: L'andamento della metrica di Common Neighbors, su tre grafi distinti attraverso differenti percentuali di selezione

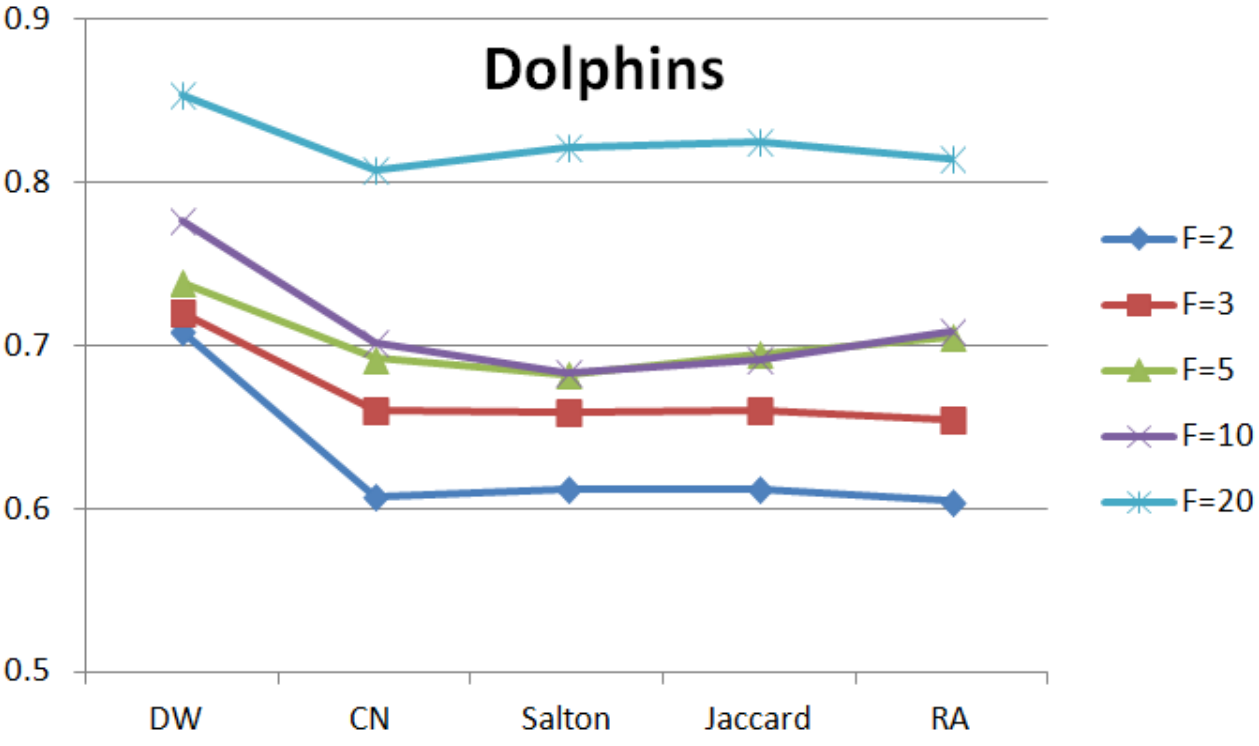


Figura 4.4: L'andamento del grafo dolphins su diverse metriche attraverso differenti percentuali di selezione

- Nella Figura 3.3 si lavora su un **unica metrica**, si utilizza solo la funzione di similarità denominata Common Neighbors, che si basa sui nodi geometricamente vicini agli estremi di un arco all'interno del modello del grafo per valutare la somiglianza.
  Qui si può notare come all'aumentare del parametro F il valore che si associa ad ogni grafo tende ad aumentare, questo è dovuto ad un modello meglio addestrato perché dispone di più dati in partenza, e quindi si ha una migliore valutazione

- La Figura 3.4 è forse la più semplice da osservare in quanto si osserva **un solo grafo**. Qui come prima si osserva che l'influenza del parametro F è altissima sul risultato finale, inoltre si può vedere che le prestazioni di DeepWalk siano un attimo più alte rispetto al resto che invece tende ad avere le stesse performance

Si precisa che questi sono degli esempi rappresentativi dell'andamento generale, che però non viene riportato in quanto sarebbe molto complesso da comprendere.

