Graph mining

L. Rouvière
laurent.rouviere@univ-rennes2.fr

Décembre 2020

Table des matières

Présentation

- *Objectifs* : comprendre, décrire, interpréter les problèmes associés à des graphes.
- *Pré-requis* : théorie des probabilités, modélisation statistique, R (niveau avancé).
- *Enseignant* : Laurent Rouvière *laurent.rouviere@univ-rennes2.fr*
  - MCF à l'Université Rennes 2, PCC à l'Ecole Polytechnique.
  - Recherche : statistique non paramétrique, apprentissage statistique
  - Enseignements : statistique et probabilités (Université, école d'ingénieur et de commerce, formation continue).
  - Consulting : energie, finance, marketing, sport.

Programme

— *Matériel* : slides + notebook R. Disponible à l'url : https://lrouviere.github.io/INP-HB/

— *4 parties* :

1. Définitions - vocabulaire sur les graphes
2. Statistiques descriptives sur les graphes
3. Construction de graphes - modèles de graphes
4. Détection de communautés

1 Introduction

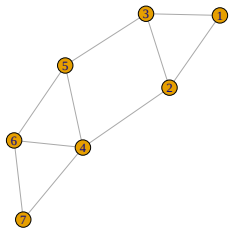
— Le *graph mining* ou *fouille de graphes* correspond à la fouille de données spécifiques aux graphes.

Graphe

Objet mathématique utiliser pour modéliser des connexions ou interactions entre individus ou entités :

— les entités sont appelées *nœuds* ou *sommets* ;

— une relation entre deux entités est modélisée par une *arête*.



Nombreuses applications

— *Réseaux routiers* entre villes, *réseaux aériens* entre aéroports...

— *Réseaux électriques* (cables reliant des prises)

— *Internet* (routeurs et ordinateurs connectés par ethernet ou wifi)

— *Réseaux* d'amis Facebook

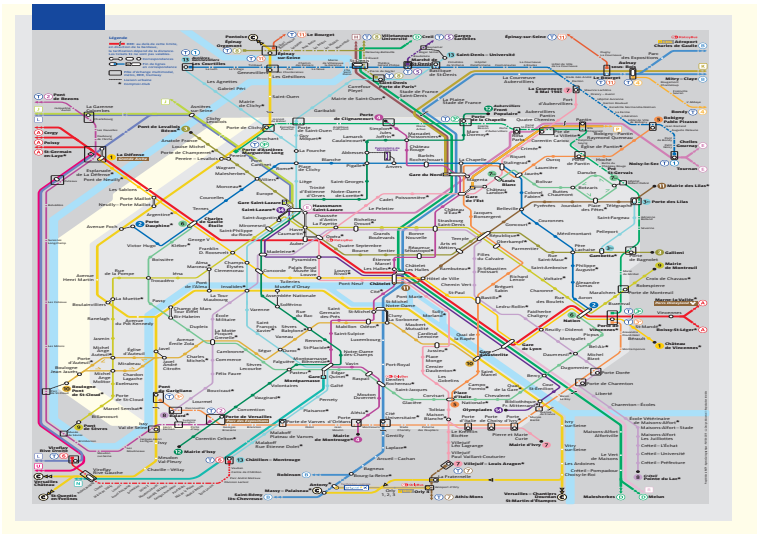
— *Communication* : personnes avec qui on communique (téléphone par exemple)

— *World wide web* (les nœuds sont les pages internets et les arêtes sont les hyperliens)

— *Réseaux de régulation* entre gènes

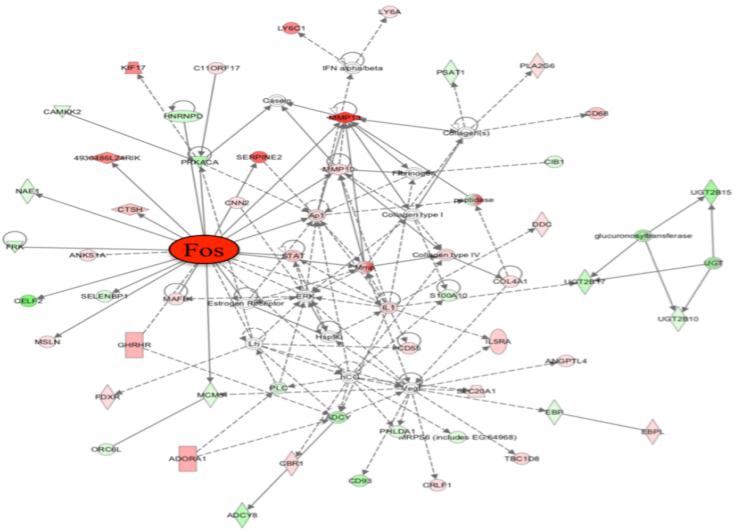
— *Systèmes de recommandation*...

Métro parisien



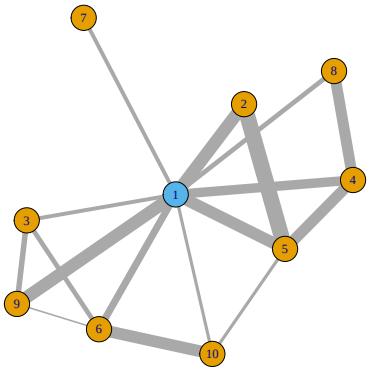
Réseaux sociaux

Réseaux moléculaires



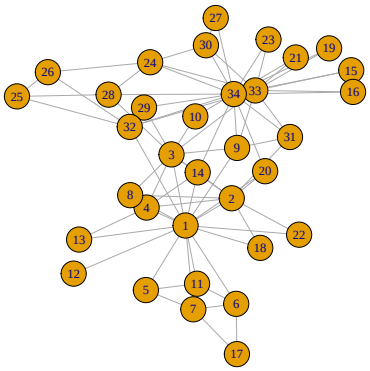
Communications

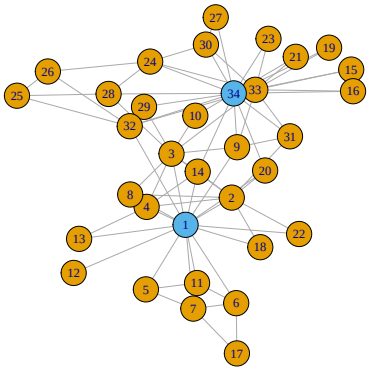
— *Objectif* : visualiser les communications d'un individu sur une période donnée.



Karate

— *Nœuds* : membres d'un club de karaté universitaire ;
— *Arêtes* : lien d'amitié calculé en fonction du nombre d'activités communes.





Plusieurs problématiques

Analyse exploratoire

Comprendre la structure d'interaction entre entités en analysant la topologie du graphe.

1. *Construction* d'un graphe : définition des nœuds et des arêtes.
2. *Visualisation* : comment représenter et dessiner un graphe ?
3. *Détection de communautés* : identifier des sous-groupes de nœuds très connectés.

Inférence sur les graphes

1. Modèles de *graphes aléatoires*.
2. *Prédiction de connexions* pour des nouveaux nœuds.

2 Définitions - vocabulaire sur les graphes

Graphe

Un *graphe* $G = (V, E)$ est composé :

— d'un ensemble V de *nœuds ou sommets* (vertices) qui représentent les individus ou entités qui interagissent entre eux,

— et d'un ensemble E *d'arêtes* (edges) qui indiquent la présence d'une interaction ou connexion entre deux noeuds :

$$\{i, j\} \in E \text{ si il y a une arête entre } i \text{ et } j \text{ dans } G.$$

Définitions

— Le nombre de nœuds $|V|$ est l'*ordre* du graphe. Le nombre d'arêtes $|E|$ est la *taille* du graphe.

— Un graphe est *dirigé* (ou *orienté*) lorsque ses arêtes le sont. Il est *non dirigé* sinon.

— Les graphes peuvent être *binaires* (arête présente ou absente), ou *valués* (arêtes munies d'un poids positif).

— Un graphe est dit *simple* s'il n'y a pas de boucles : (i, i) n'est jamais une arête.

