



FACULTAD DE
INGENIERÍA



UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY

Detección de comunidades

Paola Bermolen

paola@fing.edu.uy

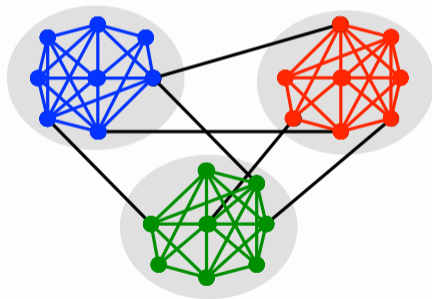


FACULTAD DE
INGENIERÍA
UDELAR

- 1 **Estructura en comunidades**
- 2 **Ejemplos de comunidades en redes**
- 3 **Algoritmos de detección de comunidades**
 - Método de Girvan-Newman
 - Máxima Modularidad
 - Partición espectral de grafos
- 4 **Medidas de desempeño**

Comunidades en redes

- ▶ Rol importante de las redes: relacionar lo **local** con lo **global**
 - ⇒ explicar cómo procesos a nivel de nodo se extienden a la población
- ▶ Usualmente se piensan las redes (sociales) con la siguiente estructura

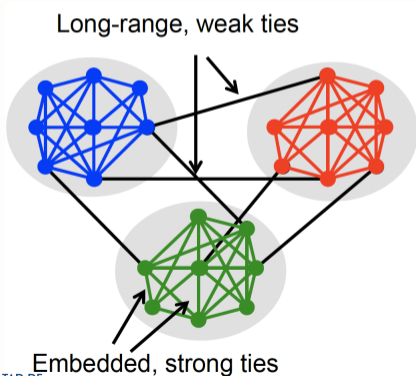


Contexto y motivación

- ▶ En los 60s., M. Granovetter entrevistó a gente que había cambiado de trabajo
- ▶ Consultó sobre cómo habían encontrado sus nuevos trabajos
 - ⇒ muchos se habían enterado a través de contactos personales
- ▶ Sorprendente: los contactos eran a menudo **conocidos** más que **amigos**
- ▶ Si los amigos cercanos tienen la mayor motivación para ayudar
 - ⇒ ¿porqué los conocidos más distantes aportan información crucial?
- ▶ M. Granovetter, *Getting a job: A study of contacts and careers*. University of Chicago Press, 1974

Respuesta de Granovetter

- Relaciona dos perspectivas diferentes acerca de los conocidos lejanos
 - **Estructural:** énfasis en cómo las amistades se extienden a través de la red
 - **Interpersonal:** consecuencias locales de que la amistad sea fuerte o débil
- Entrecruce entre rol estructural e informacional de una arista



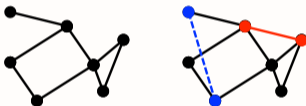
- Respuesta trascendió la pregunta concreta sobre la búsqueda de trabajo
- **Manera general de pensar la arquitectura de redes sociales**

Respuesta de Granovetter

- ▶ Relaciona dos perspectivas diferentes acerca de los conocidos lejanos
 - **Estructural**: énfasis en cómo las amistades se extienden a través de la red
 - **Interpersonal**: consecuencias locales de que la amistad sea fuerte o débil
- ▶ Entrecruce entre rol estructural e informacional de una arista
- 1) **Aristas estructuralmente incluidas** en una comunidad:
 - ⇒ tienden a ser socialmente fuertes; y
 - ⇒ son altamente redundantes en términos de acceso a la información
- 2) **Aristas largo alcance** que abarcan distintas partes de la red
 - ⇒ tienden a ser socialmente débiles; y
 - ⇒ permiten acceso a información útil/novedosa (e.g., trabajo nuevo)

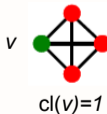
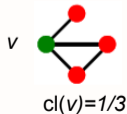
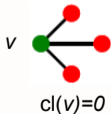
Cierre de triángulos

- ▶ Un principio básico de la formación de redes es el **cierre de triángulos**
“Si dos personas tienen un amigo en común, hay mayores chances de que se hagan amigos en el futuro”
- ▶ Aristas que aparecen (dinámica) en redes sociales tienden a cerrar triángulos



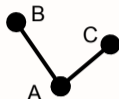
⇒ Más probable que aparezca la arista **roja** que la **azul**

- ▶ Prevalencia de cierre de triángulos se mide con el **clustering coefficient**



Cierre de triángulos

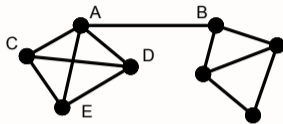
- ¿Porqué es natural que aparezcan cierres de triángulos?



