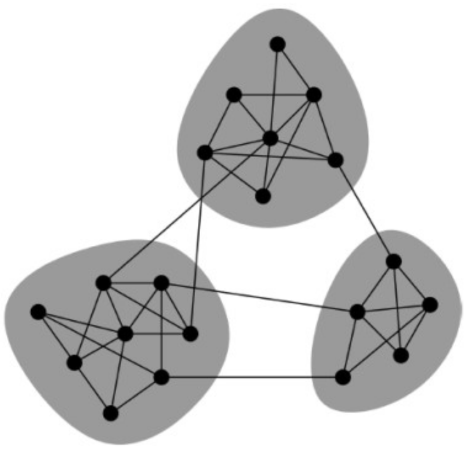
> 课程链接：CS224W: Machine Learning with Graphs
> 课程视频：【课程】斯坦福 CS224W: 图机器学习 (2019 秋 | 英字)

目录

1. 前言

在上一节的内容，我们了解了网络中的Role（角色），我们也讲到了Role和Community的区别（前者是功能相同的节点的集合，后者则是有联系的节点的集合），这一节的内容会来探讨一下Networks中的Community。

在我们的印象中，网络通常是这个样子的，就像社交网络一样：由许多个节点团（社区）联系而成，节点团内的节点联系紧密，节点团之间的节点联系稀疏。



这一节的内容就是来探讨这样一个概念图形成的原因，以及怎样去自动发掘网络中的Community。

我们可以先从社会学的角度去看待这样的概念图。

首先介绍一个很重要的概念——**信息流（information flow）**。这里我们需要考虑一个问题：*信息在网络中是如何流通的。*这里面又涉及到两个小问题：

- **How does information flow through the network?**
  - **What structurally distinct roles do nodes play?**
  - **What roles do different links (“short” vs. “long”) play?**

为了阐述信息在网络中的流通，Mark Granovetter 教授在他的博士论文中有做过这样一项研究，他研究人们怎么获取新的工作信息，是怎样找到自己的工作的。他发现，人们通常更倾向于通过熟人（acquaintances）获取这些信息，而不是通过联系更加亲密的朋友（close friends）。这是一个比较“反常”的结论，因为在我们的印象中，我们总是觉得自己在遇到困难或事情的时候，会找更亲密的人来帮忙。

> 注：在英文中，acquaintance的意思是a person that you know but who is not a close friend，不会经常联系，关系上看应该要比close friends要疏远一点。close friend指每天都联系的意思。

对此，Mark Granovetter 教授给出了他的解释。

首先，他提供了两个看待友谊的观点：

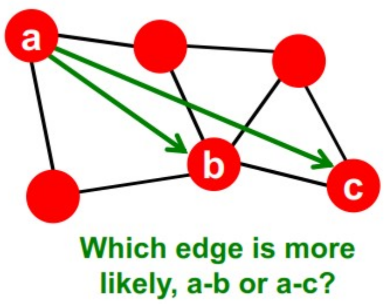
- **Two perspectives on friendships:**
  - **Structural:** Friendships span different parts of the network
  - **Interpersonal:** Friendship between two people is either **strong** or **weak**

对于社会中不同角色之间的友谊/联系，Mark Granovetter 教授也提供了两个角度——

First Point: Structure

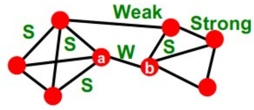
- **First point: Structure**
  - Structurally embedded edges are also socially strong
  - Long-range edges spanning different parts of the network are socially weak

从**结构**的角度上看，如果网络中的两个人有一个共同的朋友，那么他们成为朋友的可能性就会增加。比如在下图中，a和b更可能成为朋友，也就是说a和b之间的边更可能产生。



Second Points: Information

- **Second point: Information**
  - Long-range edges allow you to gather information from different parts of the network and get a job
  - Structurally embedded edges are heavily redundant in terms of information access



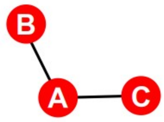
从信息获取的角度上看，长范围的关系可以帮助我们获取不同的、新的信息；而经常联系的人会形成一个圈子，大家获取信息的来源是大致是一样的，从信息获取的角度来说是冗余的——这就解释了为什么我们会选择从熟人而不是密友那里获取信息。

这样的现象被称作**“Triadic closure”（三角闭合）**

- **Triadic closure = High clustering coefficient**

Reasons for triadic closure:

