Graph Mining

L. Rouvière

laurent.rouviere@univ-rennes2.fr

NOVEMBRE 2021

Présentation

- Objectifs : comprendre, décrire, interpréter les problèmes associés à des graphes.
- <u>Pré-requis</u>: 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 + tutoriel R (compléments de cours et exercices). 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

Table des matières

1	Introduction	3
2	Définitions - vocabulaire sur les graphes	5
3	Statistiques descriptives sur les graphes	8
	3.1 Caractéristiques générales	8
	3.2 Importance des nœuds	
4	Modèles et construction de graphes	13
	Modèles et construction de graphes 4.1 Quelques modèles de graphes	13
	4.2 Construire un graphe	16
5	Détection de communautés	18
	Détection de communautés 5.1 L'edge betweeness	18
	5.2 La modularité	21
	5.3 Clustering spectral	
6	Bibliographie	32

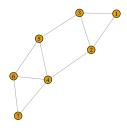
1 Introduction

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

Graphe

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

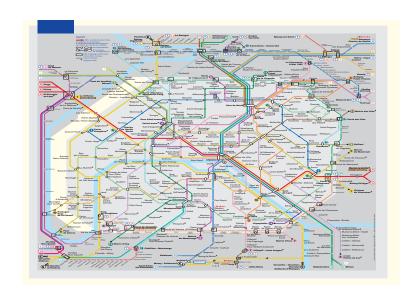
- les entités sont appelées nœuds ou sommets;
- une relation entre deux entités est modélisée par une arête.



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

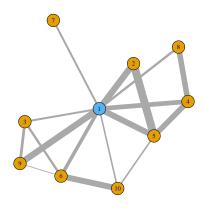


Réseaux moléculaires



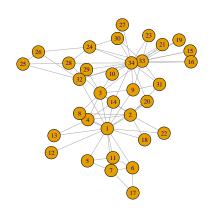
Communications

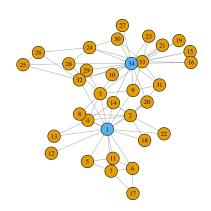
— Objectif : visualiser les communications d'un individu sur une période donnée.



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

Mettre des lois de probabilités sur la structure du graphe.

- 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 :

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

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 $(C^2_{|V|} \text{ arêtes})$.

Question

Comment stocker un graphe?

Matrice d'adjacence

Définition

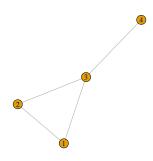
La matrice d'adjacence d'un graphe G = (V, E) binaire est la matrice $|V| \times |V|$ de terme général

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

Remarques

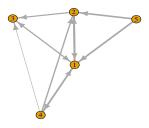
- Graphe non dirigé $\Longrightarrow A$ symétrique.
- Graphe simple $\Longrightarrow A_{ii} = 0 \ \forall i$.
- Graphe valué $\Longrightarrow A_{ij} = w_{ij} \in \mathbb{R}^+$.

Exemple: graphe non dirigé



Exemple: graphe dirigé

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



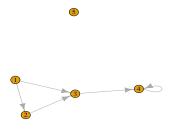
Remarque

- 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 graphe en donnant une liste d'arêtes.
- Attention : penser à donner le nombre total de nœuds du graphe pour éviter d'oublier les nœuds isolés.

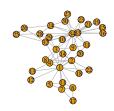
```
> G <- graph(edges=c(1,2,1,3,3,4,4,4,2,3),n=5)
> plot(G)
```



Visualisation d'un graphe

- <u>Etape importante</u> : 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 [Bahoken et al., 2013])

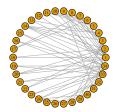
 $mais\ attention: certaines\ peuvent\ \hat{e}tre\ trompeuses:$