— Le graphe *complet* ou *clique* est le graphe (non dirigé) qui contient toutes les arêtes possibles entre les sommets ($C^2_{|V|}$ arêtes).

Question ?

Comment stocker un graphe ?

Matrice d'adjacence

Définition

La *matrice d'adjacence* d'un graphe $G = (V, E)$ binaire est la matrice $|V| \times |V|$ de terme général

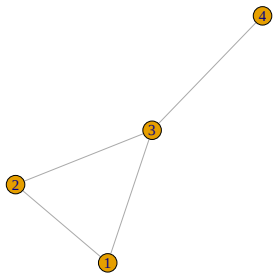
$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } \{i, j\} \in E \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Remarques

— Graphe non dirigé $\Longrightarrow$ A symétrique.
— Graphe simple $\Longrightarrow$ $A_{ii} = 0 \forall i$.
— Graphe valué $\Longrightarrow$ $A_{ij} = w_{ij} \in \mathbb{R}^+$.

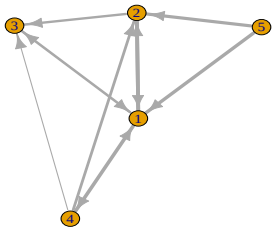
Exemple : graphe non dirigé

```
> A
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    0    1    1    0
## [2,]    1    0    1    0
## [3,]    1    1    0    1
## [4,]    0    0    1    0
> set.seed(1234)
> G <- graph_from_adjacency_matrix(A,
+                  mode='undirected')
> plot(G)
```



Exemple : graphe dirigé

```
> A
##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## [1,]    0    4    3    2    0
## [2,]    4    0    3    0    0
## [3,]    1    0    0    0    0
## [4,]    4    3    1    0    0
## [5,]    4    4    0    0    0
> G <- graph_from_adjacency_matrix(A,
+     mode='directed',weighted = TRUE)
> E(G)$width <- E(G)$weight
> plot(G)
```



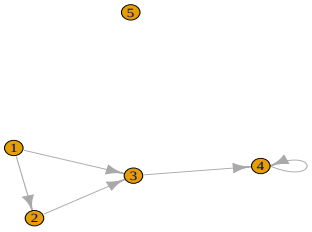
Remarque

— Pas toujours efficace en terme de stockage : $O(|V|^2)$.
— Utiliser des matrices sparses si le graphe est très creux.

Liste d'arêtes

— Il est souvent plus efficace de définir le graph en donnant une liste d'arêtes.
— *Attention* : penser à donner le nombre total de nœuds du graphe pour éviter d'oublier les nœuds isolés.

```
> G <- graph(edges=c(1,2,1,3,3,4,4,4,2,3),n=5)
> plot(G)
```

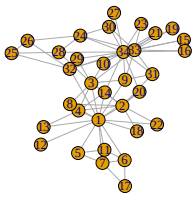


Visualisation d'un graphe

— *Etape importante* : elle permet de comprendre la structure du graphe : identification de nœuds importants, très connectés...
— *Différentes représentations* :
  1. en cercle, en étoile...
  2. selon différents algorithmes (voir [**?**])

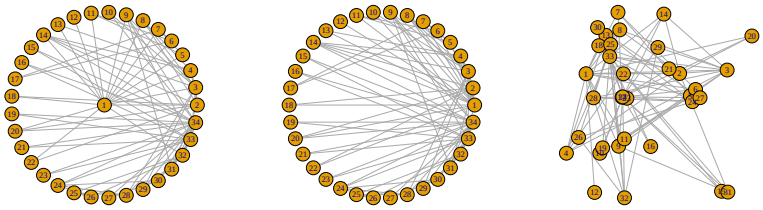
mais attention : certaines peuvent être trompeuses :

```
> plot(kar)
```



Autres représentations

```
> plot(kar,layout=layout_as_star(kar))
> plot(kar,layout=layout.circle(kar))
> plot(kar,layout=layout_randomly(kar))
```



Packages

— R : igraph, visNetwork, GGally.
— Python : NetworkX.

3 Statistiques descriptives sur les graphes

Caractéristiques d'un graphe

— De *nombreux indicateurs* permettent de décrire un graphe.

Objectifs

— Donner une version résumée du graphe.
— Décrire et comprendre les interactions entre entités :
  — transfert d'information entre deux sommets.
  — importance de certains sommets.
  — sous-structure particulière dans le graphe.
— Comparer deux graphes.
— Comparer un graphe avec un modèle de graphe aléatoire.

3.1 Caractéristiques générales

Distance - diamètre

— Un *chemin* entre $i \in V$ et $j \in V$ est une suite de nœuds et d'arêtes permettant de relier i et j.
— *Longueur d'un chemin* entre i et j : nombre d'arêtes qui composent ce chemin.
— *Distance ℓ_{ij} entre i et j* : longueur du plus court chemin qui les relie. Si les deux nœuds ne sont pas connectés : $\ell_{ij} = +\infty$.
— *Diamètre d'un graphe* : plus grande distance entre deux nœuds (quantité définie uniquement pour les graphes connexes).

Transfert d'information

Un petit diamètre indique que l'information circule rapidement dans le graphe entier.

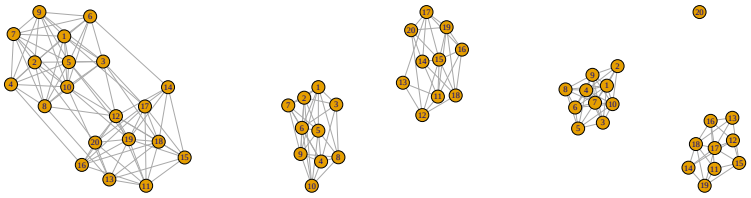
Connexité

— Une *composante connexe* est un sous-ensemble $C = \{v_1, \ldots, v_k\} \subset V$ tel que, pour tout $v_i, v_j \in C$, il existe un chemin dans G de v_i à v_j.

— Un nœud qui n'est connecté à aucun autre est dit *isolé* $\Longrightarrow$ il forme une composante connexe à lui tout seul.

— Un graphe est dit *connexe* s'il possède une unique composante connexe.

Exemple



Commentaires

— Gauche : graphe connexe.
— Centre : 2 composantes connexes.
— Droite : 3 composantes connexes, 1 nœud isolé.

Questions liées à la connexité

1. *Plusieurs composantes* connexes dans le graphe ?
   — présence de nœuds isolés (participant inactif) ?
   — 1 composante connexe = 1 groupe d'individus (ou 1 cluster) ?
2. Si non, est-ce *"presque" le cas* ? $\Longrightarrow$ Création de nouvelles composantes connexes en supprimant quelques nœuds ou arêtes, voir section 3.2 .
3. Recherche de *communautés* dans les graphes connexes : groupes de sommets très connectés entre eux et peu connectés avec les autres groupes, voir section 5.

Densité

— Un graphe simple possède au plus $|V|(|V|-1)/2$ arêtes si il est non dirigé et $|V|(|V|-1)$ si il est dirigé.

Densité

— Graphe non dirigé :

$$\text{den}(G) = \frac{|E|}{|V|(|V|-1)/2}.$$

— Graphe dirigé :

$$\text{den}(G) = \frac{|E|}{|V|(|V|-1)}.$$

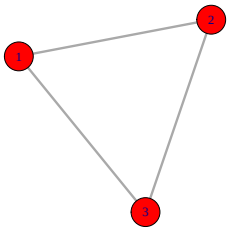
Remarque

Varie entre 0 (*graphe vide*) et 1 (*graphe complet ou clique*).

Densité locale

Recherche de *motifs particuliers* dans le graphe.

— Nombre de triangles dans un graphe : traduit des relations de *transitivité*

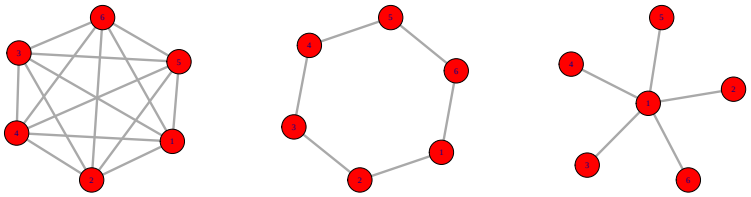


Intérêt

Réseaux sociaux : mes amis sont-ils amis ?

