# Graph Mining

# L. Rouvière

laurent.rouviere@univ-rennes2.fr

### JANVIER 2021

#### 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 + 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					
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				

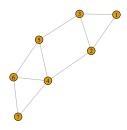
# 1 Introduction

— 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 :

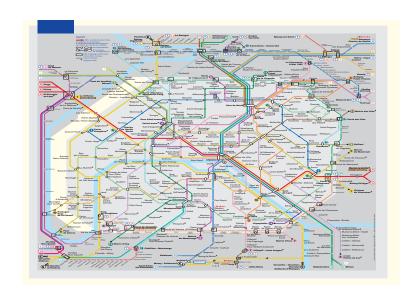
- les entités sont appelées nœuds ou sommets;
- une relation entre deux entités est modélisée par une arête.



# 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

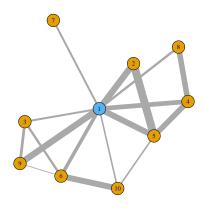


# Réseaux moléculaires



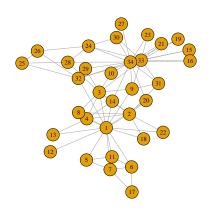
# Communications

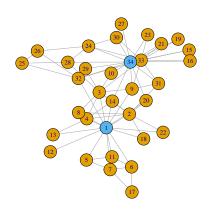
--  ${\it Objectif}$  : visualiser les communications d'un individu sur une période donnée.



#### 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  $(C^2_{|V|}$  arêtes).

# Question

Comment stocker un graphe?

# Matrice d'adjacence

#### **Définition**

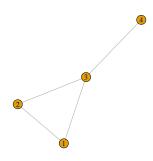
La matrice d'adjacence d'un graphe G = (V, E) binaire est la matrice  $|V| \times |V|$  de terme général

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

#### Remarques

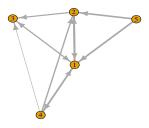
- Graphe non dirigé  $\Longrightarrow A$  symétrique.
- Graphe simple  $\Longrightarrow A_{ii} = 0 \ \forall i$ .
- Graphe valué  $\Longrightarrow A_{ij} = w_{ij} \in \mathbb{R}^+$ .

#### Exemple: graphe non dirigé



# Exemple: graphe dirigé

```
[,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## [1,]
## [2,]
                      3
                           0
                                0
           4
## [3,]
                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)
```



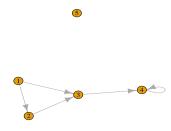
# Remarque

- 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.

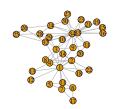
```
> G <- graph(edges=c(1,2,1,3,3,4,4,4,2,3),n=5)
> plot(G)
```



# Visualisation d'un graphe

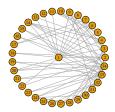
- *Etape importante* : elle permet de comprendre la structure du graphe : identification de nœuds importants, très connectés...
- Différentes représentations :
  - 1. en cercle, en étoile...
  - 2. selon différents algorithmes (voir [Bahoken et al., 2013])

 ${\it mais}$  attention : certaines peuvent être trompeuses :

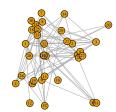


#### Autres représentations

```
> 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  $\ell_{ij}$  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).

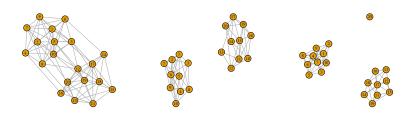
# $Transfert\ d$ 'information

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.

#### Densit'e

— Graphe non dirigé :

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

— Graphe dirigé :

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

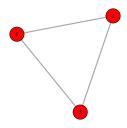
# Remarque

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 transitivit'e

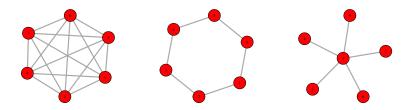


# Intérêt

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

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

#### 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:

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

#### 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 nœud i est défini par

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

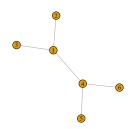
où  $\ell_{ij}$  distance = longueur du plus court chemin entre i et j.

#### Commentaire

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

# Exemple

nœud $j$	$\ell_{1j}$	$\ell_{2j}$	$\mod j$	$\ell_{1j}$	$\ell_{2j}$	nœud $j$	$\mid \ell_{1j} \mid$	$\ell_{2j}$
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 nœud sert d'intermédiaire.

# Définition

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

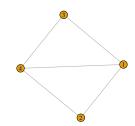
$$C_B(i) = \sum_{j \neq i, k \neq i, j \neq k} \frac{g_{jk}(i)}{g_{jk}}$$

οù

- $g_{jk}$  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.

# ${\bf Exemple}$

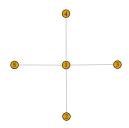
$(j,k) \parallel g_{jk}$	$g_{jk}(1)$	(j,k)	$g_{jk}$	$g_{jk}(1)$	(j,k)	$g_{jk}$	$g_{jk}(1)$
(2,3)		(2,3)	2		(2,3)	2	1
(2,4)		(2,4)	1		(2,4)	1	0
(3,4)		(3,4)	1		(3,4)	0	0