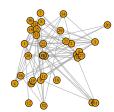


Autres représentations

```
> 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).

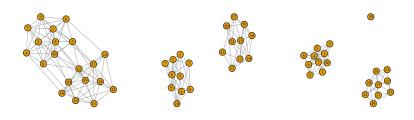
$Transfert\ d$ 'information

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 næud 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? \implies Création de nouvelles composantes connexes en supprimant quelques næuds 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.

Densit'e

— Graphe non dirigé :

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

— Graphe dirigé:

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

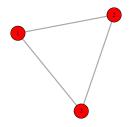
Remarque

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

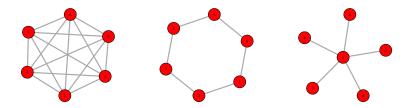


Intérêt

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

Object if

- 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

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

Degré

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

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

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 :

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

Remarque

- Pas toujours très informatif car souvent grande variabilité.
- plus intéressant : distribution des degrés (avec un histogramme par exemple).

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 centratilité de proximité (closeness centrality) du næud i est défini par

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

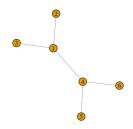
où ℓ_{ij} distance = longueur du plus court chemin entre i et j.

Commentaire

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

Exemple

nœud j	ℓ_{1j}	ℓ_{2j}	$\mod j$	ℓ_{1j}	ℓ_{2j}	nœud j	$\mid \ell_{1j} \mid$	ℓ_{2j}
1			1			1		1
2			2	1		2	1	
3			3	1		3	1	2
4			4	1		4	1	2
5			5	2		5	2	3
6			6	2		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 næud sert d'intermédiaire.

D'efinition

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

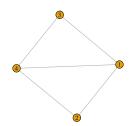
$$C_B(i) = \sum_{j \neq i, k \neq i, j \neq k} \frac{g_{jk}(i)}{g_{jk}}$$

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

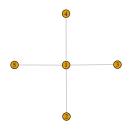
$(j,k) \parallel g_{jk}$	$g_{jk}(1)$	(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$	(j,k)	g_{jk}	$g_{jk}(1)$
(2,3)		(2,3)	2		(2,3)	2	1
(2,4)		(2,4)	1		(2,4)	1	0
(3,4)		(3,4)	1		(3,4)	0	0



```
- Conclusion : C_B(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 næuds.
- 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

- $1. \ \ \textit{G\'en\'erer} \ \textit{des graphes "r\'ealistes"}.$
- 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 :
 - $-n \in \mathbb{N}^*$: nombre de næuds;
 - $-p \in [0,1]$: probabilité de connexion entre 2 nœuds.

Graphe d'Erdös et Rényi

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)

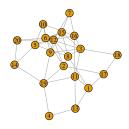
La variable aléatoire D_i donnant le degré du nœud i dans un graphe G(n,p) suit une loi binomiale $\mathcal{B}(n-1,p)$.

- 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.
- ⇒ modèle souvent un peu trop simple pour des graphes réels.

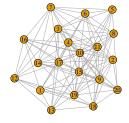
Le coin R

— 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)

$Id\acute{e}e$

- 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, $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_K), \Lambda = (\lambda_{k\ell})_{1 \le k, \ell \le K}$ matrice $K \times K$.
- Z_1, \ldots, Z_n i.i.d. avec $Z_i \sim \mathcal{M}(n, \pi)$ (variable <u>latente</u> 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

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

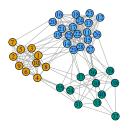
Interprétation

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.



