

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова Факультет вычислительной математики и кибернетики Кафедра математических методов прогнозирования

Никишин Евгений Сергеевич

Методы выделения сообществ в социальных графах

КУРСОВАЯ РАБОТА

Научный руководитель:

д.ф-м.н., профессор А.Г. Дьяконов

Образец титульного брал отсюда

Москва, 2016

version 0.13

Содержание

| 1 | Введение (неполное) | | | |
|---|--|-------------------------------------|---|--|
| | 1.1 | Модулярность | 1 | |
| 2 | Разбиение на непересекающиеся сообщества | | | |
| | 2.1 | Edge Betweenness | 1 | |
| | 2.2 | Label Propagation | | |
| | 2.3 | FastGreedy | | |
| | 2.4 | WalkTrap | | |
| | 2.5 | | 4 | |
| | 2.6 | | 5 | |
| | 2.7 | MultiLevel | 7 | |
| 3 | Раз | биение на пересекающиеся сообщества | 8 | |
| | 3.1 | k-Clique Perlocation | 8 | |
| | 3.2 | BigCLAM | | |
| | 3.3 | DEMON | | |
| | 3.4 | CONGO | | |

1 Введение (неполное)

1.1 Модулярность

$$Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j)$$

Testtest [2, 5, 3, 4, 1]

2 Разбиение на непересекающиеся сообщества

2.1 Edge Betweenness

Для каждой пары вершин связного графа можно вычислить кратчайший путь, их соединяющий. Будем считать, что каждый такой путь имеет вес, равный 1/N, где N — число возможных кратчайших путей между выбранной парой вершин. Если такие веса посчитать для всех пар вершин, то каждому ребру можно поставить в соответствие значение Edge betweenness — сумму весов путей, прошедших через это ребро.

Для ясности приведём следующую иллюстрацию:

В данном графе хочется выделить два сообщества: с вершинами 1-5 и 6-10. Граница же будет проходить через ребро, имеющее максимальный вес, 25. На этой идее и основывается алгоритм: поэтапно удаляем ребра с наибольшим весом, а оставшиеся компоненты связности объявляем сообществами.

Собственно, сам алгоритм:

1. Инициализировать веса

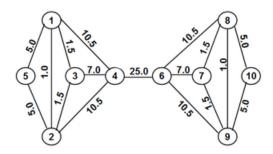


Рис. 1: Граф, для ребёр которого посчитаны значения Edge betweenness

- 2. Удалить ребро с наибольшим весом
- 3. Пересчитать веса для ребёр
- 4. Сообществами считаются все компоненты связности
- 5. Посчитать функционал модулярности (о нём будет сказано ранее)
- 6. Повторять с шаги 2-6, пока есть рёбра

На каждой итерации процесса получается некое разбиение вершин. Последовательность таких разбиений, имеющая вид дерева, в листьях которого находятся сообщества с одной вершиной, а в корне — большое сообщество, содержащее все вершины, называется дендрограммой. Результатом работы алгоритма является ярус дендрограммы (т.е. разбиение), имеющий максимальную модулярность.

Из необходимости каждый раз пересчитывать веса следует главный минус: вычислительная сложность в худшем случае составляет $O(m^2n)$, где m — количество ребёр, n — количество вершин. Эксперименты показывают, что пересчитывать обычно приходится только веса для рёбер, которые были в одной компоненте связности, что несколько уменьшает сложность, однако зачастую этого оказывается недостаточно.

2.2 Label Propagation

Допустим, что большинство соседей какой-либо вершины принадлежат одному сообществу. Тогда, с высокой вероятностью, ему также будет принадлежать выбранная вершина. На этом предположении и строится алгоритм Label propagation: каждая вершина в графе определяется в то сообщество, которому принадлежит большинство его соседей. Если же таких сообществ несколько, то выбирается случайно одно из них. Пример:

В начальный момент времени всем вершинам ставится в соответствие отдельное сообщество. Затем происходят перераспределения сообществ. Из-за случайности важно на каждой итерации изменять порядок обхода вершин. Алгоритм заканчивает работу, когда нечего изменять: все вершины относятся к тем сообществам, что и большинство их соседей. Авторы также советуют запускать несколько раз алгоритм и выбирать наилучшее из результирующих разбиений, либо пересекать их. Главное достоинство данного алгоритма, в противовес предыдущему, — почти линейная

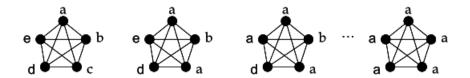


Рис. 2: Демонстрация работы алгоритма для полного графа

сложность. Однако на зашумленных графах зачастую происходит объединение всех вершин в одно сообщество.