- If B and C have a friend A in common, then:
  - B **is more likely to meet** C
    - (since they both spend time with A)
  - B and C **trust** each other
    - (since they have a friend in common)
  - A has **incentive** to bring B and C together
    - (since it is hard for A to maintain two disjoint relationships)



Mark Granovetter 教授在上世纪六十年代就提出了这些理论，而这些理论后面才被陆续证实。

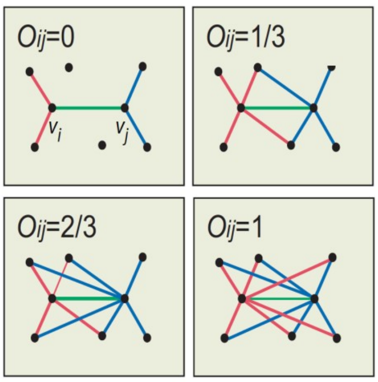
随着这个理论的发展和完善，引入了一个新的概念——**Edge overlap**

- **Edge overlap:**

$$O_{ij} = \frac{|(N(i) \cap N(j)) \setminus \{i,j\}|}{|(N(i) \cup N(j)) \setminus \{i,j\}|}$$

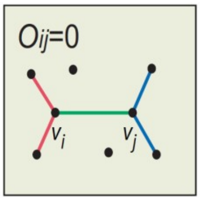
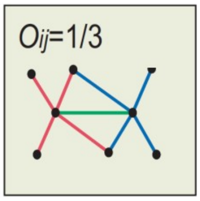
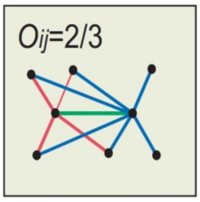
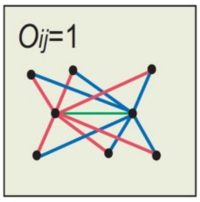
  - $N(i)$ … the set of neighbors of node i

- **Note: Overlap = 0** when an edge is a **local bridge**



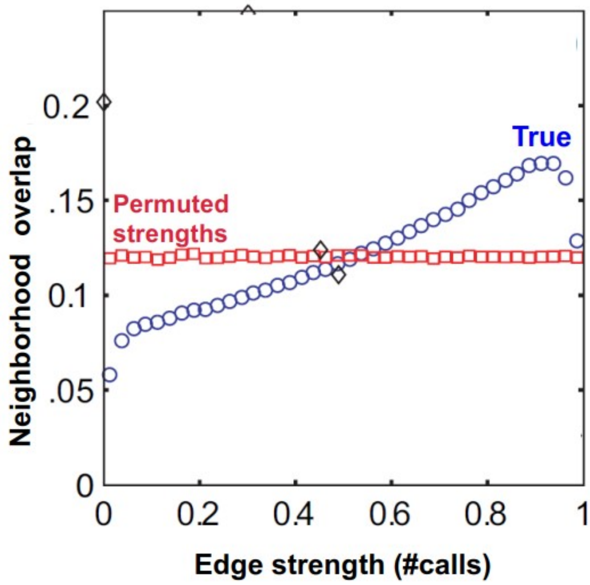
O_{ij}的分子是与节点i和节点j共同相连的节点集合的模，分母是除了节点i和节点j以外的所有节点的集合的模。

例子	计算

例子	计算
	$O_{ij}=\frac{0}{6}=0$
	$O_{ij}=\frac{2}{6}=\frac{1}{3}$
	$O_{ij}=\frac{4}{6}=\frac{2}{3}$
	$O_{ij}=\frac{6}{6}=1$