SBM et détection de communautés

$Id\acute{e}e$

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 [Daudin et al., 2008]).
- 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 $V = \{1, ..., n\}$;
- 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),]</pre>
> head(donnees)
       Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
##
## 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
                                                      1.0 versicolor
                                          3.3
## 93
                5.8
                             2.6
                                          4.0
                                                      1.2 versicolor
## 75
                6.4
                             2.9
                                          4.3
                                                      1.3 versicolor
                                                      1.2 versicolor
## 96
                             3.0
```

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 $D = (d_{ij}), 1 \le i, j \le n$ tel que d_{ij} est petit si i et j sont proches
- ou une matrice de similarité $S = (s_{ij}), 1 \le i, j \le n$ tel que s_{ij} est grand si i et j sont similaires

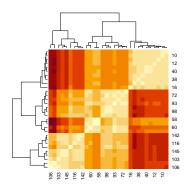
Exemple

— 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

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

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 kppv de j et/ou j appartient aux kppv de i.

Graphes de plus proches voisins.

Soit $k \leq n$.

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

$$A_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{si i est parmi les kppv de j ou j est parmi les kppv de i} \\ 0 & \text{sinon.} \end{array} \right.$$

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

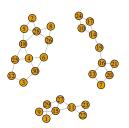
$$A_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{si } i \text{ est parmi les } k \text{ppv de } j \text{ et } j \text{ est parmi les } k \text{ppv de } i \\ 0 & \text{sinon.} \end{array} \right.$$

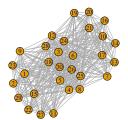
Remarques

- 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
```

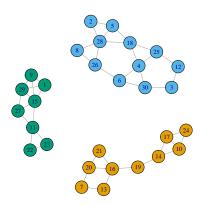




Remarque

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.

$Id\'{e}al$

- 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

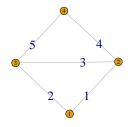
$$E_B(e) = \sum_{j,k,j \neq k} \frac{g_{jk}(e)}{g_{jk}}$$

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 empruntent l'arête e.

Exemple

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

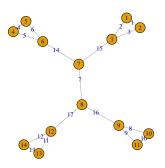


— $Conclusion : E_B(1) = 1.5.$

> 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 [Girvan and Newman, 2002]

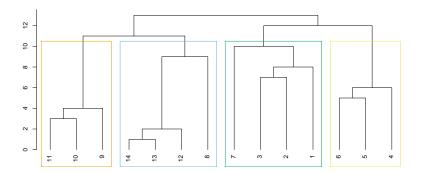
- 1. Calculer l'EB de toutes les arêtes.
- 2. Retirer l'arête avec le plus grand EB.
- 3. Recalculer l'EB du nouveau graphe.
- 4. Retirer l'arête...
- 5. Jusqu'à isoler tous les nœuds.

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

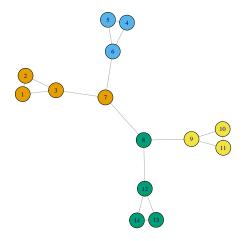
```
> clust.EB$modularity %>% round(3)
## [1] -0.074 -0.022 0.074 0.126 0.223 0.272 0.372 0.420 0.521 0.543
## [11] 0.566 0.503 0.441 0.000
```

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 $\mathcal{C} = \{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_K\}$ une partition des nœuds de G = (V, E).

Modularit'e de ${\cal C}$

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

οù

- -- 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 [Fortunato, 2010]).
- Première approche : les m arêtes sont distribuées uniformément entre les paires de nœuds :

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

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

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

On a alors

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

- 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 <u>2 partitions</u> 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

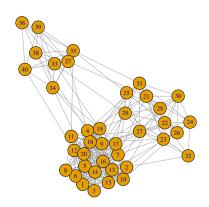
- 1. V: ensemble des partitions des nœuds de G = (V, E).
- 2. Pour chaque $C \in V$ calculer $\mathcal{M}(C)$.
- 3. Renvoyer

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

— Sur *R* on utilise cluster optimal.

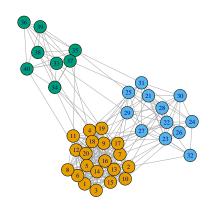
Le coin R

> 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

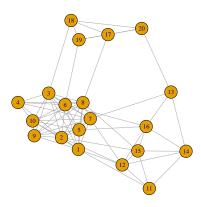
- Problème *NP complet*.
- Si |V| est "grand", impossible dans un temps raisonnable.
- Solution : utiliser des algorithmes itératifs qui vont converger vers des maxima locaux.