Autres motifs

1. Cliques de taille k donnée.
2. Cycles de longueur k donnée.
3. k stars...



Exemple

Comparer le nombre d'occurrences d'un motif à un nombre attendu ou observé.

Le coin R

La plupart des indicateurs s'obtiennent directement avec R

— Nombre de nœuds, d'arêtes, composantes connexes, diamètre, densité :

```
> vcount(kar)
## [1] 34
> ecount(kar)
## [1] 78
> count_components(kar)
## [1] 1
> diameter(kar)
## [1] 5
> edge_density(kar)
## [1] 0.1390374
```

— Nombre de triangles :

```
> head(count_triangles(kar))
## [1] 18 12 11 10  2  3
> length(triangles(kar))/3
## [1] 45
```

— Nombre de cliques de taille 3 à 5 :

```
> count_max_cliques(kar,min=3,max=5)
## [1] 25
```

3.2 Importance des nœuds

Objectif

— Identifier les nœuds centraux d'un réseau.

— Rechercher les nœuds influents, clés d'un réseau.

Comment ?

En définissant des *indicateurs de centralité* pour les nœuds d'un graphe.

Voisins, degré

— Les *voisins* de $i \in V$ sont les nœuds $j \in V$ tels que $i, j \in E$. On note

$$\mathcal{V}(i) = \{j \in V : \{i, j\} \in E\}.$$

Degré

— Le degré d_i d'un nœud i est le nombre de voisins de i : $d = |\mathcal{V}(i)|$.

— Calcul à partir de la matrice d'adjacence A :

  — *Graphe non dirigé* : $d_i = \sum_{j, j \neq i} A_{ij}$.

  — *Graphe dirigé* : degrés sortant et entrant

$$d_i^{\text{out}} = \sum_{j, j \neq i} A_{ij} \quad \text{et} \quad d_i^{\text{in}} = \sum_{j, j \neq i} A_{ji}.$$

Remarque

Notion la plus simple mais qui ne prend *pas nécessairement en compte la structure du graphe.*

Degré moyen

— *Graphe non dirigé* : $\bar{d} = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{i \in V} d_i$.

— *Graphe dirigé* :

$$\bar{d}^{\text{out}} = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{i \in V} d_i^{\text{out}} \quad \text{et} \quad \bar{d}^{\text{in}} = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{i \in V} d_i^{\text{in}}.$$

Remarque

— Pas toujours très informatif car souvent grande variabilité.

— plus intéressant : distribution des degrés.

Centralité de proximité

— *Objectif* : étudier si le sommet est à proximité des autres sommets et si il peut interagir rapidement avec eux.
— *Idée* : regarder la distance entre le sommet et les autres sommets.

Définition

Le *degré de centralité de proximité* (closeness centrality) du nœud i est défini par

$$C_c(i) = \frac{1}{\sum_{j \neq i} \ell_{ij}}$$

où ℓ_{ij} distance = longueur du plus court chemin entre i et j.

Commentaire

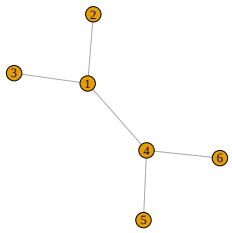
$C_c(i) \nearrow$ si sa distance aux autres nœuds est faible.

Exemple

nœud j	ℓ_{1j}	ℓ_{2j}
1		
2		
3		
4		
5		
6		

nœud j	ℓ_{1j}	ℓ_{2j}
1		
2	1	
3	1	
4	1	
5	2	
6	2	

nœud j	ℓ_{1j}	ℓ_{2j}
1		1
2	1	
3	1	2
4	1	2
5	2	3
6	2	3



— *Conclusion* : $C_c(1) = 1/7$, $C_c(2) = 1/11$.

```
> closeness(G)
## [1] 0.14285714 0.09090909 0.09090909 0.14285714 0.09090909 0.09090909
```

Centralité d'intermédiarité

Objectif : mesurer à quel point
— un nœud est important pour connecter deux autres nœuds dans le graphe.
— un nœud sert d'intermédiaire.

Définition

Le *degré de centralité d'intermédiarité* (betweeness centrality) du nœud i est défini par

$$C_B(i) = \sum_{j \neq i, k \neq i, j \neq k} \frac{g_{jk}(i)}{g_{jk}}$$

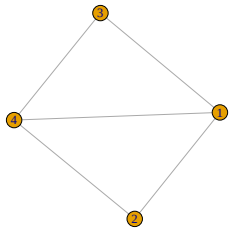
où
— g_{jk} est le nombre de plus courts chemins entre j et k.
— $g_{jk}(i)$ est le nombre de plus courts chemins entre j et k qui *passent par* i.

Exemple

(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$
$(2,3)$		
$(2,4)$		
$(3,4)$		

(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$
$(2,3)$	2	
$(2,4)$	1	
$(3,4)$	1	

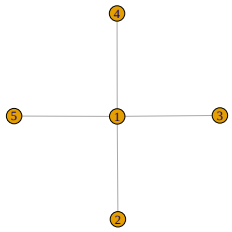
(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$
$(2,3)$	2	1
$(2,4)$	1	0
$(3,4)$	0	0



— *Conclusion* : $C_R(1) = 1/2$.

```
> betweenness(G1)
## [1] 0.5 0.0 0.0 0.5
```

Autre exemple : graphe étoilé




```
> betweenness(G2)
## [1] 6 0 0 0 0
```

Conclusion

On retrouve bien que seul le nœud 1 sert d'intermédiaire.

Commentaires

— Un des concepts les plus *importants*.

— $C_b(i) \nearrow$ s'il est *point de passage sur un grand nombre de chemins* entre deux nœuds.

— Mesure de l'utilité du nœud dans la *communication* et le *transfert d'information* dans le graphe.

Le coin R

Là encore les différents *degrés d'importance* des nœuds s'obtiennent directement avec R :

— Degrés et degré moyen :

```
> degree(kar) %>% head()
## [1] 16  9 10  6  3  4
> degree(kar) %>% mean()
## [1] 4.588235
```

— Degrés de proximité et d'intermédiarité :

```
> closeness(kar) %>% head() %>% round(3)
## [1] 0.017 0.015 0.017 0.014 0.011 0.012
> betweenness(kar) %>% head() %>% round(3)
## [1] 231.071  28.479  75.851   6.288   0.333  15.833
```

4 Modèles et construction de graphes

4.1 Quelques modèles de graphes

Pourquoi des modèles sur les graphes ?

— *Rappel* : un graphe $G = (V, E)$.

— *Modéliser* : trouver des lois de probabilités sur la *distribution* des nœuds et/ou sur celle des arêtes.

But

1. *Générer* des graphes "réalistes".
2. *Comprendre* un graphe réel en ajustant un (bon) modèle dessus.
3. Détecter des *communautés* ou *clusters* de nœuds.
4. Faire de la *prévision*...

Modèle d'Erdös et Rényi

— Modèle le plus *simple*, introduit dans les années 1950.

— En général pour des graphes *non dirigés*.

— *Modèle à deux paramètres* :

  — $n \in \mathbb{N}^\star$: nombre de nœuds ;

  — $p \in [0, 1]$ probabilité de connexion entre 2 nœuds.

d'Erdös et Rényi

Un graphe d'Erdös et Rényi $G(n, p)$ est un graphe à n nœuds où la probabilité qu'il y ait une arête entre 2 nœuds est une loi de Bernoulli $B(p)$.

Propriété (évidente)

La variable aléatoire D_i donnant le *degré du nœud* i dans un graphe $G(n, p)$ suit une loi binomiale $\mathcal{B}(n - 1, p)$.

— La loi binomiale est une loi à queue légère (peu de valeurs extrêmes).