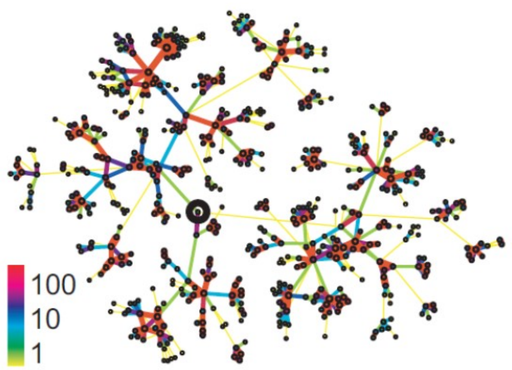
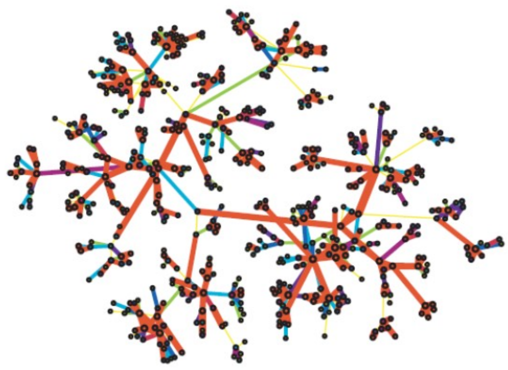
> 从社会学的角度来看，这里的Edge overlap，感觉描述的是两个人社交圈子的重合程度。

我们可以从具体的数据中感受一下edge overlap：



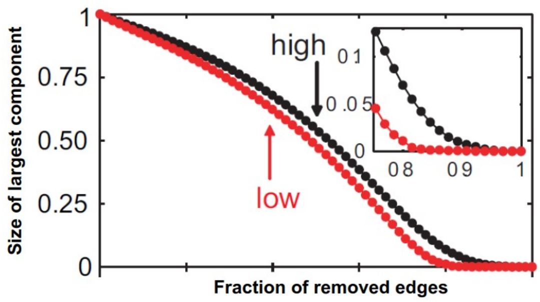
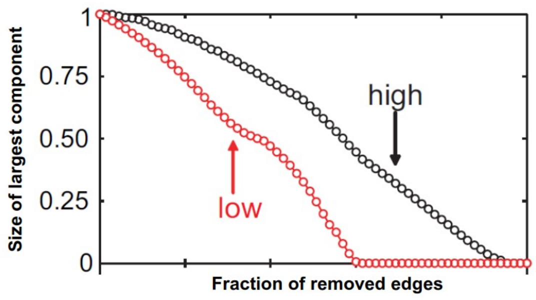
首先，数据来源于cell phone network。这是一张Edge strength（边的强度，代表联系的亲密程度，打电话的次数越多越亲密）和Neignbourhood overlap（邻居重合度）的关系图。蓝色的是真实数据，可以看到联系越紧密的人其实和你的社交圈子的交集就越多。红色的是保持网络结构不变，给网络中的节点随机分配edge strength之后统计的Neignbourhood overlap，会发现社交圈子的重合度与联系的紧密程度无关了，几乎是一条水平直线。