4.4 Classificazione dei nodi

Il problema della classificazione dei nodi/vertici punta a riconoscere partendo dalla rappresentazione di un elemento a quale classe questo appartiene, per definizione un elemento può appartenere ad una ed una sola classe, è tuttavia possibile pensare a classi interne ad altre classi o a sovrapposizioni. Per esempio data la classe A e la classe B si ha che, per come sono state definite, tutti gli elementi di A appartengono anche a B ($A \subseteq B$) di conseguenza $A \cap B = A$, tuttavia questo vale per l'insiemistica, nei problemi di classificazione fra A e B non c'è nessuna relazione e conseguentemente si ha che $A \cap B = \emptyset$.

4.4.1 Dinamiche di funzionamento

Il punto di partenza è costante, dato il grafo lo si visita per generare i cammini e con questi s'invoca l'algoritmo che genera il modello. Il modello viene disordinato e spezzato secondo il parametro di training ratio T_r, ossia percentuale d'addestramento, questo indica che percentuale del modello dovrà essere usata per l'addestramento, la restante sarà per i test.
In aggiunta si considerano anche le etichette o classi d'appartenenza di ogni nodo, si hanno quindi delle triplette contenenti:

- ID del nodo che può anche essere dimenticato
- il vettore di numeri reali presi dal modello che lo rappresenta
- l'identificativo della classe a cui si appartiene

Con questi dati viene addestrata la funzione di classificazione, o classificatore, il cui scopo sarà predire la classe d'appartenenza dato in input il vettore di un qualche nodo.

In seguito per ogni nodo appartenente all'insieme di test si cerca di predire la sua classe sottoponendo il suo vettore al classificatore e una volta terminato si confronta se l'esito corrisponde con la reale classe, nota grazie allo stesso file di etichette utilizzato per l'addestramento.
È importante far notare che il modello viene spezzato in due perché il classificatore deve essere addestrato su dati diversi da quelli che prenderà in seguito in input, altrimenti non ci sarebbe nulla da predire in quanto i dati passati vengono ricordati e quindi è impossibile sbagliare a dare una risposta.

La valutazione delle predizioni effettuate può avvenire mediante il metodo più semplice ossia il **tasso d'errore**, che corrisponde alla Formula 3.4, si contano quanti errori si son fatti rispetto al totale o si usa il metodo opposto ossia **l'accuratezza**, definita nella Formula 3.5, che conta i risultati con esito positivo rispetto al totale.

$$T_{err} = \frac{N(errori)}{N(previsioni)} \tag{4.4}$$

$$Acc = 1 - \left(\frac{N(errori)}{N(previsioni)}\right) = \frac{N(corretti)}{N(previsioni)} \tag{4.5}$$

Se si vogliono fare delle misurazioni particolari si sfrutta invece la **matrice di confusione**, mostrata in Tabella 3.4, ideata inizialmente per valutare casi con solo due opzioni (Sì-positivo / No-negativo), può essere generalizzata per gestire la valutazione di un classificatore con più di due esiti, tramite due metodi differenti.

- si amplia la matrice per avere invece che due righe e due colonne, K righe e colonne.
  Dove K è il numero di possibili valori ritornati dal classificatore

- si possono creare K matrici di confusione e ogni volta si sceglie una specifica classe come positiva tutte le altre vengono implose nel valore negativo

		Previsione	
		Sì	No
Risposta	Sì	TP	FN
corretta	No	FP	TN

Tabella 4.4: Viene rappresentata una matrice di confusione

TP	True Positive
FN	False Negative
FP	False Positive
TN	True Negative

Tabella 4.5: Significato delle sigle della matrice di confusione

Da questa matrice possiamo estrarre diverse misure:

- **accuratezza** qui prende una nuova formulazione: $Acc = \dfrac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$

- **sensibilità** penalizza le risposte negative sbagliate di conseguenza è meglio dare per positivo un esito se non è certo.
  Definita come: $S = \dfrac{TP}{TP + FN}$

- **precisione** penalizza le risposte positive sbagliate di conseguenza è meglio dare per negativo un esito se non è certo.
  Definita come: $P = \dfrac{TP}{TP + FP}$

- **Macro** precisione/sensibilità è la media aritmetica fra più valori di S o di P.
  Definita come: $Macro_S = \dfrac{S_1 + ... + S_n}{n}$

- **Micro** precisione/sensibilità è la media aritmetica delle componenti di S o di P prima di calcolarle, per poi considerarle un unica S o P.
  Definita come: $Micro_P = \dfrac{TP_1 + ... + TP_n}{(TP_1 + ... + TP_n) + (FP_1 + ... + FP_n)}$