- 1) Aumento de **oportunidades** para que B y C se conozcan
⇒ ambos pasan tiempo con A
 - 2) Hay una base preexistente de **confianza mutua** entre B y C
⇒ ambos tienen a A como amigo común
 - 3) A tiene **incentivos** para juntar a B y C
⇒ falta de amistad entre B y C puede ser fuente de estrés para A
- esta premisa se basa en teorías anteriores de psicología social (Heider 1958)

Puentes

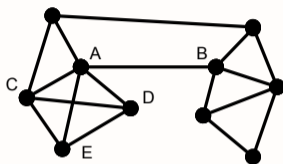
- ▶ Ejemplo de red social simple:



- ▶ A tiene aristas con C,D, y E formando un grupo **bien tejido**
 - ⇒ A,C,D, y E probablemente expuestos a **opiniones similares**
- ▶ Arista entre A y B permite **alcanzar a una parte diferente de la red**
 - ⇒ B ofrece a A **opciones que en otro caso no hubiera conocido**
- ▶ Arista A-B se llama **puente**, si se saca la red se desconecta
 - ⇒ Componentes gigantes sugieren que los **puentes son bastante raros**

Puentes locales

- ▶ En realidad, la red social es mucho más grande y podría ser así

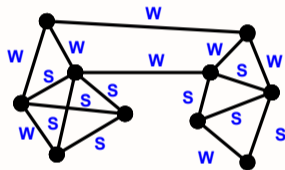


⇒ sin saberlo A y B, pueden existir caminos más largos entre ellos

- ▶ **Def. Alcance** de la arista (u, v) : distancia entre u y v si la arista se elimina
- ▶ **Def.** Un **puente local** es una arista con alcance > 2
 - ⇒ extremos de la arista sin amigos en común
 - ⇒ **Ejemplo:** la arista A-B es un puente local con alcance 3
- ▶ Los puentes locales no son parte de triángulos

Propiedad fuerte de cierre de triángulos

- ▶ Categorizar todas las aristas de la red de acuerdo a su fuerza
 - ⇒ Aristas **fuertes** corresponden a **amistades**
 - ⇒ Aristas **débiles** corresponden a **conocidos**



- ▶ Oportunidad, confianza e incentivos promueven aristas fuertes
 - ⇒ sugiere hipótesis cualitativa llamada **strong triadic closure**
- “Dos aristas fuertes implica una tercer arista que cierra el triángulo”*
- ▶ **Abstracción para analizar las consecuencias de lazos débiles y fuertes**

Puentes locales y lazos débiles

- a) Distinción local interpersonal entre aristas \Rightarrow lazos fuertes/débiles (estática)
- b) Noción global estructural \Rightarrow existencia/ausencia de puentes locales

Teorema

Si un nodo verifica la propiedad fuerte de cierre de triángulos y forma parte de al menos dos aristas fuertes, entonces todo puente local incidente a él es débil

- Relaciona las perspectivas **estructurales** e **interpersonales** en amistades
- Vuelta a la búsqueda de trabajo: los puentes locales conectan con nueva información
 - \Rightarrow Conceptualmente el *alcance* refiere a su debilidad como lazo social
 - \Rightarrow Un poco paradójico, el doble rol habla de “**fortaleza de los lazos débiles**”

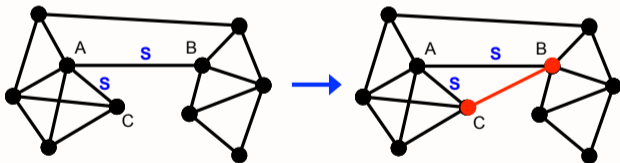
Easley & Kleinberg'10

Prueba por absurdo

- Supongo que el nodo **A** tiene dos aristas fuertes
- Supongo además que **A** cumple la propiedad fuerte de cierre de triángulos



- Sea **A-B** un puente local y un lazo fuerte



⇒ Arista B-C tiene que existir

- Contradice que A-B es un puente local (C es un amigo en común)

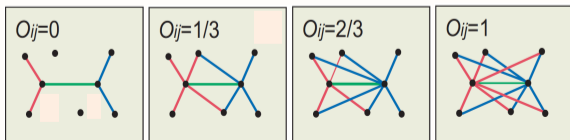
Estructura y fuerza de los lazos en redes grandes

- ▶ ¿Se puede testear la teoría de Granovetter's con **datos en redes reales**?
 - ⇒ Imposible por décadas: falta de datos en redes sociales de gran escala
- ▶ Ejemplo más actual: redes **“who-calls-whom”** con ambos ingredientes clave
 - ⇒ estructura de la red de comunicación entre pares de personas
 - ⇒ tiempo total de habla como medida de fortaleza del lazo
- ▶ J. P. Onella et al., “Structure and tie strengths in mobile communication networks,” *PNAS*, vol. 104, pp. 7332-7336, 2007
 - red celular que incluye $\approx 20\%$ de la población del país

Generalizando lazos débiles y puentes locales

- Hasta ahora hablamos de nociones dicotómicas
 - ⇒ las aristas son fuertes o débiles, son puentes locales o no
- Es conveniente tener medidas que tengan una **graduación más regular**
- Valores **númericos de fortaleza** para los lazos ⇒ duración de las llamadas
 - ⇒ Ordenar las aristas por su fortaleza y registrar su percentil
- **Generalizar puentes locales** ⇒ **superposición de vecindario** de la arista (i, j)

$$O_{ij} = \frac{|n(i) \cap n(j)|}{|n(i) \cup n(j)|}; \quad n(i) := \{j \in V : (i, j) \in E\}$$