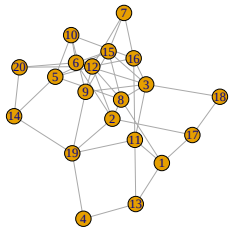
— Or, très souvent, dans les réseaux réels, la distribution des degrés est plutôt à queue lourde : un petit nombre de nœuds ont un degré élevé.

$\Longrightarrow$ modèle souvent un peu *trop simple* pour des graphes réels.

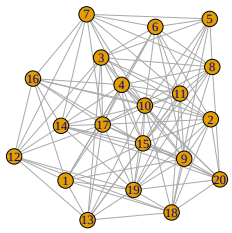
Le coin R

— On peut générer des graphes $G(n, p)$ avec la fonction *sample_gnp*.

```
> set.seed(1234)
> G1 <- sample_gnp(n=20,p=0.2)
> plot(G1)
```



```
> set.seed(1234)
> G2 <- sample_gnp(n=20,p=0.6)
> plot(G2)
```



Stochastic Bloc Model (SBM)

Idée

— Existence de groupes de nœuds.

— *Fortes connexions* entre les nœuds d'un même groupe.

— *Faibles connexions* entre les nœuds de groupes différents.

— *Modélisation* : représenter ces connexions à l'aide d'une matrice $K \times K$ où K est le nombre de groupes.

Graphe SBM

— Paramètres : K nombre de groupes, n nombre de nœuds, $\pi = (\pi_1, \ldots, \pi_K)$, $\Lambda = (\lambda_{k\ell})_{1 \leq k,\ell \leq K}$ matrice $K \times K$.

— $Z_1, \ldots, Z_n$ i.i.d. avec $Z_i \sim \mathcal{M}(n, \pi)$ (variable latente qui représente le groupe du nœud i).

— Une arête entre les nœuds i et j est représentée par une variable aléatoire A_{ij} telle que

$$A_{ij} | (Z_i = k, Z_j = \ell) \sim B(\lambda_{k\ell}).$$

Interprétation

La *distribution des arêtes* entre

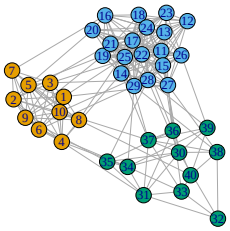
— les nœuds d'un même groupe est la même.

— les nœuds de deux groupes différents est identique aussi.

Exemple

— On peut générer des graphes SBM avec la fonction *sample_ sbm*.

```
> set.seed(1234)
> n <- 40
> eff <- rmultinom(n=40,size=1,prob=c(0.3,0.4,0.3)) %>% apply(1,sum)
> eff
## [1] 10 19 11
> bern.mat <- matrix(c(0.9,0.05,0.05,0.05,0.8,0.05,0.05,0.05,0.7),ncol=3)
> G1 <- sample_sbm(n,bern.mat,eff)
> gr <- rep(1:3,eff)
> plot(G1,vertex.color=gr)
```



SBM et détection de communautés

Idée

Utiliser les SBM pour *détecter des communautés* (alternative aux techniques qui seront vues en section 5) en

— estimant le nombre de groupes d'un SBM ;

— estimant les groupes de chaque nœud.

— Il existe différentes approches pour estimer ces quantités, notamment basées sur les *modèles de mélange* (voir [?]).

— Par exemple les méthodes *VEM* (approche variationnelle de l'algorithme EM) pour π et Λ

— et l'*ICL* (Integrated classification likelihood) pour le nombre de groupes K.

— Sur *R*, on pourra utiliser *BM_ bernoulli* du package blockmodels.

4.2 Construire un graphe

— Dans de nombreuses applications où on souhaite avoir une approche par graphe, ce dernier peut *ne pas être spécifié*.

— On dispose, de manière classique, d'*individus* $x_1, \ldots, x_n$ avec $x_i \in \mathbb{R}^p$.

Objectifs

Définir un graphe $G = (V, E)$ où

1. les sommets sont les individus $V = \{1, \ldots, n\}$;
2. les arêtes sont définies à partir de la proximité ou la similarité entre les individus.

Un exemple

— On considère un sous-échantillon des *iris de Fisher*.

```
> data(iris)
> set.seed(12345)
> donnees <- iris[sample(nrow(iris),30),]
> head(donnees)
##     Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width    Species
## 142          6.9         3.1          5.1         2.3  virginica
## 51           7.0         3.2          4.7         1.4 versicolor
## 58           4.9         2.4          3.3         1.0 versicolor
## 93           5.8         2.6          4.0         1.2 versicolor
## 75           6.4         2.9          4.3         1.3 versicolor
## 96           5.7         3.0          4.2         1.2 versicolor
```

Objectif

Construire un graphe en utilisant uniquement les variables continues.

Matrice de distance ou similarité

— Les arêtes vont être définies à partir de la *proximité-similarité* entre individus.

— Il faut donc définir une matrice de distance $D = (d_{ij}), 1 \leq i, j \leq n$ tel que d_{ij} est *petit* si i et j sont *proches*

— ou une matrice de similarité $S = (s_{ij}), 1 \leq i, j \leq n$ tel que s_{ij} est *grand* si i et j sont *similaires*

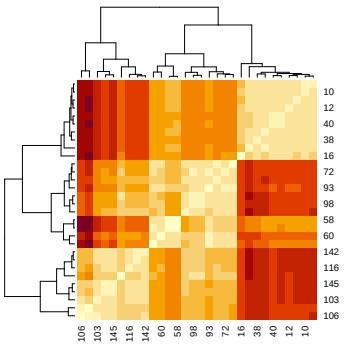
Exemple

— Sur les iris on peut calculer la *distance euclidienne* entre iris sur les 4 variables quantitatives.

```
> D <- as.matrix(dist(donnees[,-5]))
```

— Que l'on peut visualiser à l'aide d'un *heatmap* :

```
> heatmap(D)
```



Neighborhood graph

— Une fois D ou S calculée, on définit des *arêtes* en fonction de la proximité entre individus.

ε-neighborhood graph

Soit $\varepsilon > 0$, on appelle ε-neighborhood graph le graphe associé à la matrice d'adjacence

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } d_{ij} \leq \varepsilon \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Choix de ε

— Il influence le *nombre d'arêtes* : $\varepsilon \nearrow \Longrightarrow |E| \nearrow$.

— A faire en fonction de l'*analyse du graphe* (nombre de communautés par exemple...).

Graphe par plus proches voisins

— *Idée* : définir une arête entre i et j si i appartient aux $k$ppv de j et/ou j appartient aux $k$ppv de i.

Graphes de plus proches voisins.

Soit $k \leq n$.

— graphe des k plus proches voisins : matrice d'adjacence

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i \text{ est parmi les } k\text{ppv de } j \text{ ou } j \text{ est parmi les } k\text{ppv de } i \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

— graphe des k plus proches voisins mutuels : matrice d'adjacence

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i \text{ est parmi les } k\text{ppv de } j \text{ et } j \text{ est parmi les } k\text{ppv de } i \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Remarques

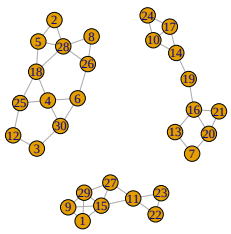
— Définis ainsi les graphes par k ppv sont *non orientés* mais il est facile d'obtenir un graphe orienté pour les k plus proches voisins (non mutuels).

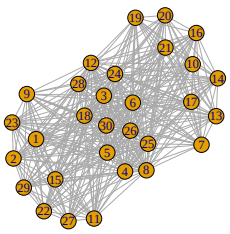
— *Choix de* k : il influence encore le nombre d'arêtes du graphe $k \nearrow \Longrightarrow |E| \nearrow$.

— Sur R, on peut utiliser la fonction *nng* du package *cccd*.