- **F1-Score** è la media armonica di: micro o macro o normale sensibilità e precisione.
  Definita come: $F1 - Score = \dfrac{2}{\frac{1}{S} + \frac{1}{P}} = \dfrac{2 \cdot S \cdot P}{S + P}$

Nel nostro caso sensibilità e precisione non possono essere utilizzate in quanto ci sono troppi dati, mentre usare micro e macro non ha senso in quanto le classi sono perfettamente equivalenti, di conseguenza premiarne una a discapito di un'altra non ha significato. Per questo se serve si adotta l'F1-score. Tuttavia questa procedura non è veloce da calcolare pertanto spesso si adotta il più semplice e veloce metodo dell'accuratezza.

4.4.2 Esempio

ID	x	Previsione	Classe	Corretta
5	9	0	1	0
1	13	0	0	1
2	15	0	0	1
3	27	0	1	0
4	34	1	1	1
8	36	1	0	0
6	48	2	2	1
7	59	2	2	1

Tabella 4.6: Tabella riassuntiva del procedimento di classificazione dei vertici

Tutti i dati dell'esempio sull'algoritmo di classificazione sono riassunti nella Tabella 3.6. Nella prima colonna abbiamo gli ID dei nodi coinvolti, elemento che l'algoritmo ignora completamente, la seconda colonna contiene il vettore rappresentativo di ogni nodo, qui per semplicità è stato ridotto ad un solo numero.

$$C(x) = \begin{cases} 0 & se\ x < 30 \\ 1 & se\ 30 \leq x\ \&\ x < 45 \\ 2 & se\ 45 \leq x \end{cases} \tag{4.6}$$

Si assume il classificatore definito nella Formula 3.6, che darà come risposte i valori contenuti nella colonna "Previsione".
Mentre nella colonna "Classe" mostra il valore autentico del nodo. Infine nell'ultima colonna è indicato se la previsione è risultata corretta o meno.

Per una valutazione mediante accuratezza è sufficiente calcolare la media aritmetica dell'ultima colonna, ossia $Acc = \frac{1+1+1+1+1}{8} = \frac{5}{8} = 0.625$. Mentre per l'F1-score sarebbe necessario calcolare sensibilità e precisione di ognuna delle 3 classi, riassumerli mediante micro o macro, ed infine arrivare ad un valore con F1-score.

4.4.3 Risultati

I grafi scelti per questa applicazione sono Cora (Figura 3.5) e Citeseer (Figura 3.6) perché fra quelli presentati nella Tabella 3.1 sono gli unici che sono forniti di attributi sui nodi, e questo permette di mostrare come l'utilizzo del grafo bipartito per l'introduzione degli attributi modifica le prestazioni.

Sull'asse delle ordinate vi sono i valori compresi nell'intervallo $[0, 1]$ misurati mediante la tecnica dell'accuratezza. Mentre sull'asse delle ascisse vi sono i tre algoritmi utilizzati per creare il modello del grafo partendo dai cammini. Word2Vec è il metodo di controllo, mentre S-CNRL e E-CNRL che lavorano rispettivamente con LDA e HalfLDA, sono i nuovi algoritmi proposti. Entrambi per alcune parti continuano ad usare Word2Vec .
Sia Cora che Citeseer sono grafi originariamente diretti (misurazioni rosse), tuttavia si è provato ad interpretarli anche come se fossero indiretti (campionamento blu), l'ultimo andamento è dato dall'introduzione degli attributi (dati verdi).
Ecco alcuni dettagli che emergono dai due grafici:

- Word2Vec mostra prestazioni, anche se di poco, maggiori delle due alternative che invece tendono ad equivalersi

- la media dei valori delle misurazione nel grafico di Cora 3.5 (0.696) rispetto a quella di Citeseer 3.6 (0.491) è maggiore di circa $\frac{2}{10}$ questo è dovuto anche al fatto che Cora abbia una $densita' = \frac{archi}{nodi}$ maggiore rispetto a Citeseer

- un alta densità degli archi permette di creare molte interazioni fra i nodi e quindi il modello meglio rappresenta il grafo, si noti però che questo non è sempre facile da individuare, qui è