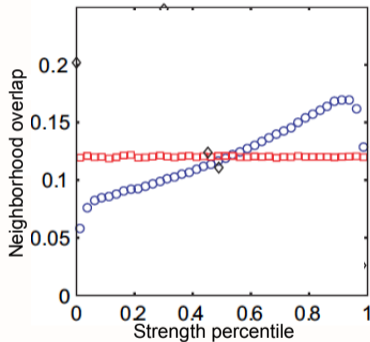


Propiedad:

$O_{ij} = 0$ si (i, j)
es un puente
local

Resultados empíricos

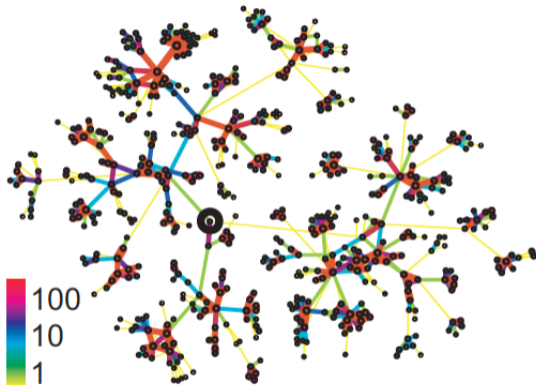
- **Comportamiento esperado:** O_{ij} creciente con la fuerza de los lazos
⇒ Confirmado muy claramente por los datos (puntos \circ)[final?]



- Permutación aleatoria de fortaleza de los datos (puntos \square)
⇒ rompe el acoplamiento de O_{ij} y la fortaleza de los lazos

Red celular y fortaleza de los lazos

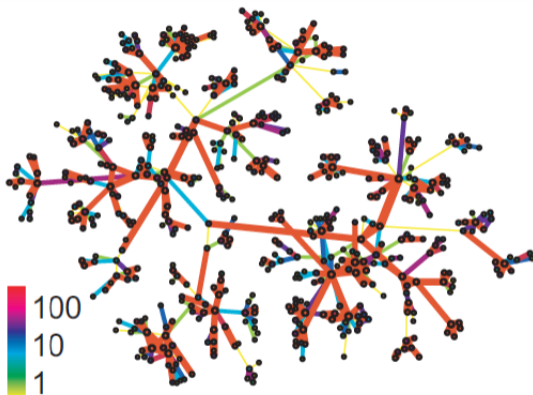
- Red celular con rango de colores para la fortaleza de los lazos



- 1) Lazos más fuertes más estructuralmente arraigados (intra comunidades)
- 2) Lazos más débiles acordes con aristas de largo alcance (inter comunidades)

Permutación aleatoria de la fortaleza de los lazos

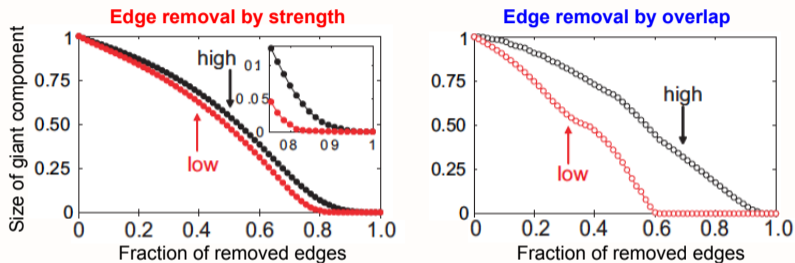
- Misma red celular con **permutación aleatoria de los valores de fortaleza**



- No hay relación aparente entre las funciones estructurales e interpersonales de las aristas

Lazos débiles uniendo comunidades

- **Hipótesis:** lazos débiles -> largo alcance unen comunidades de lazos fuertes



- 1) Eliminar aristas una a la vez empezando con la más fuerte

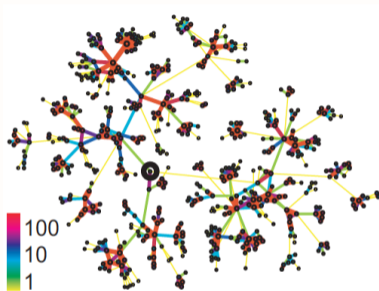
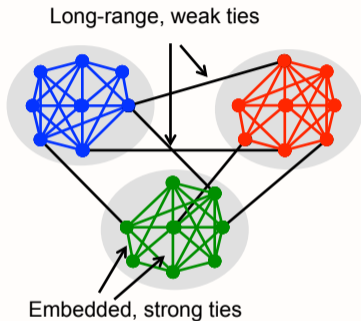
⇒ la componente gigante se achica sostenidamente

- 2) Idem empezando con la más débil

⇒ la componente gigante se achica más rápidamente y punto de quiebre

¿Y la vaca?