Le coin R

```
> library(cccd)
> gppv2 <- as.undirected(nng(dx=D,k=2,mutual=FALSE))
> gppv20 <- as.undirected(nng(dx=D,k=20,mutual=FALSE))
> plot(gppv2)
> plot(gppv20)
> ecount(gppv2)
## [1] 44
> ecount(gppv20)
## [1] 354
```

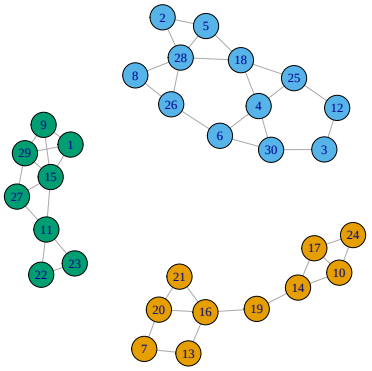




Remarque

Le graphe à 2 plus proches voisins permet d'identifier parfaitement les espèces.

```
> gppv2_bis <- gppv2
> V(gppv2_bis)$color <- donnees[,5]
> plot(gppv2_bis)
```



5 Détection de communautés

But

— Partitionner les nœuds du graphe en un nombre fini de groupes.

— Trouver des groupes de nœuds homogènes, des individus au comportement similaire.

Idéal

— Beaucoup de connexions entre les nœuds d'une même communauté.

— Peu de connexions entre les nœuds de communautés différentes.

Remarque

Thème très proche du *clustering*.

Comment ?

Différentes méthodes pour détecter des communautés :

— techniques basées sur la *modularité*.

— *clustering spectral*.

— méthodes *probabilistes* (modèles SBM).

— ...

5.1 L'edge betweeness

Idée

— Définir l'équivalent du node betweeness pour les arêtes.

— Identifier des arêtes qui relient des "groupes", puis les supprimer.

— Critère élevé pour des arêtes qui *relient des groupes*.

Définition

L'*edge betweeness* d'une arête e est défini par

$$E_B(e) = \sum_{i,j,i \neq j} \frac{g_{ij}(e)}{g_{jk}}$$

où

— g_{jk} est le nombre de plus courts chemins entre j et k.

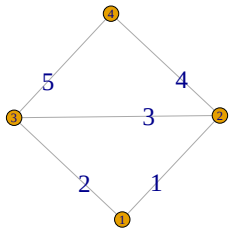
— $g_{jk}(e)$ est le nombre de plus courts chemins entre j et k qui *passent par* e.

Exemple

(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$
$(1,2)$		
$(1,3)$		
$(1,4)$		
$(2,3)$		
$(2,4)$		
$(3,4)$		

(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$
$(1,2)$	1	
$(1,3)$	1	
$(1,4)$	2	
$(2,3)$	1	
$(2,4)$	1	
$(3,4)$	1	

(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$
$(1,2)$	1	1
$(1,3)$	1	0
$(1,4)$	2	1
$(2,3)$	1	0
$(2,4)$	1	0
$(3,4)$	1	0

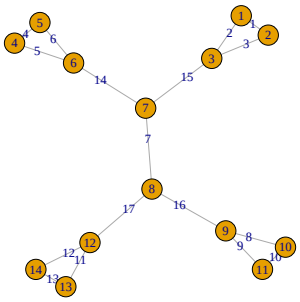


— *Conclusion* : $E_B(1) = 1.5$.

```
> edge_betweenness(G)
## [1] 1.5 1.5 1.0 1.5 1.5
```

EB pour clustering

— $E_b(e)$ *élevé* si e relie des groupes plutôt que des arêtes internes au groupe.



```
> edge_betweenness(G)
##  [1]  1 12 12  1 12 12 49 12 12  1 12 12  1 33 33 33 33
```

Classification par EB

— *Idée* : enlever les arêtes à fort EB les unes après les autres.

Algorithme [?]

1. Calculer l'EB de toutes les arêtes.
2. Retirer l'arête avec le plus grand EB.
3. Recalculer l'EB du nouveau graphe.
4. Retirer l'arête...
5. Jusqu'à isoler tous les nœuds.

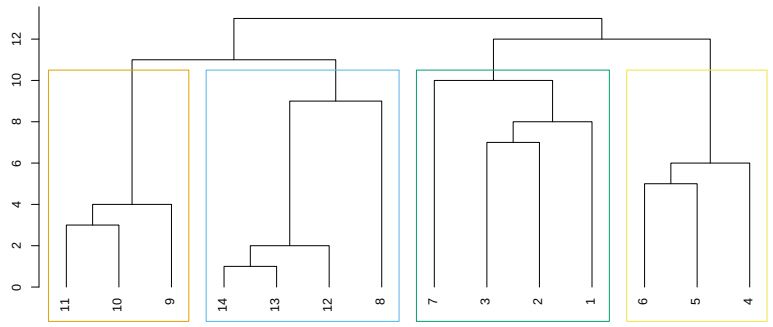
Remarque

— Processus *similaire à la CAH.*

— On peut visualiser l'algorithme avec un *dendrogramme.*

Le dendrogramme

```
> clust.EB <- cluster_edge_betweenness(G)
> dendPlot(clust.EB)
```



Question

Où couper le dendrogramme pour obtenir les groupes ?

Couper le dendrogramme

— On se donne un *critère* qui mesure la qualité d'une partition associée à une coupure.

— On choisit la partition qui *optimise le critère choisi.*

— *Critère usuel* : la modularité

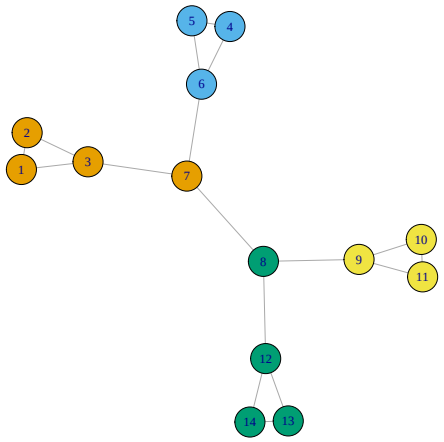
```
> clust.EB$modularity %>% round(3)
##  [1] -0.074 -0.022  0.074  0.126  0.223  0.272  0.372  0.420  0.521  0.543
## [11]  0.566  0.503  0.441  0.000
```

Conclusion

On retiendra une partition en *4 groupes.*

Visualisation des groupes

```
> plot(G,vertex.color=clust.EB$membership)
```



5.2 La modularité

— *Rappel* : $G = (V, E)$ un graphe, A sa matrice d'adjacence.
— On cherche une *partition de* V l'ensemble des nœuds en K groupes ou communautés $\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_K$.

Idée

1. Se donner un critère qui mesure la performance d'une partition.
2. Choisir la partition qui optimise le critère choisi.

Modularité

— Un des critères les *plus utilisés*.
— *Idée* : comparer la performance de la partition *sur le graphe* à sa performance sur un *graphe aléatoire*.
— Soit $\mathcal{C} = \{\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_K\}$ une partition des nœuds de $G = (V, E)$.

Modularité de $\mathcal{C}$

$$\mathcal{M}(\mathcal{C}) = \frac{1}{2m} \sum_{1 \leq i,j \leq n} (A_{ij} - P_{ij}) \delta(\mathcal{C}(i), \mathcal{C}(j))$$

où

— $m = |E|$.
— $\delta(\mathcal{C}(i), \mathcal{C}(j)) = 1$ si i et j sont dans le même élément de la partition, 0 sinon
— P_{ij} représente l'espérance du nombre d'arêtes entre i et j sous un modèle nul (graphe aléatoire) à définir.

Interprétation

— $-1 \leq \mathcal{M}(\mathcal{C}) \leq 1$;
— $\mathcal{M}(\mathcal{C}) \nearrow$ *plus d'arêtes* dans les communautés que le modèle nul (*bonnes communautés*) et réciproquement lorsque $\mathcal{M}(\mathcal{C}) \searrow$.

Le modèle nul

— Il peut être spécifier de *plusieurs façons* (voir [**?**]).