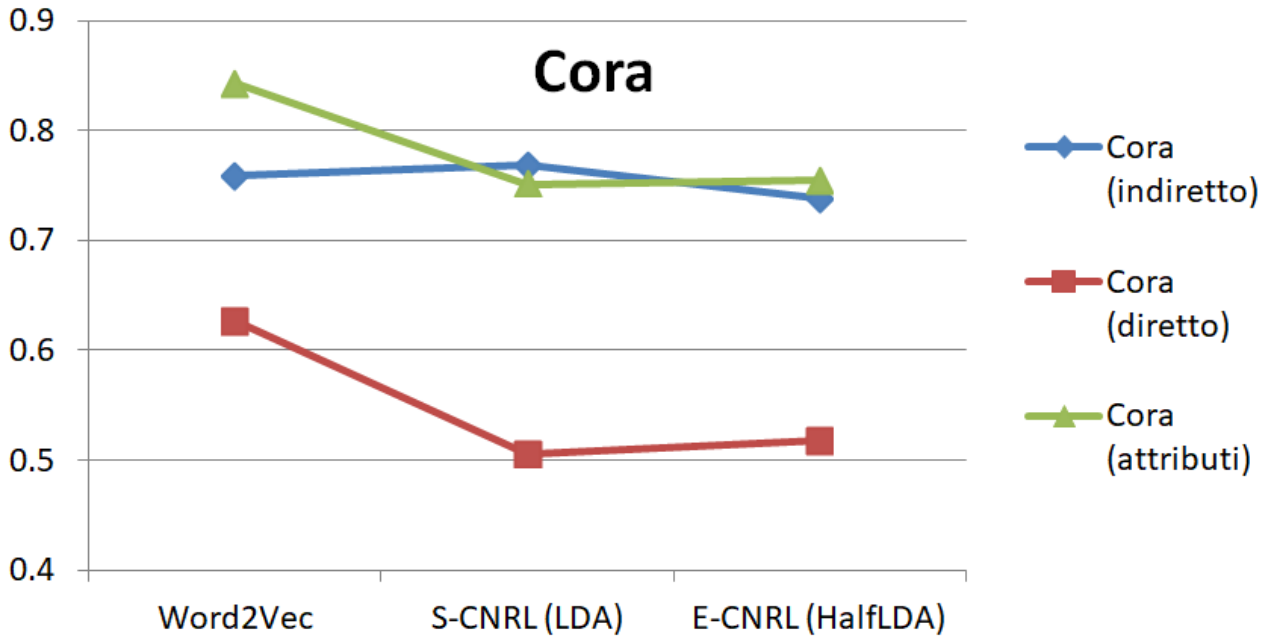


Figura 4.5: L'andamento del grafo Cora, con 3 differenti algoritmi di creazione del modello e 3 diverse interpretazioni iniziali, valutato mediante l'accuratezza