- Inicio: usualmente se piensan las redes (sociales) con la siguiente estructura



- Vimos que la imagen conceptual tiene soporte en la teoría de Granovetter's sobre la **fortaleza de los lazos débiles**

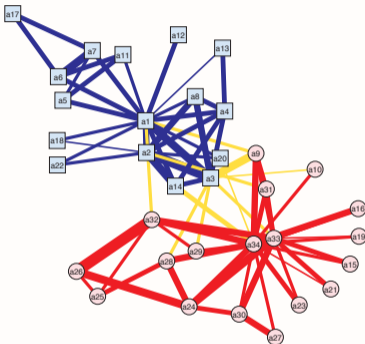
⇒ aunque no es el único intento de formalización...

Ejemplos de comunidades en redes

- 1 Estructura en comunidades
- 2 Ejemplos de comunidades en redes
- 3 Algoritmos de detección de comunidades
 - Método de Girvan-Newman
 - Máxima Modularidad
 - Partición espectral de grafos
- 4 Medidas de desempeño

Zachary's karate club

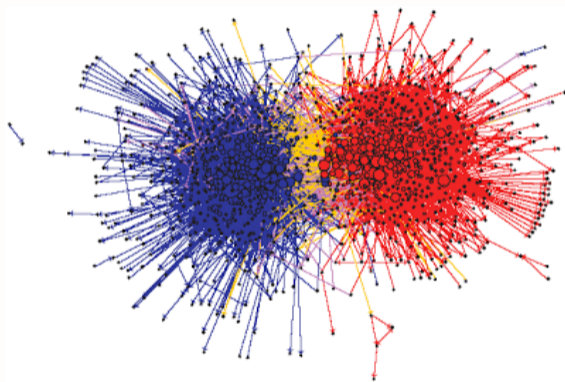
- Interacciones sociales en un club de karate en los 70s



- Zachary fue testigo de la partición en dos grupos durante su estudio
 - ⇒ ejemplo de juguete, clásico algoritmo de detección de comunidades
 - ⇒ “ground truth” de pertenencia a las comunidades (usualmente inexistente)

Blogs políticos

- ▶ Blogs políticos para las elecciones presidenciales de 2004 en USA



- ▶ Estructura de blogs **liberales** y **conservadores** es aparente

Red eléctrica

- ▶ Dividir la red eléctrica en áreas con interacción inter-áreas mínimas

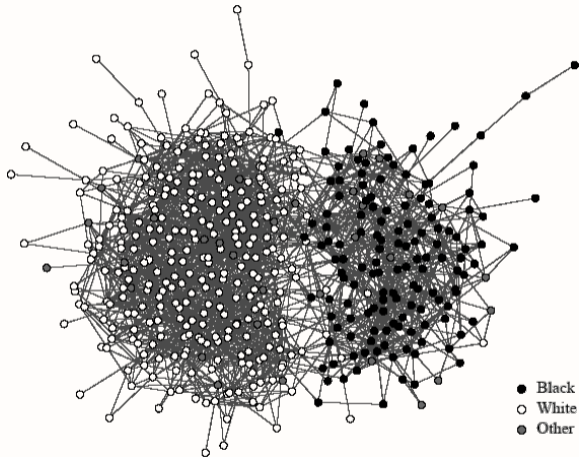


- ▶ **Aplicaciones:**

- Definir áreas de control para la estimación del estado del sistema eléctrico
- Cálculo paralelo del flujo de potencia
- Control de las islas para evitar la propagación de los apagones

Estudiantes de liceo

- ▶ Red de interacción social entre liceales



- ▶ **Assortative mixing** fuerte con raza como característica

Físicos trabajando en Network Science

- Red de coautoría de físicos con publicaciones en análisis de redes

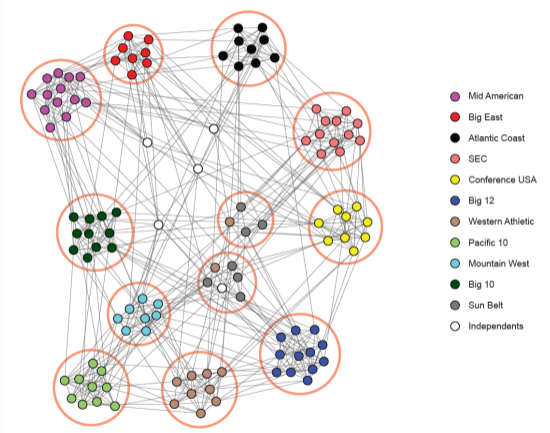


- Comunidades *bien tejidas* (temas) son evidentes a partir de la estructura de

la red

Fútbol universitario

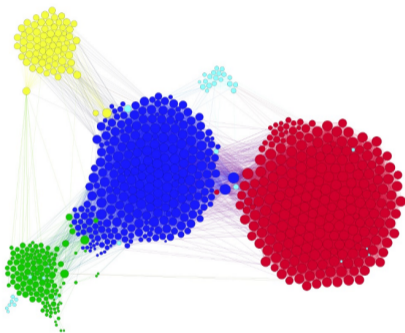
- ▶ Vértices son equipos de fútbol y aristas son partidos en Otoño '00