2.3 FastGreedy

Алгоритм заключается в жадной оптимизации модулярности. Как и в прошлом методе, в каждой вершине графа инициализируется отдельное сообщество, а затем объединяются пары сообществ, приводящие к максимальному увеличению модулярности. При этом объединяются только инцидентные пары вершин, так как, в противном случае, модулярность не может увеличиться [во введении необходимо будет объяснить смысл модулярности, чтобы этот факт не вызывал вопросов].

Результатом работы алгоритма будет ярус дендрограммы, на котором модулярность максимальна.

Метод является вычислительно нетрудоёмким $(O(m \log n))$, легко применим к большим графам и, несмотря на жадность, зачастую неплохо справляется с задачей.

2.4 WalkTrap

Допустим, на вершинах графа задана такая метрика, что между двумя вершинами из разных сообществ расстояние велико, а из одного — мало. Тогда выделение сообществ можно рассматривать как задачу кластеризации вершин. Попытаемся ввести такую метрику, используя случайные блуждания. Объект может переместиться из вершины i в вершину j с вероятностью $P_{ij} = \frac{A_{ij}}{d_i}$, где A — матрица смежности, d_i — степень i. То есть на каждом шаге равновероятно выбирается "сосед" вершины i. Таким образом определяется матрица переходов P случайного блуждания. Она примечательна тем, что её степени являются вероятностями перехода из одной вершины в другую за соответствующее число шагов: вероятность перехода из i в j за t шагов равна $(P^t)_{ij}$. Также следует отметить, что $P = D^{-1}A$, где D — матрица со степенями вершин на диагонали. Используя этот аппарат можно ввести желаемую метрику на вершинах:

$$r_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} \frac{(P_{ik}^{t} - P_{jk}^{t})^{2}}{d(k)}} = \|D^{-\frac{1}{2}} P_{i\bullet}^{t} - D^{-\frac{1}{2}} P_{j\bullet}^{t}\|,$$

где $P_{i\bullet}^t$ — вектор из вероятностей перехода за t шагов из вершины i во все другие. Вообще говоря, метрика зависит от t, авторы советуют брать $3 \le t \le 8$.

Естественным образом расстояние между вершинами обобщается на расстояние

между сообществами:

$$r_{1C_2} = \left\| D^{-\frac{1}{2}} P_{C_1 \bullet}^t - D^{-\frac{1}{2}} P_{C_2 \bullet}^t \right\| = \sqrt{\sum_{k=1}^n \frac{(P_{C_1 k}^t - P_{C_2 k}^t)^2}{d(k)}},$$

где

$$P_{Cj}^t = \frac{1}{|C|} \sum_{i \in C} P_{ij}^t$$

Теперь, когда задана метрика, можно попытаться выделить кластеры в графе. Начальное разбиение — по одной вершине в каждом кластере $\mathcal{P}_1 = \{\{v\}, v \in V\}$. Также для всех пар инцидентных вершин считается расстояние. Далее для каждого k:

- 1. Выбрать C_1 и C_2 из \mathcal{P}_k согласно некоторому метрическому критерию.
- 2. Объединить два сообщества в новое $C_3 = C_1 \cup C_2$ и обновить разбиение $\mathcal{P}_{k+1} = (\mathcal{P}_k \setminus \{C_1, C_2\}) \cup C_3$.
- 3. Обновить расстояния между инцидентными сообществами.

После n-1 шага получается дендрограмма разбиений, а $\mathcal{P}_n = \{V\}$. Таким образом, остался неясным только критерий выбора пар сообществ на шаге 1. Будем выбирать пару сообществ, минимизирующих приращение среднего квадратов расстояний между каждой вершиной и их сообществом при объединении сообществ. Т.е.

$$\Delta\sigma(C_1, C_2) = \frac{1}{n} \left(\sum_{i \in C_2} r_{iC_3}^2 - \sum_{i \in C_1} r_{iC_1}^2 - \sum_{i \in C_2} r_{iC_2}^2 \right) \to \min_{C_1, C_2}$$

Теперь осталось только получить результат, выбрав разбиение, на котором достигает максимума модулярность.