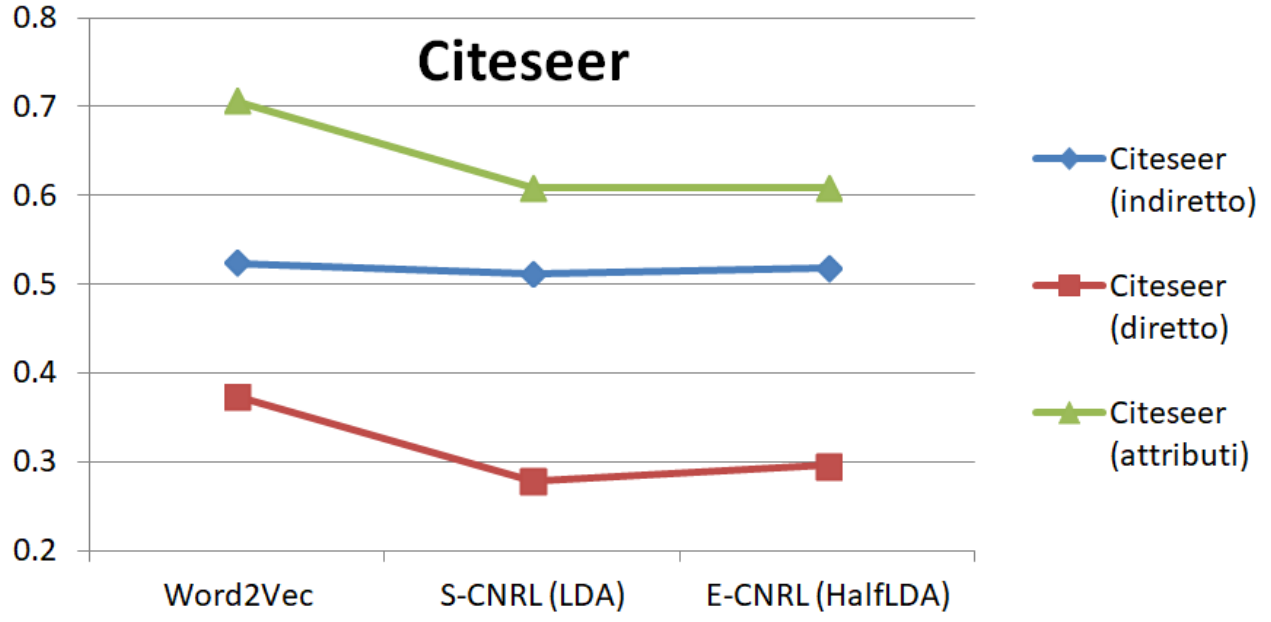


Figura 4.6: L'andamento del grafo Citeseer, con 3 differenti algoritmi di creazione del modello e 3 diverse interpretazioni iniziali, valutato mediante l'accuratezza

presente uno stacco evidente in quanto entrambi i grafi hanno un estremamente bassa densità si dice infatti che sono sparsi

- si è provato ad aumentare la densità considerando ambo i grafi come indiretti (ogni arco indiretto può essere rappresentato come due archi diretti) si ha quindi poco meno di un raddoppio della densità, è infatti possibile che un arco avesse già il suo opposto e quindi non risente del cambiamento. L'effetto per entrambi è stato un innalzamento del valore medio lungo i 3 algoritmi usati

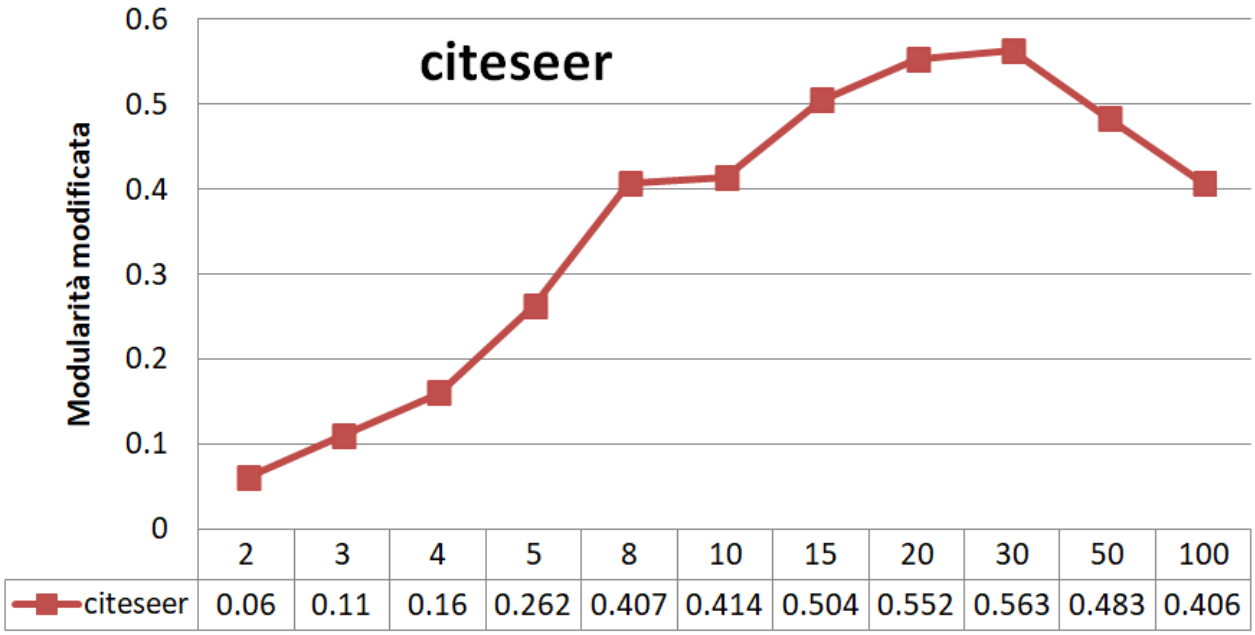
- con il grafo indiretto l'incremento di S-CNRL e E-CNRL è molto maggiore rispetto a quello di Word2Vec questo può indicare, che Word2Vec lavora molto bene con i grafi orientati a dispetto degli altri metodi

- l'introduzione degli attributi tramite il grafo bipartito ha notevolmente cambiato la situazione portando ad un incremento di prestazioni. Questi valori vanno confrontati con i dati del grafo orientato in quanto quello è il valore corretto, i punti blu del grafo non-orientato non sono comparabili in quanto servivano a mostrare come la densità influiva sul risultato tuttavia rappresentano un nuovo grafo diverso dall'originale, e quindi non paragonabile

4.5 Valutazione dell'individuazione di comunità

Questa sezione ripercorre il corpo principale del tirocinio, ossia l'integrazione degli attributi e la valutazione di un partizione mediante la modularità. Vengono presentate quattro situazioni ognuna approfondisce un aspetto affrontato.