- ▶ Comunidades son las confederaciones y los equipos

Amistades en Facebook

- ▶ Facebook (subgrado inducido) con 744 vértices y 30K aristas



- ▶ Identificar círculos sociales a los cuáles pertenece los amigos
⇒ empresa, liceo, basketball club, squash club (?), familia

Algoritmos de detección de comunidades

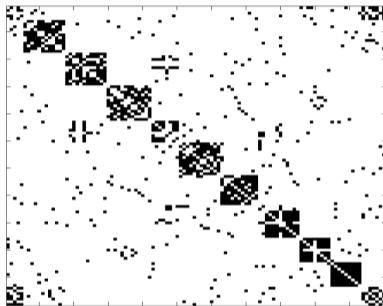
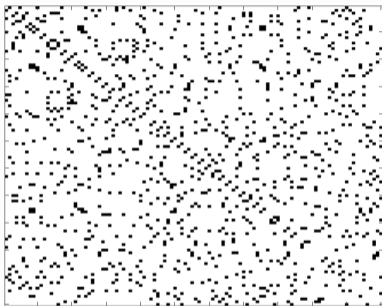
- 1 Estructura en comunidades
- 2 Ejemplos de comunidades en redes
- 3 Algoritmos de detección de comunidades
 - Método de Girvan-Newman
 - Máxima Modularidad
 - Partición espectral de grafos
- 4 Medidas de desempeño

Detección de comunidades y partición de grafos

- ¿Cómo podemos **identificar automáticamente** comunidades?
- **Detección de comunidades** es un problema difícil de *clustering*:
 - C1)** No hay consenso en la definición de comunidad
 - C2)** Selección de subconjuntos de nodos generalmente intratable
 - C3)** Falta de *ground-truth* para validación
- **Partición de grafos**: Separar V en un **número dado** de grupos disjuntos de **tamaño dado**
- **Detección de comunidades**: Número y tamaño de los grupos es **desconocido** en detección de comunidades
 - ⇒ Identificar las *fallas naturales* por las que se separa una red

Detección de comunidades

- ▶ Dado un grafo $G(V, E)$ con matriz de adyacencia \mathbf{A} (izq.)



- ▶ Encontrar permutación de filas/columnas que revelen una **estructura diagonal de bloques** (der.)

Ejemplo: ejemplo de fútbol universitario que vimos antes [Mateos-Giannakis'12]

Particiones de grafos

- ▶ **Bisección de grafos:** partir V en dos grupos tal que,
 - grupos V_1 and V_2 son disjuntos
 - grupos tienen igual tamaño , i.e., $|V_1| = |V_2| = N_v/2$
 - la cantidad de aristas entre vértices en grupos diferentes es mínima
- ▶ Fácil de describir pero difícil de resolver

$$\text{Número de particiones posibles } V : \binom{N_v}{N_v/2} \approx \frac{2^{N_v}}{\sqrt{N_v}}$$

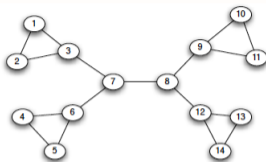
⇒ Usando la fórmula de Stirling's $N_v! \approx \sqrt{2\pi N_v} (N_v/e)^{N_v}$

⇒ **búsqueda exhaustiva solo posible para redes pequeñas**

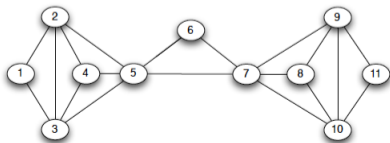
- ▶ No se conoce un algoritmo eficiente (i.e., tiempo polinomial de resolución)
 - ⇒ Excelentes heurísticas, relajando criterios de partición

Fuerza de los lazos débiles

- Puentes locales conectan partes con poca interacción entre sí



- Buena idea: eliminar los puentes locales y que aparezcan las comunidades
- Mala idea
 - ¿qué hacer si hay varios puentes locales? cuál elegir...
 - ¿y si no hay ningún puente local? igual puede haber divisiones naturales

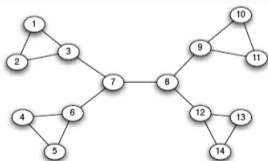


Centralidad betweenness de aristas

- Buena idea: identificar lazos débiles/puentes locales a través de aristas con centralidad betweenness alta

Definición (Centralidad betweenness de aristas)