我们再看另一份数据（mobile call graph）：

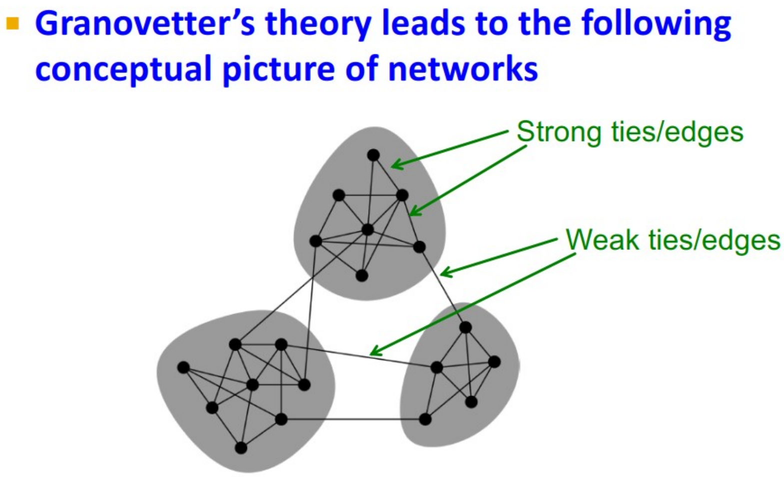
真实数据	随机分配edge strength
	

可以看到，随机分配edge strength后的网络中，强连接（红色的边）分布得不是那么集中了。

那么我们怎么从这样的一些数据演化成前面提到的概念图呢？我们做下面这样的处理：

将网络中的边按照edge strength从低到高删除	将网络中的边按照edge overlap从低到高删除
	

可以看到，网络中的最大子图的规模在减小，逐渐形成我们前面提到的概念图：



2. Network communities

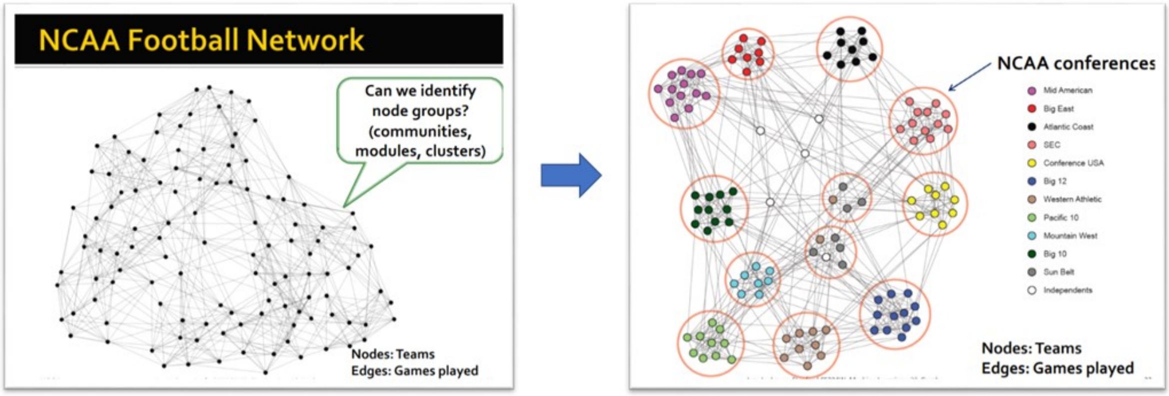
根据Granovetter的理论，*网络是由紧密相连的节点组成的。*

> networks are composed of tightly connected sets of nodes.

而Community是*具有大量内部连接和很少外部连接(到网络的其余部分)的节点集。*

> Sets of nodes with **lots** of **internal** connections and **few external** ones (to the rest of the network).

那么，我们怎样去自动检测到网络中的这些节点集（community）呢?



我们首先引入参数 Modularity Q：
Modularity Q 衡量的是一个网络社区划分的合理程度。

> Modularity Q：A measure of how well a network is partitioned into communities

> 划分partition类似于聚类，将节点划分成不同的不相交的子集

- Given a **partitioning** of the network into groups disjoint $s \in S$:

$$Q \propto \sum_{s \in S} [\,(\#\text{ edges within group } s) - \underbrace{(\text{expected } \#\text{ edges within group } s)}_{\text{Need a null model}}\,]$$

假设我们已经有了分组S，那么对于每个组s来说，组内的edges的数量和预期的edges的数量之间的差异，就可以用参数Modularity Q来衡量。如果这个差值很大，就说明这是一个很凝聚的团体（group）。

那么，我们就需要一个Null Model来得到预期的edges的数量。给定一个包含n个节点、m条边的真实的网络G，重新（随机）地构造新的网络G'，就得到所需要的Null Model。这个新构造的网络G'可以看成是一个多重图（multigraph），两个节点之间的预期存在的边可以由下面的公式计算：

- **The expected number of edges between nodes i and j of degrees k_i and k_j equals: $k_i \cdot \frac{k_j}{2m} = \frac{k_i k_j}{2m}$**
  - The expected number of edges in (multigraph) **G'**:
    - $= \frac{1}{2} \sum_{i \in N} \sum_{j \in N} \frac{k_i k_j}{2m} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2m} \sum_{i \in N} k_i \left(\sum_{j \in N} k_j \right) =$
    - $= \frac{1}{4m} 2m \cdot 2m = m$

Note: $\sum_{u \in N} k_u = 2m$

这里k为节点的度（如果忘记了可以回顾一下前面课程的内容[cs224w 图神经网络 学习笔记（二）Properties of Networks and Random Graph Models]）

这样，Modularity Q就可以由下面这个式子计算：

$$Q(G,S)=\underbrace{\frac{1}{2m}}_{\text{Normalizing const.: } -1\le Q\le 1}\sum_{s\in S}\sum_{i\in s}\sum_{j\in s}\left(A_{ij}-\frac{k_i k_j}{2m}\right)$$

A_{ij} = 1 if i→j,
0 otherwise

Q一般取值在-1到1之间。如果划分的社区内节点之间的连边大于预期，则Q为正。通常来说，Q越大，网络结构的社区划分效果越好，但目前大多数网络在较为合理的社区划分之后，其Q值出现在0.3-0.7，在这个区间内的Q值意味着网络存在着比较重要的社区结构（significant community structure）。