La méthode de Louvain

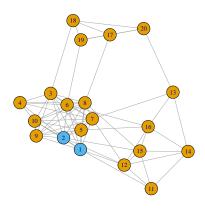
- Proposée par des chercheurs français qui se sont retrouvés à Louvain [Blondel et al., 2008].
- Elle repose sur deux phases distinctes, répétées itérativement.
- On pourra consulter l'url suivante pour plus de détails : http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/RCP216/coursFouilleGraphesReseauxSociaux2.html

Passe 1 - phase 1, itération 1

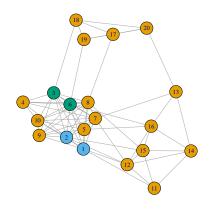
— Chaque nœud forme une communauté.

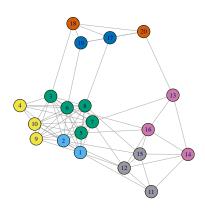


- Pour chaque nœud i, on place i dans la communauté de chacun de ses $voisins\ j$.
- Calcul du gain de modularité.
- On place i dans la communauté où le gain est maximum.



— Même procédé pour tous les nœuds suivants.

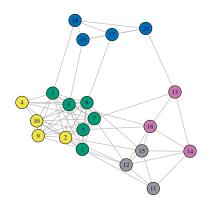




Fin de l'itération 1

Itération 2, ...

- L'itération 1 est r'ep'et'ee 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 $C_1 = \{C_{1,1}, \ldots, C_{1,p_1}\}.$

Sur l'exemple

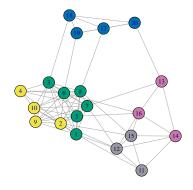
On a 5 communautés.

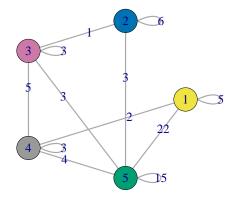
Passe 1 - phase 2

$Construction\ d'un\ nouveau\ graphe$

- -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

Obtention du nouveau graphe



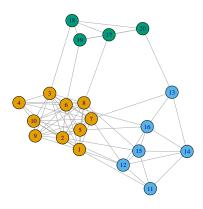


Fin de la phase 2 et de la passe 1

- 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"