Se define de manera análoga contando la fracción de caminos más cortos entre pares de vértices a los cuales pertenece la arista



$$C_{Be}(7 - 8) = 7 \times 7 = 49$$

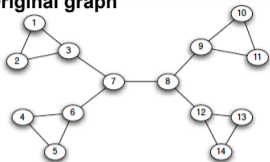
$$C_{Be}(3 - 7) = 3 \times 11 = 33 \text{ idem } 6 - 7, 8 - 9, 8 - 12$$

$$C_{Be}(1 - 3) = 12 \text{ idem } 3, 6, 9, 12 \text{ en sus triángulos}$$

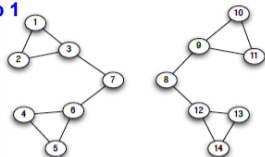
el resto tiene centralidad 1

Algoritmo en acción para el ejemplo

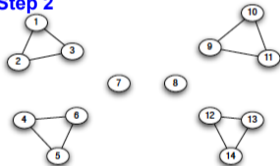
Original graph



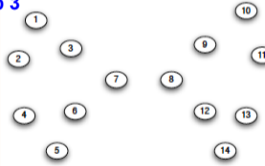
Step 1



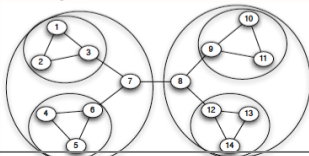
Step 2



Step 3

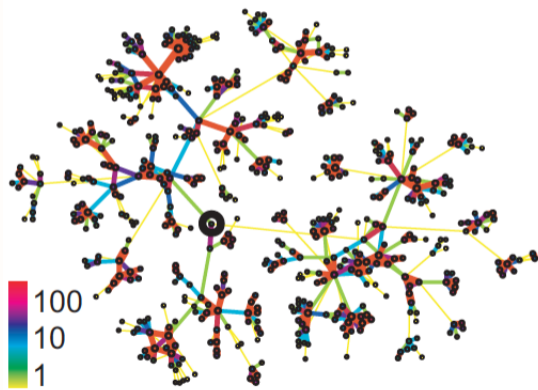


Nested graph decomposition

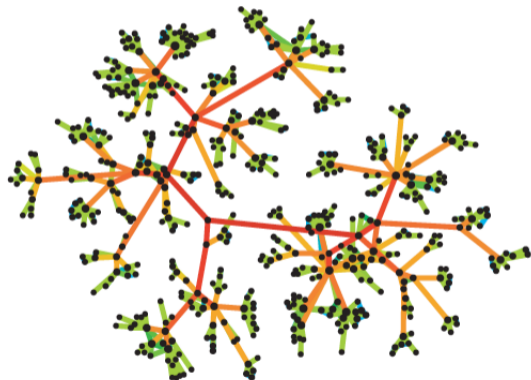


Centralidad betweenness de aristas

- Red celular de antes coloreada con fortaleza de los lazos y con centralidad betweenness



Edge strength



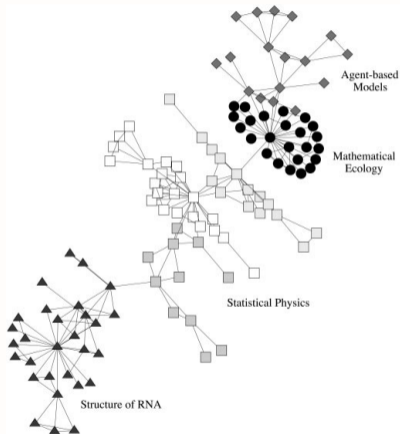
Edge betweenness

Método de Girvan-Newman

- ▶ **Método de Girvan-Newman** es conceptualmente muy simple
 - ⇒ encontrar y eliminar aristas entre subgrupos cohesivos
- ▶ **Algoritmo:** Repetir hasta que no queden aristas
 - ⇒ Calcular la centralidad betweenness $c_{Be}(e)$ para todas las aristas
 - ⇒ Eliminar arista(s) con $c_{Be}(e)$ más alta
 - ⇒ **Identificar como comunidades a las componentes conectadas**
- ▶ **Método divisivo:** comienza con la red completa y se va partiendo a medida que el algoritmo avanza
- ▶ **Partición anidada:** comunidades más grandes potencialmente incluyen grupos más densos
- ▶ M. Girvan and M. Newman, “Community structure in social and biological networks,” *PNAS*, vol. 99, pp. 7821-7826, 2002

Red de colaboración científica

- Red de coautorías de los científicos del Santa Fe Institute



- Las comunidades detectadas se identifican con diferentes disciplinas

Clustering Jerárquico

- Modificación iterativa de sucesivas particiones candidatas
 - **Divisivas**: refinamiento sucesivo de las particiones mediante la separación
 - **Aglomerativas**: aumento sucesivo de las particiones mediante la unión
- En cada paso, se modifican las particiones de forma de **minimizar un costo**
- Medidas de (dis)similaridad x_{ij} entre pares de vértices v_i y v_j :
 - distancia Euclídea (dis-similaridad) $x_{ij} = \sqrt{\sum_{k \neq i, j} (A_{ik} - A_{jk})^2}$
 - equivalencia regular o estructural
 - muchas más...
- Se obtiene una jerarquía completa de particiones anidadas del grafo
⇒ desde $\{\{v_1\}, \dots, \{v_{N_v}\}\}$ hasta V