上面Q值计算的公式等价于下面这个式子：

$$Q=\frac{1}{2m}\sum_{ij}\left[A_{ij}-\frac{k_i k_j}{2m}\right]\delta(c_i,c_j)$$

- A_{ij} represents the edge weight between nodes i and j;
- k_i and k_j are the sum of the weights of the edges attached to nodes i and j, respectively;
- $2m$ is the sum of all of the edge weights in the graph;
- c_i and c_j are the communities of the nodes; and
- δ is an indicator function $\delta(c_i,c_j)=1\ if\ c_i=c_j\ else\ 0$

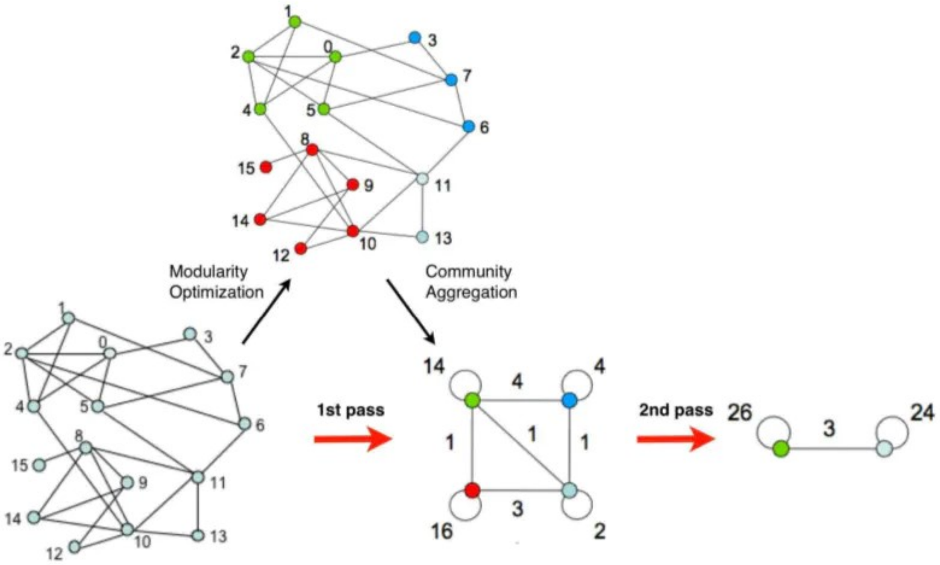
可以发现，计算Q值可以衡量目前的社区划分是否合理。但是，我们怎么找到这些社区呢？接下来就要介绍发现社区的算法——Louvain算法。

3. Louvain algorithm——Louvain社区发现算法

Louvain algorithm是一种贪心算法。这部分算法网上有很多资料进行介绍。

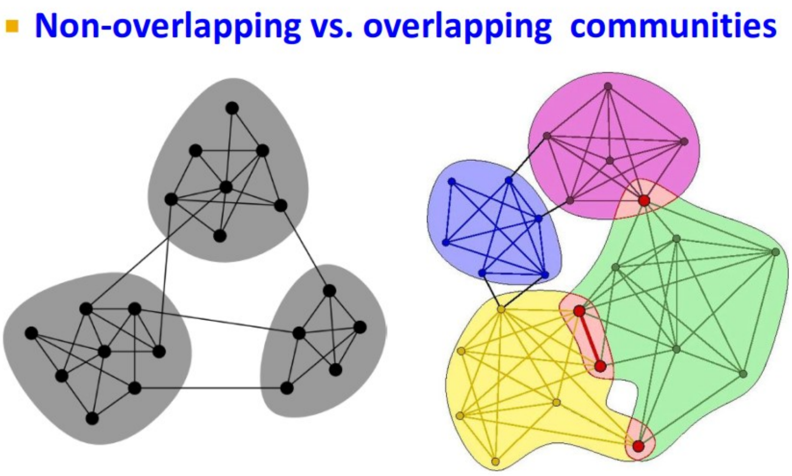
参考资料：
[社区发现算法-Louvain]
[Github项目：CommunityDetection]

> Louvain算法包括两个阶段，在步骤一它不断地遍历网络中的结点，尝试将单个结点加入能够使modularity提升最大的社区中，直到所有结点都不再变化。在步骤二，它处理第一阶段的结果，将一个个小的社区归并为一个超结点来重新构造网络，这时边的权重为两个结点内所有原始结点的边权重之和。迭代这两个