2.5 Infomap

В данном методе снова применяется подход, основанный на случайных блужданиях. У каждой вершины есть некоторая вероятность её посещения. С помощью кодов Хаффмана, в соответствии с этими вероятностями, можно закодировать путь блуждателя. Эта последовательность будет иметь некоторую длину. Однако, если использовать иерархическое кодирование (т.е. кодируем сообщество, затем кодируем вершины, попавшие в это сообщество. Коды вершин в разных группах могут совпадать), то можно сократить длину получившейся последовательности.

Как происходит иерархическое кодирование: при входе в сообщество записывается его уникальный код, затем записывается код вершины, в которую попали. Далее при переходах внутри сообщетсва пишутся только коды вершин. При выходе из сообщества пишется уникальный для него код выхода.

На этом и основывается метод Infomap: жадным способом минимизируется длина кода прогулки блуждателя.

Иллюстрация работы алгоритма (картинка уехала, но сейчас нет смысла править):

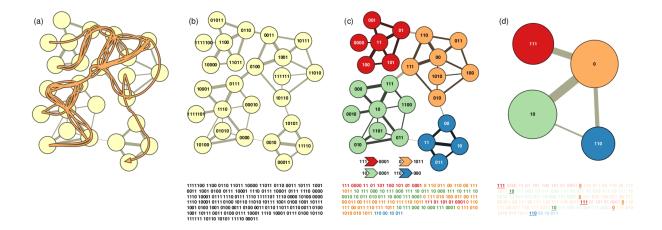


Рис. 3: На левом рисунке показан путь случайного блуждателя. На второй части изображены вершины с кодами Хаффмана, а ниже закодирован путь, изображенный на левом изображении. Далее показано кодирование с помощью иерархического метода. Ниже записаны коды сообществ и коды выхода из них. В самом низу закодирован путь. Длина кода уменьшилась. На последнем рисунке показаны сообщества и их коды

2.6 Leading Eigenvector

Для начала небольшой экскурс по спектральным методам выделения сообществ. Допустим, для простоты, что всего в графе 2 группы. Тогда предлагается, согласно неформальному определению сообществ, что количество ребёр между этими группами, также называемое $cut\ size$,

$$R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \text{ B} \\ \text{pashbix} \\ \text{PDVIIIIAX}}} A_{ij},$$

должно быть мало.

Чтобы получить более удобное представление вводится вектор индексов ${f s}$

$$s_i = \begin{cases} +1, & \text{если вершина } i \text{ принадлежит сообществу } 1 \\ -1, & \text{если вершина } i \text{ принадлежит сообществу } 2 \end{cases}$$

с *п* элементами. Тогда

$$\frac{1}{2}(1-s_is_j) = \begin{cases} 1, & \text{если вершины } i \text{ и } j \text{ принадлежат разным группам} \\ 0, & \text{если вершины } i \text{ и } j \text{ принадлежат одинаковым группам} \end{cases}$$

и величину *cut size* можно переписать в виде

$$R = \frac{1}{4} \sum_{\substack{1 \le i \le n \\ 1 \le j \le n}} (1 - s_i s_j) A_{ij}$$

Используем следующую цепочку преобразований

$$\sum_{ij} A_{ij} = \sum_{i} d_i = \sum_{i} s_i^2 d_i = \sum_{ij} s_i s_j d_i \delta_{ij}$$

и перепишем cut size следующим образом:

$$R = \frac{1}{4} \sum_{ij} s_i s_j (d_i \delta_{ij} - A_{ij}) = \frac{1}{4} \mathbf{s}^T \mathbf{L} \mathbf{s}$$

где ${f L}$ — матрица Лапласа с элементами

$$L_{ij} = \begin{cases} d_i, & \text{если } i = j \\ -1, & \text{если } i \neq j \text{ и между } i \text{ и } j \text{ есть ребро} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

Далее надо отметить несколько замечательных свойств матрицы Лапласа:

- 1. Матрица симметричная, а, значит, собственные векторы образуют ортонормированный базис
- 2. Все собственные значения матрицы неотрицательны
- 3. Сумма по любой строке или по любому столбцу равна 0
- 4. Из свойств 2 и 3 следует, что всегда будет нулевое собственное значение и соответствующий ему собственный вектор $(1,1,1,\dots)/\sqrt{n}$