— *Première approche* : les m arêtes sont *distribuées uniformément* entre les paires de nœuds :

$$P_{ij} = \frac{2m}{n(n-1)}, \quad 1 \leq i, j \leq n.$$

— *Seconde approche* : générer aléatoirement les arêtes en conservant les degrés de centralité des nœuds :

$$P_{ij} = \frac{d_i d_j}{2m}, \quad 1 \leq i, j \leq n.$$

On a alors

$$\mathcal{M}(\mathcal{C}) = \frac{1}{2m} \sum_{1 \leq i,j \leq n} \left(A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2m} \right) \delta(\mathcal{C}(i), \mathcal{C}(j))$$

— C'est souvent la *seconde approche* qui est utilisée.

— Le terme

$$A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2m}$$

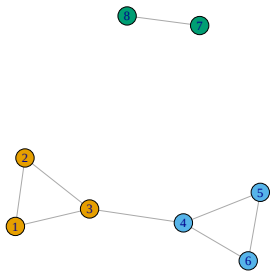
correspond à la *différence de lien* entre le graphe considéré et un graphe aléatoire dont la contraine est la conservation des degrés de sommets.

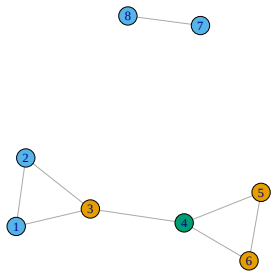
— Si on a *beaucoup d'arêtes connectés dans les communautés* alors A_{ij} sera souvent plus grand que $\frac{d_i d_j}{2m} \Longrightarrow \mathcal{M}(\mathcal{C}) \nearrow$.

— Sous R, on utilise la fonction modularity.

Le coin R

— On considère les *2 partitions* suivantes pour le même graphe.





— On obtient les *modularités* avec

```
> modularity(G,cl1)
## [1] 0.4765625
> modularity(G,cl2)
## [1] 0.0078125
```

Maximisation de la modularité

— *Idée* : Considérer toutes les partitions et choisir celle qui maximise la modularité.

Approche exhaustive

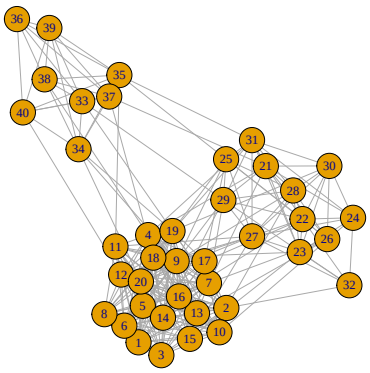
1. $\mathcal{V}$: ensemble des partitions des nœuds de $G = (V, E)$.
2. Pour chaque $\mathcal{C} \in \mathcal{V}$ calculer $\mathcal{M}(\mathcal{C})$.
3. Renvoyer

$$\underset{\mathcal{C} \in \mathcal{V}}{\operatorname{argmax}} \mathcal{M}(\mathcal{C}).$$

— Sur R on utilise cluster_optimal.

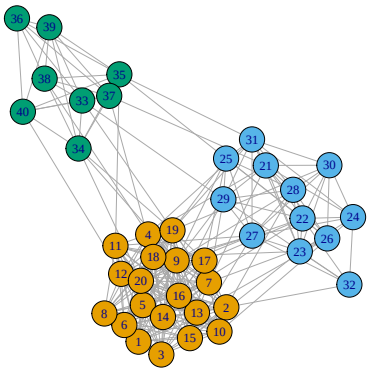
Le coin R

```
> plot(G1)
```



Le coin R

```
> cl.exh <- cluster_optimal(G1)
> V(G1)$color <- membership(cl.exh)
> G1$palette <- categorical_pal(length(cl.exh))
> plot(G1)
```



Complexité

— Problème *NP complet*.

— Si $|V|$ est "grand", *impossible dans un temps raisonnable*.

— Solution : utiliser des *algorithmes itératifs* qui vont converger vers des *maxima locaux*.

La méthode de Louvain

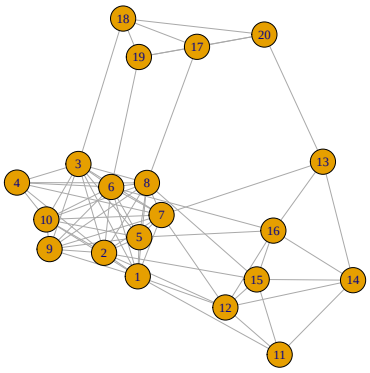
— Proposée par des chercheurs français qui se sont retrouvés à Louvain [?].

— Elle repose sur *deux phases distinctes*, répétées itérativement.

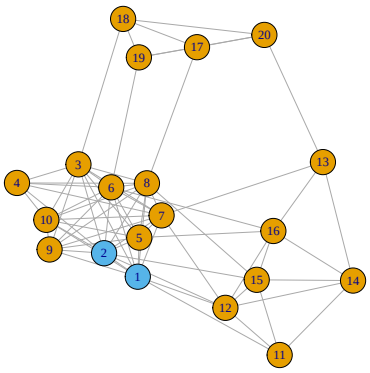
— On pourra consulter l'url suivante pour plus de détails :
http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/RCP216/coursFouilleGraphesReseauxSociaux2.html

Passe 1 - phase 1, itération 1

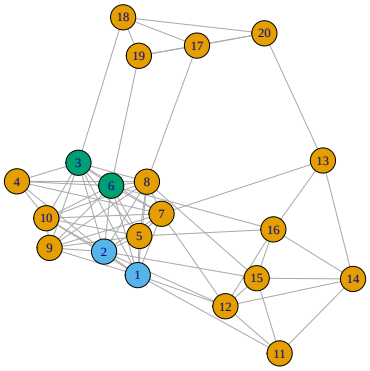
— Chaque *nœud* forme une communauté.

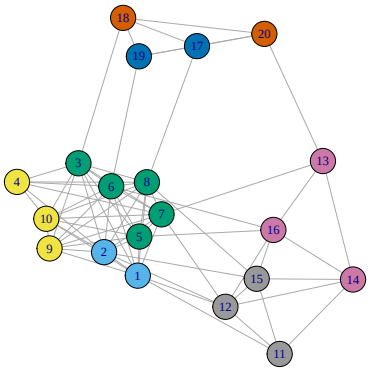


— Pour chaque nœud i, on place i dans la communauté de chacun de ses *voisins* j.
— Calcul du *gain de modularité*.
— On place i dans la communauté où le gain est maximum.



— Même procédé pour tous les nœuds suivants.

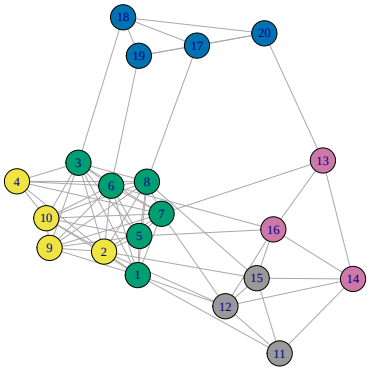




Fin de l'itération 1

Itération 2, ...

— L'itération 1 est *répétée* sur ce nouveau graphe...
— et ainsi de suite jusqu'à ce qu'il n'y ait *plus d'amélioration.*
— On obtient un maximum local de la modularité.



Fin de la phase 1

— A la fin de la phase 1, on obtient un *graphe valué* $G1 = (V1, E1)$
— muni de communautés $\mathcal{C}_1 = \{C_{1,1}, \ldots, C_{1,p_1}\}$.

Sur l'exemple

On a *5 communautés*.

Passe 1 - phase 2

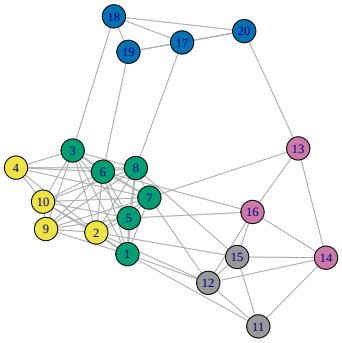
Construction d'un nouveau graphe

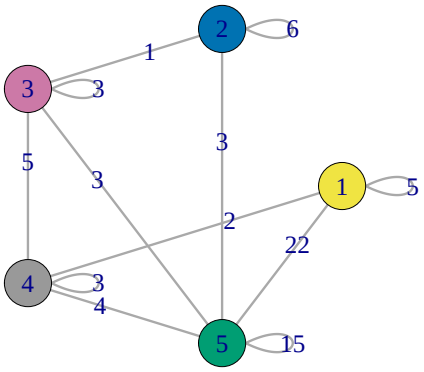
— 1 nœud = 1 communauté.
— Arêtes valuées : le poids correspond au nombre de liens entre les nœuds de chaque communauté.