4.5.1 Confronto numero comunità



	2	3	4	5	8	10	15	20	30	50	100
citeseer	0.06	0.11	0.16	0.262	0.407	0.414	0.504	0.552	0.563	0.483	0.406

Figura 4.7: Accuratezza rappresentativa al variare del numero delle comunità da generare

In Figura 3.7 è possibile vedere l'andamento dell'algoritmo di d'individuazione delle comunità LDA, applicato al grafo Citeseer di cui si considera solo la struttura, la valutazione vien fatta con la modularità modificata .
L'unico parametro che viene modificato è mostrato sull'asse delle ascisse ed è il numero di comunità che si vanno a ricercare all'interno del grafo. Ecco cosa s'osserva:

- la progressione del numero di comunità da ricercare è stata scelta per mostrare la rapida crescita della modularità quando piccoli numeri sono coinvolti

- il valore di 2 comunità è estremamente basso perché difficilmente riesce a rappresentare a dovere una vasta selezione di nodi

- la modularità cresce costantemente con l'aumentare delle comunità, che premiano sempre più le peculiarità del grafo

- c'è un massimo compreso fra 30 e 50 dove questa crescita si interrompe

- gli ultimi due dati 50 e 100 decrescono, questo è noto come il problema dell'overfitting, a causa di un addestramento eccessivo il risultato raggiunto non è più in linea con le aspettative.
  Via via che i gruppi di nodi si stringono perdono di rappresentazione portando così ad un decremento della modularità. Si osserva questo fenomeno anche in Figura 3.8

4.5.2 Metriche di valutazione

Nella Tabella 3.7 vengono mostrati i due grafi di Cora e Citeseer, valutati mediante tre differenti metriche di calcolo della modularità.
Ambo i grafi sono stati caricati senza considerare gli attributi dei nodi ma solo la loro struttura, la creazione del modello è avvenuta con S-CNRL e il suo algoritmo LDA, tramite cui sono state ricavate anche le 10 comunità che vengono valutate in Tabella.

Non ha senso confrontare i tre differenti metodi di calcolo della modularità, in quanto premiano aspetti differenti. Inoltre ognuno si posiziona su un diverso ordine di grandezza, spicca sopratutto mod_overlap che presenta tutti i valori molto vicini a 0, questo perché come riporta la Tabella 3.1 ambo i grafi sono estremamente sparsi e a causa di ciò mod_overlap ha il valore assoluto della modularità calcolata molto vicino a 0.
Tutti i metodi assegnano a Cora il valore più alto, e questo fa capire che se una partizione è nettamente migliore di un'altra allora verrà premiata indipendentemente dalla metrica di valutazione usata.
La modularità modificata è stata scelta come metrica ufficiale degli esperimenti, oltre al fatto che è quella usata nell'articolo di CNRL , anche perché presenta dei valori facilmente analizzabili e comprensibili, mod_overlap funziona bene ma è sempre difficile comprendere i risultati a cui s'arriva rischiando incomprensioni.

	mod_withMax	mod_overlap	modularità modificata
Cora	$2.04 \cdot 10^{-1}$	$1.21 \cdot 10^{-5}$	$5.31 \cdot 10^{-1}$
Citeseer	$8.42 \cdot 10^{-2}$	$-3.55 \cdot 10^{-6}$	$3.67 \cdot 10^{-1}$

Tabella 4.7: Confronto fra i metodi di modularità spiegati, partendo dal grafo normale con 10 comunità

4.5.3 Confronto metodi d'elaborazione

In Figura 3.8 vengono confrontati tre differenti metodi d'elaborazione dei grafi per arrivare a trovare le comunità.
Viene presentato il grafo Cora su cui si è cercato d'individuare tramite una progressione da 3 a 50 comunità, tutte valutate in seguito tramite la modularità modificata . I tre metodi utilizzati sono:

- noAtt: si considera in partenza unicamente la struttura del grafo, dai cui si ricavano i cammini e vengono elaborati con LDA