Можно пойти дальше и ещё упростить запись $cut\ size$: если разложить $\mathbf{s}=\sum_{i=1}^n a_i\mathbf{v}_i$, где $a_i=\mathbf{v}_i^T\mathbf{s}$, то

$$R = \sum_{i} a_{i} \mathbf{v}_{i}^{T} \mathbf{L} \sum_{j} a_{j} \mathbf{v}_{j} = \sum_{ij} a_{i} a_{j} \lambda_{j} \delta_{ij} = \sum_{i} a_{i}^{2} \lambda_{i}$$

Таким образом, минимизацию R можно рассматривать как выбор a_i^2 , минимизирующих сумму. Как было отмечено, всегда существует собственный вектор из единиц. Если положить $\mathbf{s}=(1,1,1,\dots)$, то R становится равным нулю, что соответствует объединению всех вершин в одно сообщество. Такой тривиальный случай нас не интересует, поэтому рассматривается собственный вектор, соответствующий второму минимальному собственному значению. То есть мы будем подбирать вектор \mathbf{s} наиболее близким к $\mathbf{v}^{(2)}$. Учитывая ограничение, что значения \mathbf{s} могут быть только ± 1 , искомое \mathbf{s} принимает вид

$$s_i = \begin{cases} +1, & v_i^{(2)} \ge 0\\ -1, & v_i^{(2)} < 0 \end{cases}$$

Это и есть спектральный метод в простейшем виде.

Однако авторы отмечают, что хорошее разделение — не совсем то, через которое проходит наименьшее число вершин. Поэтому они предлагают разделять те места, где количество рёбер меньше, чем ожидалось, или, наоборот, объединять те вершины, у которых количество рёбер больше, чем ожидалось.

Q = (количество вершин внутри сообщества) - (ожидаемое количество вершин)

$$= \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2m} \right) \delta(C_i, C_j) \to \max$$

Вот откуда берётся модулярность Используя $\delta(C_i,C_j)=\frac{1}{2}(s_is_j+1)$ перепишем

$$Q = \frac{1}{4m} \sum_{i,j} \left(A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2m} \right) (s_i s_j + 1) = \frac{1}{4m} \mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s},$$

где ${\bf B}$, называемая матрицей модулярности, во многих смыслах похожа на матрицу Лапласа

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

 ${\rm M}$ именно настраивая вектор ${\rm s}$ на собственный вектор, соответствующий максимальному собственному значению, получается метод Leading Eigenvector.

$$s_i = \begin{cases} +1, & u_i^{(1)} \ge 0 \\ -1, & u_i^{(1)} < 0 \end{cases}$$

Напомним, что будет относить к сообществу 1 те вершины, у которых соответствующее значение вектора $\mathbf s$ равно плюс единице, и к сообществу 2 иначе. Подобным образом граф разбивается на сообщества, пока увеличивается значение модулярности.

2.7 MultiLevel

Алгоритм основан на оптимизации модулярности. Как и в многих предыдущих методах, каждой вершине сначала ставится в соответствие по сообществу. Далее чередуются следующие этапы:

1. Первый этап

- Для каждой вершины перебираем её соседей
- Перемещаем в сообщество соседа, при котором модулярность увеличивается максимально
- Если перемещение в любое другое сообщество может только уменьшить модулярность, то вершина остаётся в своём сообществе
- Последовательно повторяем, пока какое-либо улучшение возможно

2. Второй этап

- Создать метаграф из сообществ-вершин. При этом рёбра будут иметь веса, равные сумме весов всех рёбер из одного сообщества в другое или внутри сообщества (т.е. будет взвешенная петля)
- Перейти на первый этап для нового графа

Алгоритм прекращает работу, когда на обоих этапах модулярность не поддаётся улучшению. Все исходные вершины, которые входят в финальную метавершину, принадлежат одному сообществу.