```
- 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 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.  $G\acute{e}n\acute{e}rer$  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 :
  - $-n \in \mathbb{N}^*$ : nombre de nœuds;
  - $p \in [0,1]$ : 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)

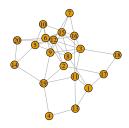
La variable aléatoire  $D_i$  donnant le degré du nœud i dans un graphe G(n, p) suit une loi binomiale  $\mathcal{B}(n-1, p)$ .

- 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.

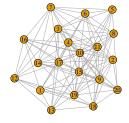
# Le coin R

— 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

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

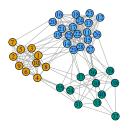
#### Interprétation

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  $\pi$  et  $\Lambda$ .
- 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
## 96
                                                      1.2 versicolor
                             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  $D=(d_{ij}), 1 \leq i, j \leq n$  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

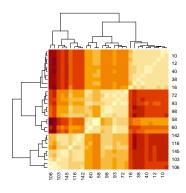
#### Exemple

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

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

— 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.

#### $\varepsilon$ -neighborhood graph

Soit  $\varepsilon > 0$ , on appelle  $\varepsilon$ -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 $\varepsilon$

- 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

—  $Id\acute{e}$ : 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

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

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

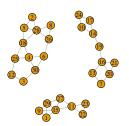
$$A_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{si } i \text{ est parmi les } k \text{ppv de } j \text{ et } j \text{ est parmi les } k \text{ppv de } i \\ 0 & \text{sinon.} \end{array} \right.$$

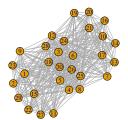
# Remarques

- 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 nnq 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(gppv20)
## [1] 44
> ecount(gppv20)
## [1] 354
```

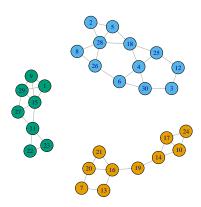




#### Remarque

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

# $Id\acute{e}e$

- 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

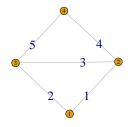
$$E_B(e) = \sum_{i,j,i \neq j} \frac{g_{ij}(e)}{g_{jk}}$$

οù

- $g_{jk}$  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

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

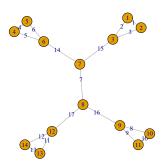


—  $Conclusion : E_B(1) = 1.5.$ 

> 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 12 149 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]

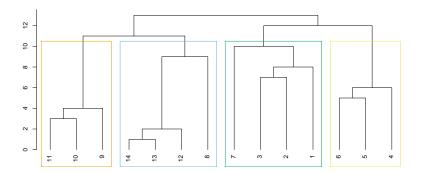
- 1. Calculer l'EB de toutes les arêtes.
- 2. Retirer l'arête avec le plus grand EB.
- 3. Recalculer l'EB du nouveau graphe.
- 4. Retirer l'arête...
- 5. Jusqu'à isoler tous les nœuds.

#### 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

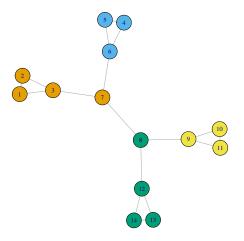
```
> clust.EB$modularity %>% round(3)
## [1] -0.074 -0.022 0.074 0.126 0.223 0.272 0.372 0.420 0.521 0.543
## [11] 0.566 0.503 0.441 0.000
```

# 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 ${\cal C}$

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

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 [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 *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

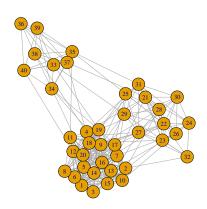
- 1. V: ensemble des partitions des nœuds de G = (V, E).
- 2. Pour chaque  $C \in V$  calculer  $\mathcal{M}(C)$ .
- 3. Renvoyer

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

— Sur R on utilise cluster optimal.

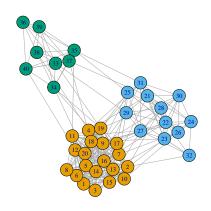
# Le coin R

# > 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*.

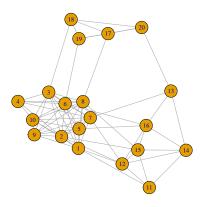
# La méthode de Louvain

- 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 :

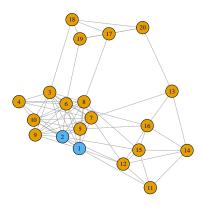
http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/RCP216/coursFouilleGraphesReseauxSociaux2.html

# Passe 1 - phase 1, itération 1

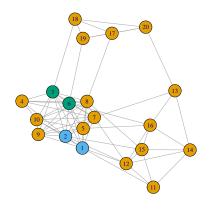
— Chaque nœud forme une communauté.

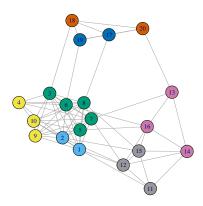


- Pour chaque nœud i, on place i dans la communauté de chacun de ses  $voisins\ j$ .
- Calcul du gain de modularité.
- On place i dans la communauté où le gain est maximum.



— Même procédé pour tous les nœuds suivants.

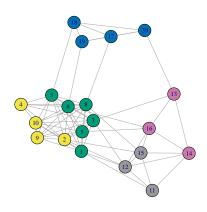




Fin de l'itération 1

# Itération 2, ...

- L'itération 1 est  $r\acute{e}p\acute{e}t\acute{e}$  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  $C_1 = \{C_{1,1}, \dots, C_{1,p_1}\}.$

# 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

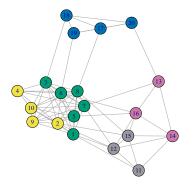
## [2,] 0 6 1 0 3

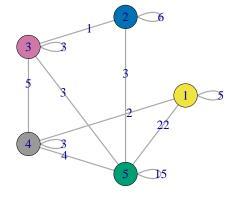
## [3,] 0 1 3 5 3

## [4,] 2 0 5 3 4

## [5,] 22 3 3 4 15
```