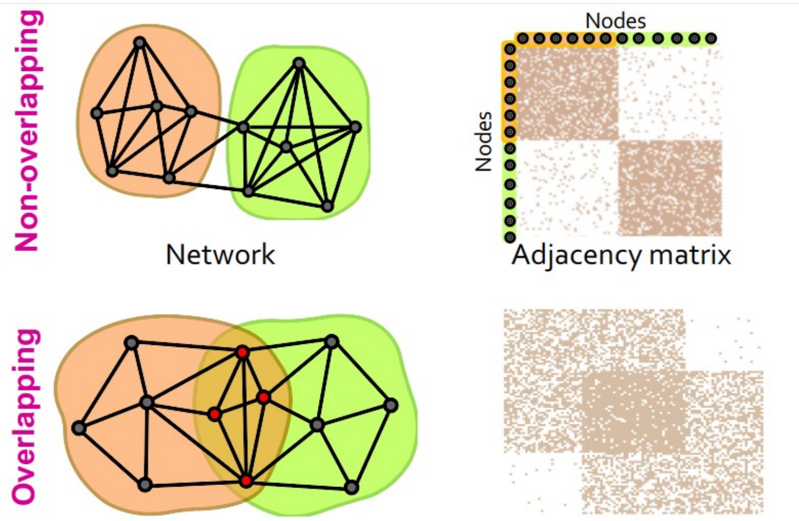
> 步骤直至算法稳定。它的执行流程如图所示：
>
> 
>

Louvain算法适用于不重叠的社区发现，但是我们现实生活中很多社区其实是存在重叠的，下面就介绍另一种社区发现算法——BigCLAM。

4. BigCLAM——重叠社区发现算法 Detecting Overlapping Communities

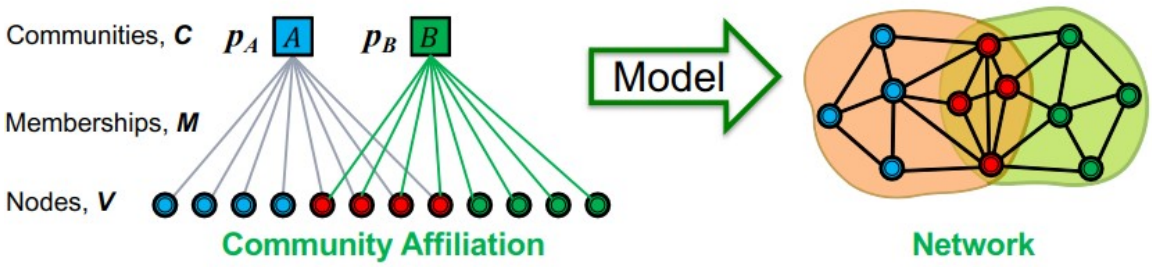


非重叠社区和重叠社区之间的区别还可以从邻接矩阵上看出来：



算法过程共有两步：
第一步：Define a generative model for graphs that is based on node community affiliations. 基于节点社区关系生成一个图，可以采用Community Affiliation Graph Model (AGM)算法，在斯坦福SNAP的官网上可以找到这个算法的简介。
第二步：Given graph G, make the assumption that G was generated by AGM. Find the best AGM that could have generated G. 给定一个真实的图，希望AGM算法生成的图尽可能地贴合真实图。

AGM: Generative process



左边是我们预设的社区结构（可以看成一张二分图），我们怎样从这样的社区结构得到一张网络呢？首先，我们给定生成网络的参数：

- Nodes 节点数V
- Communities 社区数C
- Memberships 成员关系 M
- 每个社区c都给定一个概率p_c，p_c的含义是社区c内的节点之间生成边的概率。