- Att: oltre ai cammini derivanti dalla struttura si crea anche il grafo bipartito degli attributi, il tutto elaborato sempre mediante LDA

- bigClam: è il metodo tratto dall'articolo "Overlapping community detection at scale: a nonnegative matrix factorization approach"[21], implementato dall'università di Stanford[18].
  È stato scelto come algoritmo di controllo per verificare l'andamento delle prestazioni di S-CNRL

Dalla Figura possiamo capire:

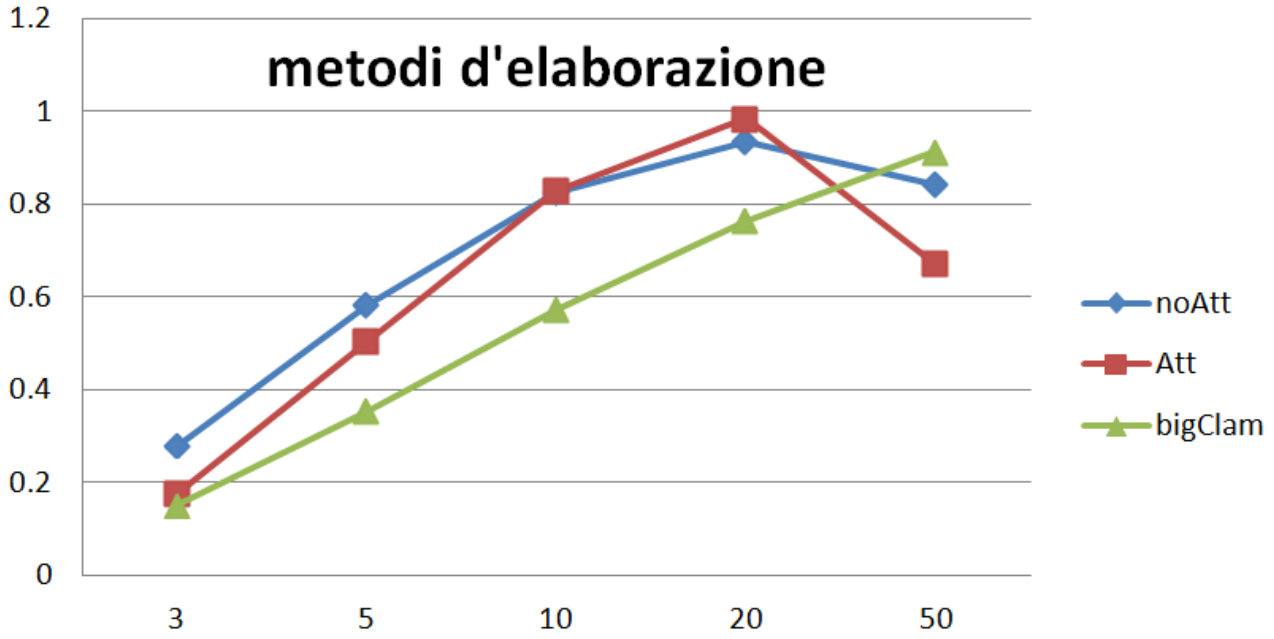


Figura 4.8: Prestazioni dei diversi procedimenti d'elaborazione del modello al variare del numero di comunità da ricercare

- come avviene in Figura 3.7 con l'aumentare del numero di comunità si ha il problema dell'over-fitting, qui è lo stesso.
  Per Citeseer il problema si rivela quando si cercano 50 comunità e analogo è per Cora, questo sembra non valere per bigClam anche se è inevitabile che accada con numeri molto alti di comunità cercate

- durante la crescita le prestazioni di bigClam restano costantemente inferiori

- l'apice è raggiunto mediante gli attributi con 20 comunità e un valore di $Q = 0.986$, è importante notare non tutti gli apici dei vari metodi si posizionano a 20 comunità, al contrario. BigClam sembra aver questo massimo oltre le 50 comunità

- valutare il grafo mediante e senza gli attributi sembra non influire troppo, anche se così non dovrebbe essere (meglio analizzato in Tabella 3.8

4.5.4 Confronto criteri di valutazione

Cora		valutazione	
		structure	hypergraph
elaborazione	Dir	$5.31 \cdot 10^{-1}$	$3.85 \cdot 10^{-3}$
	Att	$4.83 \cdot 10^{-2}$	$6.46 \cdot 10^{-5}$

Citeseer		valutazione	
		structure	hypergraph
elaborazione	Dir	$3.38 \cdot 10^{-1}$	$-9.46 \cdot 10^{-5}$
	Att	$5.32 \cdot 10^{-1}$	$1.50 \cdot 10^{-2}$

Tabella 4.8: Le misurazioni effettuate sono incoerenti, è quindi presente un errore

5 Conclusioni

???