— Ce nouveau graphe peut s'obtenir en calculant sa *matrice d'adjacence*.
— Sur l'exemple, on a

```
> A
##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## [1,]    5    0    0    2   22
## [2,]    0    6    1    0    3
## [3,]    0    1    3    5    3
## [4,]    2    0    5    3    4
## [5,]   22    3    3    4   15
```

Obtention du nouveau graphe





Fin de la phase 2 et de la passe 1

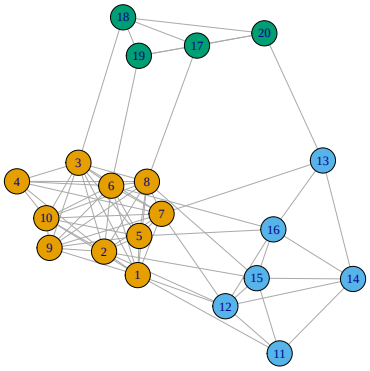
— La passe suivante consiste à *ré-appliquer les deux phases* au graphe obtenu en fin de pass1.

— Les passes sont *répétées* jusqu'à atteindre un maximum de modularité.

— Sur *R*, on utilise cluster_louvain.

```
> cl.louv <- cluster_louvain(g)
> V(g)$color <- cl.louv$membership
> plot(g)
```

Représentation des "communautés Louvain"

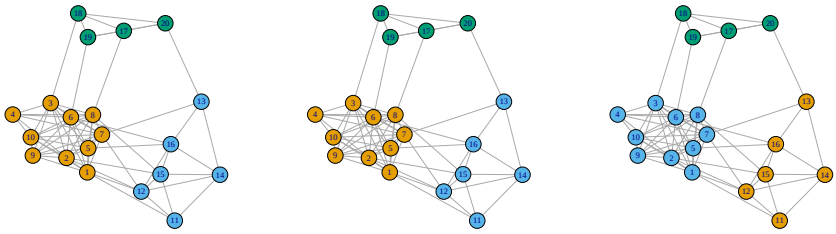


Quelques remarques

— Le nombre de communautés *diminue à chaque passe*.
— Nombre de passes *généralement faible* (moins de 10).
— Nœuds numérotés au hasard au début de la première passe $\Longrightarrow$ *algorithme aléatoire*.
— Il existe d'*autres procédures itératives* que l'algorithme de Louvain.

Autres méthodes

```
> cl1 <- cluster_edge_betweenness(g)
> cl2 <- fastgreedy.community(g)
> cl3 <- cluster_walktrap(g)
```



5.3 Clustering spectral

— *Cadre identique* : $G = (V, E)$ un graphe et on veut trouver une partition de V en clusters ou communautés.
— Approche basée sur la *décomposition spectrale du Laplacien du graphe*.
— Approche utilisée dans un *cadre plus large* :
  — Problème : clustering sur un jeu de données standards $n \times p$;
  — L'approche peut être appliquée à une matrice de similarité.
— On pourra consulter [**?**] dont cette partie est fortement inspirée.

Notations

— $G = (V, E)$ un graphe *non dirigé valué* avec $n = |V|$.
— $w_{ij} \geq 0$ *poids de l'arête* entre i et j et $W = (w_{ij})_{1 \leq i,i \leq n}$ la *matrice d'adjacence*.
— $d_i = \sum_{j \neq i} w_{ij}$ *degré* du nœud i et $D = \text{diag}(d_i)_{1 \leq i \leq n}$ la matrice des degrés.

Laplacien non normalisé

Le *Laplacien non normalisé* de G est la matrice $n \times n$ définie par :

$$L = D - W.$$

Quelques propriétés

Les deux propositions suivantes sont fondamentales pour l'algorithme de *clustering spectral*.

Proposition 1

1. Pour tout vecteur $f \in \mathbb{R}^n$ on a
$$f'Lf = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i,j \leq n} w_{ij}(f_i - f_j)^2.$$
2. L est symétrique et semi définie positive.
3. La plus petite valeur propre de L est 0, le vecteur propre correspondant est $\mathbf{1}_n$.
4. L a n valeurs propres non nulle $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$.

Valeurs propre et nombre de compo. connexes

Proposition 2

Soit G un graphe *non dirigé*. Alors

1. le degrés de multiplicité k de la valeur propre 0 de L est égal au nombre de composantes connexes $A_1, \ldots, A_k$ dans G.
2. l'espace propre associé à la valeur propre 0 est engendré par les vecteurs d'indicatrices $\mathbf{1}_{A_1}, \ldots, \mathbf{1}_{A_k}$.

Conséquence importante

Le *spectre de* L permet d'identifier *ses composantes connexes*.

— *En pratique* : 1 communauté n'est pas forcément égale à une composante connexe.
— On peut par exemple vouloir *extraire des communautés* dans un graphe à une composante connexe.

Idée

Considérer les k plus petites valeurs propres du Laplacien.

Spectral clustering non normalisé

Algorithme

Entrées : un graphe non dirigé G, k le nombre de clusters.

1. Calculer le Laplacien non normalisé L de G.
2. Calculer les k *premiers vecteurs propres* $u_1, \ldots, u_k$ de G.
3. On note U la matrice $n \times k$ qui contient les u_k et y_i la i^{e} ligne de U.
4. Faire un k-*means* avec les points $y_i, i = 1, \ldots, n \Longrightarrow A_1, \ldots, A_k$.

Sortie : clusters $C_1, \ldots, C_k$ avec

$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

Remarque

— Si G ne possède pas k composantes connexes alors U *n'est pas composé* que de 1 et de 0.

— On ne *peut donc pas extraire directement* les composantes à cette étape.

— Mais si il *existe (presque)* k *composantes*, alors les $y_i \in \mathbb{R}^k$ risquent de se rapprocher de cette configuration 0-1.

— C'est pourquoi on fait un k-*means* en 4.

— Il existe *plusieurs versions* d'algorithme de clustering spectral.

— Les plus utilisées s'appliquent à une *version normalisée du Laplacien*, par exemple :

$$L_{\text{norm}} = I - D^{-1/2} W D^{-1/2}.$$

— Les propriétés de L_{norm} sont *proches* de celles de L. On a par exemple la propriété suivante.

Proposition 3

Soit G un graphe *non dirigé*. Alors

1. le degrés de multiplicité k de la valeur propre 0 de L_{norm} est égal au nombre de composantes connexes $A_1, \ldots, A_k$ dans G.
2. l'espace propre associé à la valeur propre 0 est engendré par les vecteurs d'indicatrices $D^{1/2}\mathbf{1}_{A_1}, \ldots, D^{1/2}\mathbf{1}_{A_k}$.

Clustering spectral normalisé

— On déduit de cette propriété *la version la plus courante* de clustering spectral du à [**?**].

Algorithme

Entrées : un graphe non dirigé G, k le nombre de clusters.

1. Calculer le Laplacien normalisé L_{norm} de G.
2. Calculer les k *premiers vecteurs propres* $u_1, \ldots, u_k$ de G. On note U la matrice $n \times k$ qui les contient.
3. Calculer T en *normalisant les lignes* de U : $t_{ij} = u_{ij}/(\sum_\ell u_{i\ell}^2)^{1/2}$.
4. Faire un k-*means* avec les points $y_i, i = 1, \ldots, n$ (i^{e} ligne de T) $\Longrightarrow A_1, \ldots, A_k$.

Sortie : clusters $C_1, \ldots, C_k$ avec

$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

Remarques

— Algorithme *quasi similaire* au clustering spectral non normalisé.