Несколько замечаний:

- На первом этапе вершина может рассматриваться несколько раз
- Порядок перебора не сильно влияет на точность, однако может существенно влиять на время работы алгоритма
- На практике оказывается достаточно 3-4 итераций

Для ясности приведём иллюстрацию общей схемы работы алгоритма

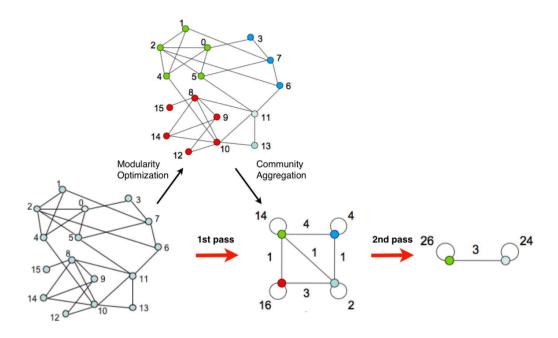


Рис. 4: Два прохода алгоритма. Для первого показаны оба этапа

3 Разбиение на пересекающиеся сообщества

3.1 k-Clique Perlocation

Сlique perlocation method (CPM) основан на предположении, что сообщества состоят из пересекающихся полных подграфов. Алгоритм начинает работу с поиска всех клик размера k, после чего строится новый граф, вершинами которого являются найденные клики. Ребро образуется в случае, если пересечение вершин-клик состоит из k-1 вершины исходного графа. Компоненты связности нового графа и будут определять найденные сообщества. Эксперименты показывают, что k хорошо брать в пределах от k до k Метод хорош своей интуитивностью, однако неприменим на графах с очень большим количеством вершин.

3.2 BigCLAM

Cluster Affiliation Model for Big Networks — вероятностная генеративная модель, сводящая задачу выделения сообществ к задаче неотрицательной матричной факторизации. Для начала немного изменим исходную постановку: теперь у нас будет

двудольный граф, в одной доле которого находятся сообщества, а в другой — вершины, причём каждая вершина $u \in V$ не просто принадлежит сообществу $c \in C$, а принадлежит ему с каким-то неотрицательным весом F_{uc} (если не принадлежит, то вес равен нулю):

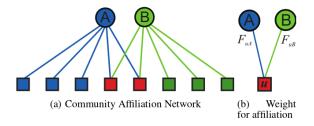


Рис. 5: Двудольный граф принадлежностей. Рёбра с нулевыми весами не отображаются

Тогда, для заданной матрицы весов F предполагается, что каждое сообщество соединяет вершины u и v с вероятностью $1 - \exp(-F_{uc} \cdot F_{vc})$. Для всех сообществ вероятность ребра между u и v равна $1 - \exp(-\sum_c F_{uc} \cdot F_{vc})$ или, в краткой форме,

$$p(u,v) = 1 - \exp(-F_u \cdot F_v^T).$$

Теперь можно воспользоваться методом максимизации правдоподобия: для заданного графа G(V, E) будем стараться найти K сообществ, при которых $\hat{F} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ доставляет максимум правдоподобия:

$$\hat{F} = \arg \max_{F: F_{uc} \ge 0} l(F)$$

$$l(F) = \log P(G|F) = \sum_{(u,v) \in E} \log(1 - \exp(-F_u \cdot F_v^T)) - \sum_{(u,v) \notin E} F_u \cdot F_v^T$$

Эта задача оптимизации и сводится к неотрицательной факторизации матрицы смежности A графа G. Определять K предлагается по качеству на отложенной выборке.

В итоге получается матрица F степеней принадлежностей вершин сообществам. Результирующая принадлежность (принадлежит/не принадлежит) определяется отсечением по порогу.

Осталось лишь описать поиск F. Будем использовать блочно-координатный градиентный метод. Предлагается обновлять каждое F_u при фиксированных остальных F_v , то есть обновлять принадлежности конкретной вершины при фиксированных принадлежностях других. Главная причина фиксации: задача становится выпуклой. То есть, для каждой вершины u решается вспомогательная задача:

$$\hat{F}_u = \arg\max_{F_{uc} \ge 0} l(F_u),$$

где

$$l(F_u) = \sum_{v \in \mathcal{N}(u)} \log(1 - \exp(-F_u \cdot F_v^T)) - \sum_{v \notin \mathcal{N}(u)} F_u \cdot F_v^T,$$

где $\mathcal{N}(u)$ — множество соседей вершины u. Именно благодаря суммированию только по соседям метод получается очень масштабируемым: реальный социальные графы больших размеров очень разреженные, то есть вершины имеют малое по сравнению с количеством вершин в графе количество соседей, вследствие чего каждое обновление имеет близкую к константе вычислительную сложность.