Bibliografia

[1] David M Blei, Andrew Y Ng, and Michael I Jordan. Latent dirichlet allocation. Journal of machine Learning research, 3(Jan):993–1022, 2003.

[2] Gobinda G Chowdhury. Introduction to modern information retrieval. Facet publishing, 2010.

[3] D. Lusseau; K. Schneider; O. J. Boisseau; P. Haase; E. Slooten; S. M. Dawson. social network of dolphins. `http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/Newman/dolphins`, 2003.

[4] Aditya Grover and Jure Leskovec. node2vec: Scalable feature learning for networks. In Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining, pages 855–864. ACM, 2016.

[5] James A Hanley and Barbara J McNeil. The meaning and use of the area under a receiver operating characteristic (roc) curve. Radiology, 143(1):29–36, 1982.

[6] Anna Lázár, Dániel Abel, and Tamás Vicsek. Modularity measure of networks with overlapping communities. EPL (Europhysics Letters), 90(1):18001, 2010.

[7] Huan Liu Lei Tang. Blogcatalog data. `http://leitang.net/social_dimension.html`.

[8] Jure Leskovec, Jon Kleinberg, and Christos Faloutsos. Graph evolution: Densification and shrinking diameters. ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data (TKDD), 1(1):2, 2007.

[9] Lizi Liao, Xiangnan He, Hanwang Zhang, and Tat-Seng Chua. Attributed social network embedding. arXiv preprint arXiv:1705.04969, 2017.

[10] Linyuan Lü and Tao Zhou. Link prediction in complex networks: A survey. Physica A: statistical mechanics and its applications, 390(6):1150–1170, 2011.

[11] Qing Lu and Lise Getoor. Link-based classification. In Proceedings of the 20th International Conference on Machine Learning (ICML-03), pages 496–503, 2003.

[12] David Meyer. How exactly does word2vec work? 2016.

[13] Mark EJ Newman. Clustering and preferential attachment in growing networks. Physical review E, 64(2):025102, 2001.

[14] Bryan Perozzi, Rami Al-Rfou, and Steven Skiena. Deepwalk: Online learning of social representations. In Proceedings of the 20th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining, pages 701–710. ACM, 2014.

[15] Matei Ripeanu, Ian Foster, and Adriana Iamnitchi. Mapping the gnutella network: Properties of large-scale peer-to-peer systems and implications for system design. arXiv preprint cs/0209028, 2002.

[16] Ryan Rossi and Nesreen Ahmed. Network repository. `http://networkrepository.com`, 2013.

[17] Prithviraj Sen, Galileo Namata, Mustafa Bilgic, Lise Getoor, Brian Galligher, and Tina Eliassi-Rad. Collective classification in network data. AI magazine, 29(3):93, 2008.

[18] Stanford Network Analysis Platform. snap-dev-64. https://github.com/snap-stanford/snap-dev-64.

[19] Cunchao Tu, Hao Wang, Xiangkai Zeng, Zhiyuan Liu, and Maosong Sun. Community-enhanced network representation learning for network analysis. arXiv preprint arXiv:1611.06645, 2016.

[20] Cheng Yang, Zhiyuan Liu, Deli Zhao, Maosong Sun, and Edward Y Chang. Network representation learning with rich text information. In IJCAI, pages 2111–2117, 2015.

[21] Jaewon Yang and Jure Leskovec. Overlapping community detection at scale: a nonnegative matrix factorization approach. In Proceedings of the sixth ACM international conference on Web search and data mining, pages 587–596. ACM, 2013.

[22] Wayne Zachary. Karate club. https://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/Newman/karate.html, 1977.

[23] Hongyi Zhang, Irwin King, and Michael R Lyu. Incorporating implicit link preference into overlapping community detection. In AAAI, pages 396–402, 2015.

[24] Zhiya zhiyzuo. python-modularity-maximization. https://github.com/zhiyzuo/python-modularity-maximization.

[25] Tao Zhou, Linyuan Lü, and Yi-Cheng Zhang. Predicting missing links via local information. The European Physical Journal B, 71(4):623–630, 2009.