这样就可以用随机图生成的思想来从预设的社区结构生成网络：

- 当两个节点在同一个社区c_1时，节点之间有p_{c1}的概率进行相连。这时

$$p(u,v) = 1 - \prod_{c \in c_1} (1 - p_c) = 1 - 1 + p_{c1} = p_{c1}$$

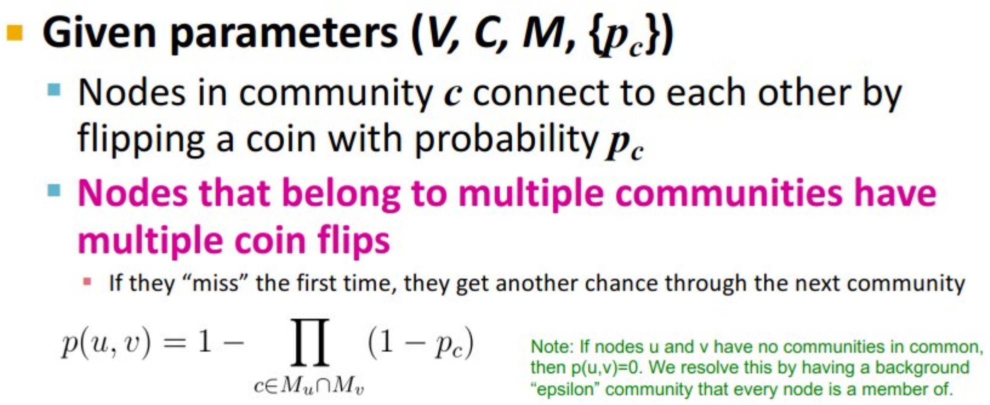
- 当两个节点不属于同一个社区时，节点之间没有边进行相连。这时

$$p(u,v) = 1 - (1 - 0) = 0$$

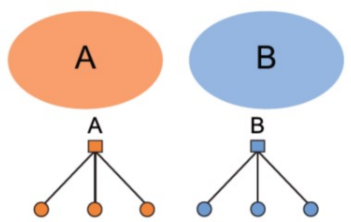
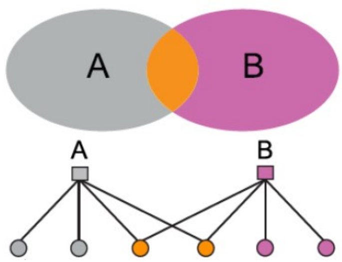
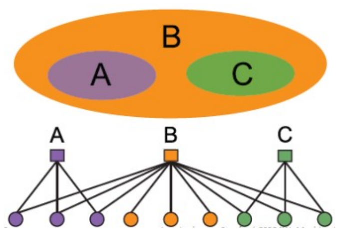
- 当两个节点属于两个社区（c_1和c_2）时，

$$\begin{aligned} p(u,v) &= 1 - \prod_{c \in c_1 \cap c_2} (1 - p_c) \\ &= 1 - (1 - p_{c1})(1 - p_{c2}) \\ &= 1 - (1 - p_{c1} - p_{c1} + p_{c1}p_{c2}) \\ &= p_{c1} + p_{c1} - p_{c1}p_{c2} \end{aligned}$$

因为p_{c1}和p_{c2}都是小数，所$p(u,v)$一定大于p_{c1}和p_{c2}。从社交网络上理解，就是两个人所处的共同圈子越多，他们认识的可能性就越大。