Clustering aglomerativo

- ▶ Los **algoritmos de clustering jerárquico aglomerativo** funcionan así
 1. Elegir una métrica de (dis)similaridad y calcularla para todos los pares de vértices
 2. Asignar cada vértice a un grupo propio
 3. Unir el par de grupos con la menor (dis)similaridad
 4. Calcular la (dis)similaridad entre el nuevo grupo y todos los otros
 5. Repetir desde el paso 3 hasta que todos los vértices pertenezcan al mismo grupo
- ▶ Se necesita:
 - medida de (dis)similaridad de vértices (costo)
 - ordenar para elegir la menor (dis)similaridad
 - medida de (dis)similaridad entre conjuntos de vértices

Clustering aglomerativo

► Medidas de (dis)similaridad de grupos a partir de las medidas entre vértices

- **Single linkage:** (dis)similaridad de grupo x_{G_i, G_j}^{SL} alta si un par de vértices tiene (dis)similaridad alta

$$x_{G_i, G_j}^{SL} = \max_{u \in G_i, v \in G_j} x_{uv}$$

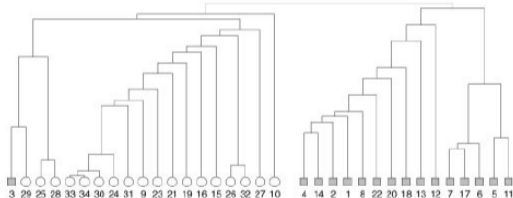
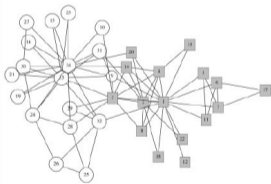
- **Complete linkage:** para tener (dis)similaridad x_{G_i, G_j}^{CL} alta, todos los pares de vértices tienen que tener (dis)similaridad alta

$$x_{G_i, G_j}^{CL} = \min_{u \in G_i, v \in G_j} x_{uv}$$

- **Otras medidas:** ponderar por tamaño de los grupos, (dis)similaridad entre centroides, etc.

Dendrograma

- ▶ Particiones jerárquicas usualmente se representan con **dendrogramas**
- ▶ Muestra grupos encontrados en la red a cada paso del algoritmo
 - ⇒ **División de la red con diferentes resoluciones**
- ▶ **Ejemplo:** Algoritmo de Girvan-Newman para el Zachary's karate club



- ▶ Otro problema: ¿Cuál es la división óptima (más útil) en algún sentido?
 - ⇒ es necesario definir métricas de la calidad del clustering

Modularidad

- Modularidad medida de *assortative mixing* - cohesividad de grupos
⇒ **Intuición:** densidad de aristas en las comunidades mayor que la esperada
- Sea G un grafo y una partición $s \in S$. **Modularidad:**

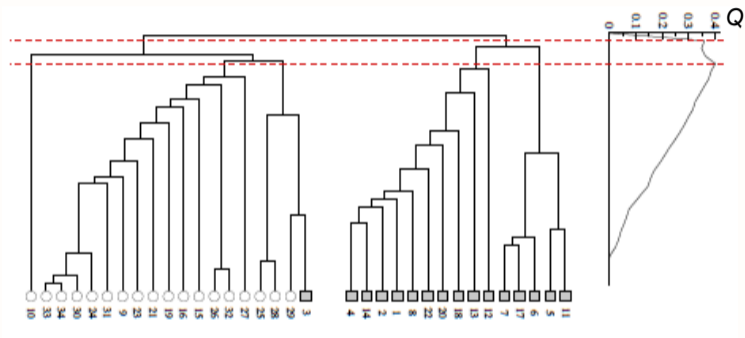
$$Q(G, S) = \frac{1}{2N_e} \sum_{s \in S} \sum_{i, j \in s} \left[A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2N_e} \right] \in [-1, 1]$$

⇒ $\delta_{g_i g_j} = 1$ si i, j están en la misma partición ($i, j \in S$)

- Podemos evaluar la modularidad de cada partición en un dendrograma
- **Máximo valor** indica la “mejor” estructura de comunidades

Calidad del clustering

- ▶ **Ejemplo:** algoritmo de Girvan-Newman's para el Zachary's karate club



- ▶ **Buena idea** ¿Porqué no directamente optimizar $Q(G, S)$ sobre todas las posibles particiones S ?