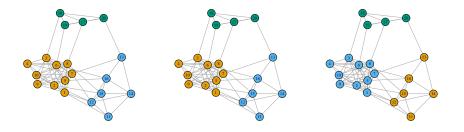


Quelques remarques

- 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 ⇒ 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)</pre>
```



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 [von Luxburg, 2017] 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 næud i et $D = diag(d_i)_{1 \leq i \leq n}$ 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

$$f'Lf = \frac{1}{2} \sum_{1 \le i,j \le n} w_{ij} (f_i - f_j)^2.$$

- 2. L'est symétrique et semi définie positive.
- 3. La plus petite valeur propre de L est 0, le vecteur propre correspondant est 1_n .
- 4. L a n valeurs propres non nulle $0 = \lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_n$.

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 les composantes connexes de G..

- 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.

$Id\acute{e}e$

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 $y_i, i = 1, ..., n \Longrightarrow A_1, ..., A_k$.

Sortie: clusters C_1, \ldots, C_k avec

$$C_i = \{i | y_i \in A_i\}.$$

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 :

$$L_{norm} = I - D^{-1/2}WD^{-1/2}.$$

— 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 $D^{1/2}\mathbf{1}_{A_1},\dots,D^{1/2}\mathbf{1}_{A_k}$.

Clustering spectral normalisé

— On déduit de cette propriété la version la plus courante de clustering spectral du à [Ng et al., 2002].

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 $y_i, i = 1, ..., n$ (ie ligne de T) $\Longrightarrow A_1, ..., A_k$.

Sortie: clusters C_1, \ldots, C_k avec

$$C_i = \{i | y_i \in A_i\}.$$

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 [von Luxburg, 2017] pour des justifications.

Choix de k

- Comme souvent en clustering, cet 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 $4:\varepsilon$ -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 :

$$K: \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$$

 $(x, y) \mapsto \langle \Phi(x), \Phi(y) \rangle_{\mathcal{H}}$

 $où \Phi: \mathbb{R}^p \to \mathcal{H}$ 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): $K(x,y) = (scale\langle x,y\rangle + offset)^{degree}$.

— ..

Références

On pourra trouver dans exemples de noyau dans [Karatzoglou et al., 2004].

Matrice de similarités avec un noyau

- Etant données n observations $x_i \in \mathbb{R}^p$ et un noyau K
- on peut construire une matrice de similarité, par exemple pour un noyau Gaussien :

$$w_{ij} = \begin{cases} \exp(-\sigma ||x_i - x_j||^2) & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

$Clustering\ spectral$

Le clustering spectral consiste à appliquer l'algorithme vu précédemment en calculant le Laplacien normalisé à partir de cette matrice de similarités (voir [Ng et al., 2002, Arias-Castro, 2011]).

Clustering spectral sur des données $n \times p$

Algorithme

Entrées : tableau de données $n \times p$, 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 $y_i, i = 1, ..., n$ (ie ligne de T) $\Longrightarrow A_1, ..., A_k$.

Sortie: clusters C_1, \ldots, C_k avec

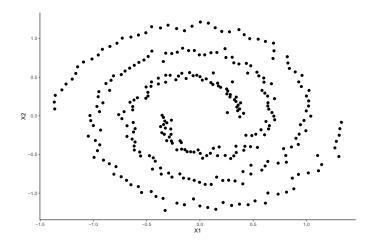
$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

Le coin R

- La fonction specc du package kernlab permet de faire le clustering spectral.
- Exemple : données spirals

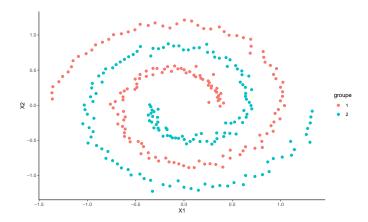
Visualisation du nuage de points

```
> 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

[Arias-Castro, 2011] Arias-Castro, E. (2011). Clustering based on pairwise distances when the data is of mixed dimensions. *IEEE Transaction on Information Theory*, 57(3):1692–1706.

[Bahoken et al., 2013] Bahoken, F., Beauguitte, L., and Lhomme, S. (2013). La visualisation des réseaux. Principes, enjeux et perspectives. halshs-00839905.

[Blondel et al., 2008] Blondel, V. D., Guillaume, J., Lambiotte, R., and Lefebvre, E. (2008). Fast unfolding of communities in large networks. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment.*

[Daudin et al., 2008] Daudin, J.-J., Picard, F., and Robin, S. (2008). A mixture model for random graphs. *Statistics and computing*, 18:173–183.

[Fortunato, 2010] Fortunato, S. (2010). Community detection in graphs. Physics report, 486:75–174.

[Girvan and Newman, 2002] Girvan, M. and Newman, M. E. J. (2002). Community structure in social and biological networks. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, pages 7821–7826.

[Karatzoglou et al., 2004] Karatzoglou, A., Hornik, K., Smola, A., and Zeileis, A. (2004). kernlab – an s4 package for kernel methods in r. *Journal of Statistical Software*, 11(9).

[Ng et al., 2002] Ng, A., Jordan, M., and Weiss, Y. (2002). On spectral clustering analysis. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, volume 14, pages 849–856.

[von Luxburg, 2017] von Luxburg, U. (2017). A tutorial on spectral clustering. Statistics and computing, 17:395–416.