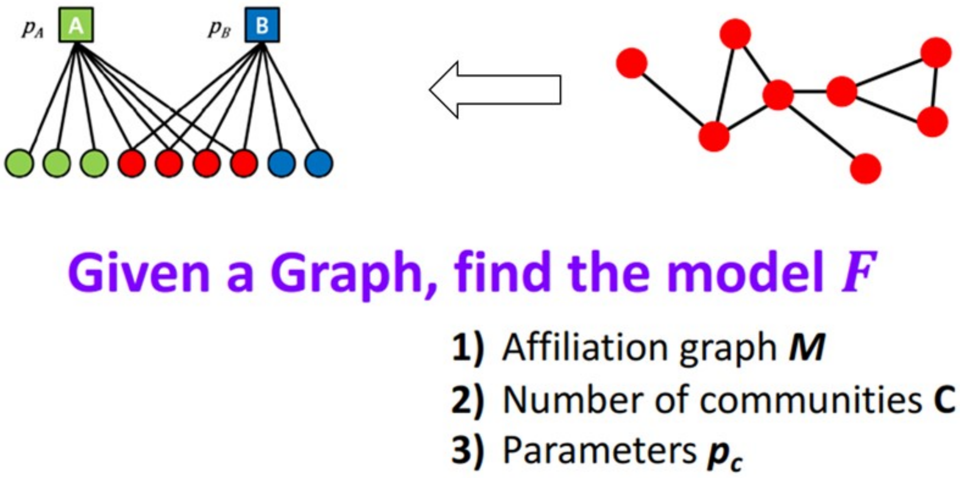


AGM方法的灵活性很高，可以适用于各种网络结构：

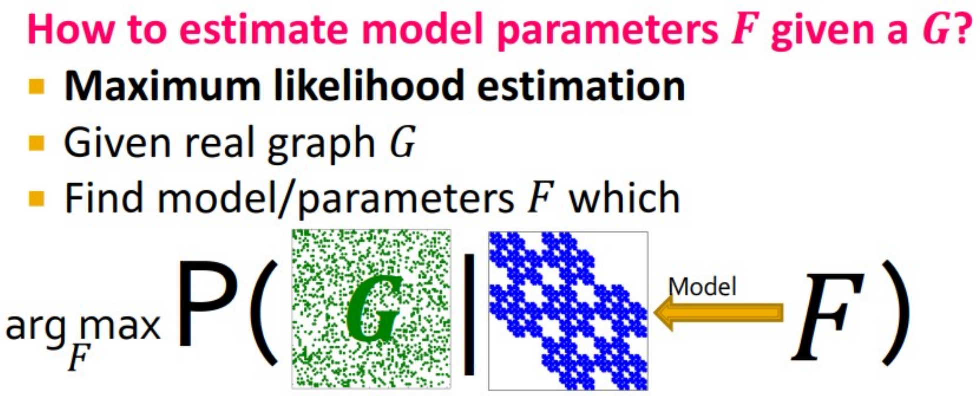
Non-overlapping	Overlapping	Nested
		

Detecting communities with AGM

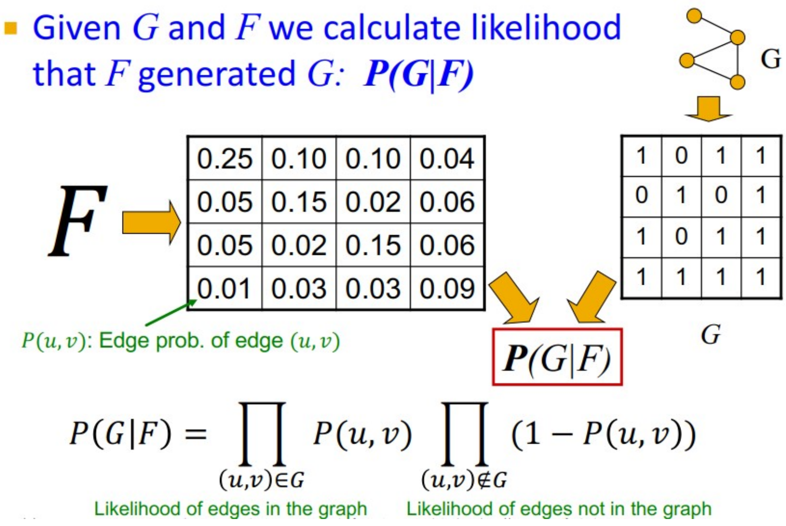
上面说的很多内容，是怎么从已知的社区结构得到网络，但是社区发现意味着从已知的网络得到一定的社区结构，也就是前面那个过程的逆过程。也就是说，我们已知网络G，需要找到二分图模型F，且得到相关的参数。



解决这个问题的思路关键在于：已知真实网络G，找到模型F，使得G关于F的条件概率最大（就是上面的正向过程），也就是极大似然估计。



那么，我们就需要找到一个计算条件概率$P(G|F)$的高效的方法，并遍历模型F，其中条件概率$P(G|F)$最大的模型F就是我们需要的社区结构。



在AGM算法中，$p(u,v)$表示的是两个结点之间产生连边的关系。在真实网络G中，两点相连的时候$p(u,v)=1$，两点不相连的时候$p(u,v)=0$。在模型F中，为了让它更贴合真实网络G，我们希望相连的两点之间的概率尽可能地大，不相连的两点之间的概率尽可能地小。这样就引入我们的目标函数：

$$P(G|F) = \prod_{(u,v)\in G} P(u,v) \prod_{(u,v)\notin G} (1 - P(u,v))$$

有了目标函数，就可以用梯度下降来求解啦。

BigCLAM的思想是一样的，但是在概率$p(u,v)$和目标函数的形式上不同：