# Obtention du nouveau graphe



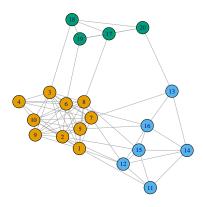


# Fin de la phase 2 et de la passe 1

- 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"

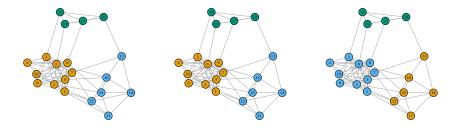


# Quelques remarques

- 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  $\implies$  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 nœud i et  $D = \operatorname{diag}(d_i)_{1 \leq i \leq n}$  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  $\mathbf{1}_n$ .
- 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  $\mathbf{1}_{A_1},\dots,\mathbf{1}_{A_k}$ .

# 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.

#### $Id\acute{e}e$

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 :

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

— Les propriétés de  $L_{\text{norm}}$  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  $L_{\text{norm}}$  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  $L_{\text{norm}}$  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*, 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:

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

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) :  $K(x, y) = (\text{scale}\langle x, y \rangle + \text{offset})^{\text{degree}}$ .

— ..

#### Références

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

# Matrice de similarités avec un noyau

- Etant données n observations  $x_i \in \mathbb{R}^p$
- 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 [Ng et al., 2002, Arias-Castro, 2011]).

# 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  $L_{\text{norm}}$  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  $y_i, i=1,\ldots,n$  (ie ligne de T)  $\Longrightarrow A_1,\ldots,A_k$ .

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

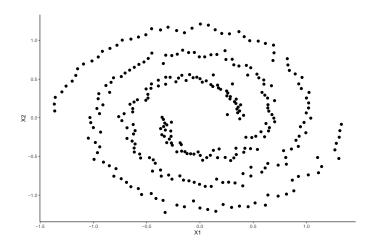
$$C_j = \{i | y_i \in A_j\}.$$

#### Le coin R

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

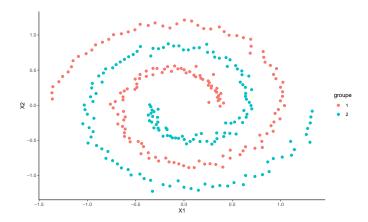
# Visualisation du nuage de points

```
> 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.