— Une étape de *normalisation* en plus.

— Cette étape se justifie par la *théorie de la perturbation* du spectre d'une matrice.

— On pourra consulter [**?**] pour des justifications.

Choix de k

— Comme souvent en *clustering*, cette algorithme nécessite de connaître le nombre de groupes.

— Utilisation de *connaissances métier* pour ce choix

— ou étude des *valeurs propres* du Laplacien.

Généralisation

Remarque importante

— L'algorithme n'utilise pas nécessairement la structure du graphe.
— Il est entièrement basé sur la matrice (d'adjacence) W des poids qui contient des arêtes.
— Cette matrice peut également être vue comme une matrice de similarité.

Conséquence

— On peut donc *généraliser cet algorithme* à n'importe quel problème où on *possède une matrice de similarité*.
— *Exemple* : problème de clustering standard sur des données $n \times p$ (il "suffit" de construire une marice de similarité).

Clustering spectral sur un tableau de données

— *Données* : tableau $n \times p$ n individus, p variables.
— *Problème* : classification non supervisée des n individus.
— *Méthodes classiques* : k-means, CAH...

Alternative : clustering spectral

1. construire un graphe de similarité ;
2. lancer l'algorithme de clustering spectral sur ce graphe (ou plutôt sur sa matrice de similarité.

Construction du graphe de similarités

— On peut utiliser les techniques vues dans la *section 4* : ε-neighborhood graph ou plus proches voisins (mutuels ou non).
— De façon plus générale, la matrice de similarités s'obtient souvent à partir d'un *noyau* K :

$$\begin{aligned} K : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p &\to \mathbb{R} \\ (x, y) &\mapsto \langle \Phi(x), \Phi(y) \rangle_{\mathcal{H}} \end{aligned}$$

où $\Phi : \mathbb{R}^p \to \mathcal{H}$ est une fonction qui plonge les observations dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ appelé *feature space*.

Exemples de noyau

— *Linéaire* (vanilladot) : $K(x, y) = \langle x, y \rangle$.
— *Gaussien* (rfbdot) : $K(x, y) = \exp(-\sigma \|x - y\|^2)$.
— *Polynomial* (polydot) : $K(x, y) = (\text{scale}\langle x, y \rangle + \text{offset})^{\text{degree}}$.
— ...

Références

On pourra trouver dans exemples de noyau dans [**?**].

Matrice de similarités avec un noyau

— Etant données n observations $x_i \in \mathbb{R}^p$
— La *matrice de similarités* W associée à un noyau K est la matrice $n \times n$ dont le terme général vaut

$$w_{ij} = \begin{cases} K(x_i, x_j) & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Clustering spectral

Le clustering spectral consiste à appliquer l'algorithme vu précédemment en calculant le Laplacien normalisé à partir de cette matrice de similarités (voir [**?**, **?**]).

Clustering spectral sur des données $n \times p$

Algorithme

Entrées : tableau de données $x \times x$, K un noyau, k le nombre de clusters.

1. Calculer la matrice de *similarités* W sur les données avec le *noyau* K.
2. Calculer le *Laplacien normalisé* L_{norm} à partir de W.
3. Calculer les k *premiers vecteurs propres* $u_1, \ldots, u_k$ de G. On note U la matrice $n \times k$ qui les contient.
4. Calculer T en *normalisant les lignes* de U : $t_{ij} = u_{ij}/(\sum_\ell u_{i\ell}^2)^{1/2}$.
5. Faire un k-*means* avec les points $y_i, i = 1, \ldots, n$ (i$^{\text{e}}$ ligne de T) $\Longrightarrow A_1, \ldots, A_k$.

Sortie : clusters $C_1, \ldots, C_k$ avec

$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

Le coin R

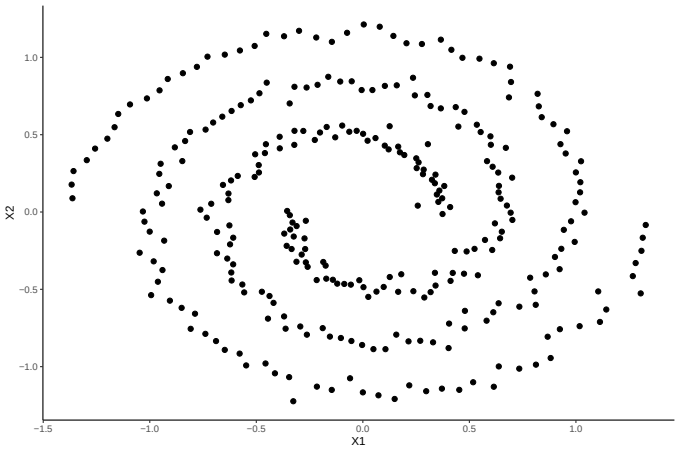
— La fonction *specc* du package kernlab permet de faire le clustering spectral.

— Exemple : données *spirals*

```
> library(kernlab)
> data(spirals)
> spirals1 <- data.frame(spirals)
> head(spirals1)
##           X1          X2
## 1  0.8123568 -0.98712687
## 2 -0.2675890 -0.32552004
## 3  0.3739746 -0.01293652
## 4  0.2576481  0.04130805
## 5 -0.8472613  0.32939461
## 6  0.4097649  0.03205686
```

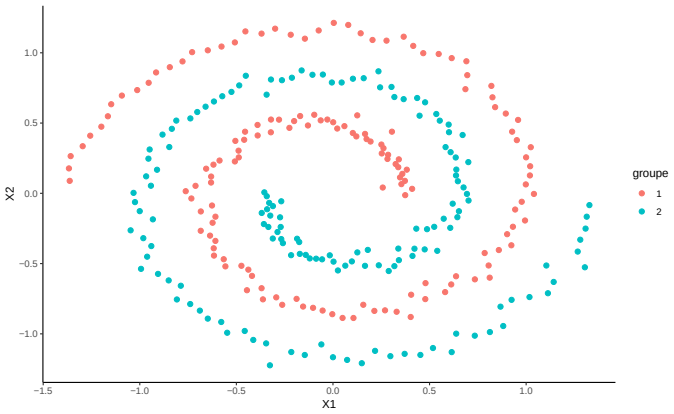
Visualisation du nuage de points

```
> ggplot(spirals1)+aes(x=X1,y=X2)+geom_point()+theme_classic()
```



Le clustering spectral

```
> groupe <- specc(spirals,centers=2,kernel="rbfdot")
> head(groupe)
## [1] 2 2 1 1 2 1
> spirals1 <- spirals1 %>% mutate(groupe=as.factor(groupe))
> ggplot(spirals1)+aes(x=X1,y=X2,color=groupe)+geom_point(size=2)+theme_classic()
```



6 Bibliographie

Références

Biblio1

[Besse and Laurent,] Besse, P. and Laurent, B. *Apprentissage Statistique modeélisation, preévision, data mining.* INSA - Toulouse. http://www.math.univ-toulouse.fr/~besse/pub/Appren_stat.pdf.

[Bühlmann and van de Geer, 2011] Bühlmann, P. and van de Geer, S. (2011). *Statistics for High-Dimensional Data : Methods, Theory and Applications.* Springer.

[Cornillon et al., 2019] Cornillon, P., Hengartner, N., Matzner-Løber, E., and Rouvière, L. (2019). *Régression avec R.* EDP Sciences.

[Giraud, 2015] Giraud, C. (2015). *Introduction to High-Dimensional Statistics.* CRC Press.

[Grob, 2003] Grob, J. (2003). *Linear regression.* Springer.

[Györfi et al., 2002] Györfi, L., Kohler, M., Krzyzak, A., and Harro, W. (2002). *A Distribution-Free Theory of Nonparametric Regression.* Springer.

[Hastie et al., 2015] Hastie, T., Tibshirani, R., and Wainwright, M. (2015). *Statistical Learning with Sparsity : The Lasso and Generalizations.* CRC Press. https://web.stanford.edu/~hastie/StatLearnSparsity_files/SLS.pdf.