3.3 DEMON

Алгоритм Democratic Estimate of the Modular Organization of a Network является обобщением метода Label Propagation, описанного ранее. Сначала для каждой вершины v стоится эго-сеть: выбирается подграф, вершинами которого являются соседи v, а рёбрами — все рёбра между всеми соседями v. Далее, для данной эго-сети запускается Label Propagation, в результате работы которого получается некоторое разбиение $\mathcal{C}(v)$ на сообщества соседей v. После этого его необходимо объединить с итоговым покрытием \mathcal{C} , которое инициализируется пустым. Опишем, как происходит объединение. Два сообщества I и J объединяются в том и только в том случае, если не более ε процентов меньшего из них не содержится в большем из них. Например, для $\varepsilon = 0$ объединение будет происходить только, когда одно из сообщется полностью содержится в другом, а для $\varepsilon = 1$ объединение будет происходить всегда. Теперь можем описать сам алгоритм:

- 1. Инициализировать $\mathcal{C} = \emptyset$
- 2. Для вершины $v \in V$ построить эго-сеть и получить её разбиение $\mathcal{C}(v)$ с помощью Label Propagation
- 3. Для каждого из сообществ в C(v) и для каждого из сообществ в C произвести объединение с заданным порогом.
- 4. Повторять шаги 2-4, пока есть нерассмотренные вершины.

3.4 CONGO

Cluster-Overlap Newman Girvan Optimized algorithm также является обобщением ранее описанного метода, а именно Edge Betweenness. Автор вводит дополнительную операцию разбиения вершины для того, чтобы результатом было разбиение на пересекающиеся сообщества. Раньше каждому ребру ставилось в соответствие значение edge betweenness, с помощью которого происходило последовательное удаление рёбер (удалялось ребро с максимальным edge betweenness, после чего значения пересчитывались). Теперь дополнительно каждой вершине будем ставить в соответствие величину split betweenness. Представим, что вершину v заменили на v1 и v2. Тогда split betweenness вершины v будет равен количеству кратчайших путей, проходящих через виртуальное ребро между v1 и v2. При этом смежные с v рёбра делятся между v1 и v2 таким образом, чтобы величина split betweenness была максимальной для v. Пример:

Далее последовательно повторяются удаления рёбер и разбиения вершин. Однако автор отмечает, что после каждой такой операции пересчитывать значения split и edge betweenness очень дорого, так как приходится "проходиться" по всему графу. Поэтому предлагается пересчитывать значения betweenness только для путей,

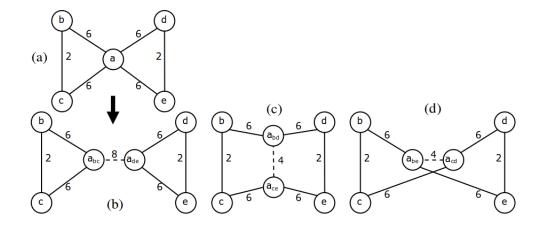


Рис. 6: (a) Граф. (b) Лучшее разбиение вершины а. (c), (d) Другие разбиения.

длина которых не превосходит некоторого h, являющегося параметром алгоритма. Итоговый алгоритм:

- 1. Посчитать все edge betweenness для рёбер и split betweenness для вершин
- 2. Найти ребро или вершину с максимальным значением betweenness
- 3. Удалить выбранное ребро или разбить выбранную вершину
- 4. Пересчитать величины betweenness в h-окрестности данного ребра или данной вершины
- 5. Повторять шаги 2-5, пока есть рёбра

2do: разобраться с русской кодировкой и правильным оформлением списка литературы 2do: замечания в блокноте

Список литературы

- [1] Clauset, A. Finding community structure in very large networks / Aaron Clauset, M. E. J. Newman, Cristopher Moore // Physical Review E. 2004. http://arxiv.org/abs/cond-mat/0408187.
- [2] Girvan, M. Community structure in social and biological networks / Michelle Girvan, M. E. J. Newman // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2001. http://arxiv.org/abs/cond-mat/0112110.
- [3] igraph library. 2016. http://igraph.org/python/.

- [4] Raghavan, U. N. Near linear time algorithm to detect community structures in large-scale networks / Usha Nandini Raghavan, Reka Albert, Soundar Kumara // Physical Review E. 2007. http://arxiv.org/abs/0709.2938.
- [5] Slavnov, K. A. Social graph analysis. 2015. http://www.machinelearning.ru/wiki/images/6/60/2015_417_SlavnovKA.pdf.