Máxima Modularidad

- ▶ Sea g_i el grupo al que pertenece el vértice i :

$$Q(G, S) = \frac{1}{2N_e} \sum_{i,j \in V} \left[A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2N_e} \right] \mathbf{1}_{\{g_i = g_j\}}$$

- ▶ Definir por comodidad los sumandos $B_{ij} := A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2N_e}$
⇒ observar que las sumas marginales de B_{ij} se anulan,

$$\sum_j B_{ij} = \sum_j A_{ij} - \frac{d_i}{2N_e} \sum_j d_j = d_i - \frac{d_i}{2N_e} 2N_e = 0$$

Partición del grafo

- ▶ Consideremos (por simplicidad) dividir la red en dos grupos
- ▶ Se definen **variables binarias de pertenencia a las comunidades** por vértice

$$s_i = \begin{cases} +1, & \text{vértice } i \text{ pertenece al grupo 1} \\ -1, & \text{vértice } i \text{ pertenece al grupo 2} \end{cases}$$

- ▶ Usando la igualdad $\frac{1}{2}(s_i s_j + 1) = \mathbf{1}_{\{g_i=g_j\}}$, la modularidad es

$$\begin{aligned} Q(G, S) &= \frac{1}{2N_e} \sum_{i,j \in V} \left[A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2N_e} \right] \mathbf{1}_{\{g_i=g_j\}} \\ &= \frac{1}{4N_e} \sum_{i,j \in V} B_{ij} (s_i s_j + 1) \end{aligned}$$

- ▶ Usando que $\sum_j B_{ij} = 0$ se obtiene una expresión más sencilla

$$Q(G, S) = \frac{1}{4N_e} \sum_{i,j \in V} B_{ij} s_i s_j$$

Optimización de la modularidad

- ▶ Sea $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_v \times N_v}$ la **matriz de modularidad** con entradas $B_{ij} := A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2N_e}$
⇒ Las particiones S quedan definidas por el vector $\mathbf{s} = [s_1, \dots, s_{N_v}]^T$

- ▶ Modularidad es una forma cuadrática

$$Q(G, S) = \frac{1}{4N_e} \sum_{i,j \in V} B_{ij} s_i s_j = \frac{1}{4N_e} \mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s}$$

- ▶ Modularidad como criterio para la bisección de un grafo se traduce en:

$$\hat{\mathbf{s}} = \arg \max_{\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}} \mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s}$$

⇒ restricciones binarias! $\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}$ (vértices de un hipercubo)

- ▶ **Mala idea:** optimización de la modularidad es NP-hard [Brandes et al '06]

Just relax!

- ▶ Relajar las restricciones $\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}$ to $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^{N_v}$, $\|\mathbf{s}\|_2^2 = N_v$

$$\hat{\mathbf{s}} = \arg \max_{\mathbf{s}} \mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s}, \quad \text{restringido a } \mathbf{s}^T \mathbf{s} = N_v$$

- ▶ Sea λ el **multiplicador de Lagrange** asociado a la restricción $\mathbf{s}^T \mathbf{s} = N_v$
⇒ Condiciones de optimalidad resultan en:

$$\nabla_{\mathbf{s}} \left[\mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s} + \lambda(N_v - \mathbf{s}^T \mathbf{s}) \right] = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{B} \mathbf{s} = \lambda \mathbf{s}$$

- ▶ Conclusión: \mathbf{s} es un **vector propio de \mathbf{B} con valor propio λ**
- ▶ Nuevamente ¿qué vector propio elegir?
⇒ en el óptimo la función objetivo vale $\mathbf{B} \mathbf{s} = \lambda \mathbf{s}$ entonces

$$\mathbf{s}^T \mathbf{B} \mathbf{s} = \lambda \mathbf{s}^T \mathbf{s} = \lambda$$

- ▶ Para maximizar la modularidad, elegir el **vector propio dominante de \mathbf{B}**

Maximización espectral de la modularidad

- ▶ Sea \mathbf{u}_1 el vector propio dominante de \mathbf{B} , con entrada i -ésima $[\mathbf{u}_1]_i$
 - ⇒ No se puede elegir $\mathbf{s} = \mathbf{u}_1$ porque $\mathbf{u}_1 \neq \{\pm 1\}^{N_v}$
 - ⇒ **Best effort**: maximizar $\mathbf{s}^\top \mathbf{u}_1$ resulta en

$$s_i = \text{sign}([\mathbf{u}_1]_i) := \begin{cases} +1, & [\mathbf{u}_1]_i > 0 \\ -1, & [\mathbf{u}_1]_i \leq 0 \end{cases}$$

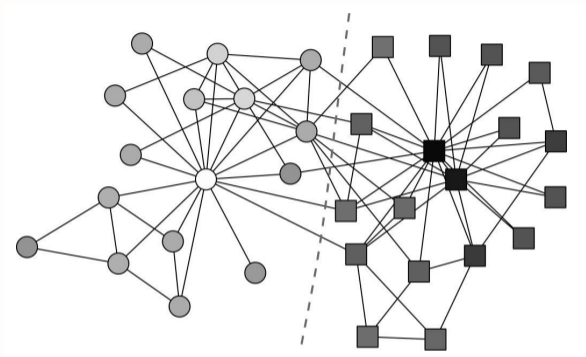
- ▶ Maximización espectral de la modularidad

s1: Calcular la matriz de modularidad \mathbf{B} con entradas $B_{ij} = A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2N_e}$

s2: Hallar el vector propio dominante \mathbf{u}_1 de \mathbf{B} (e.g., método de las potencias)

s3: Decidir la pertenencia al cluster del vértice i como $s_i = \text{sign}([\mathbf{u}_1]_i)$

Ejemplo: Zachary's karate club

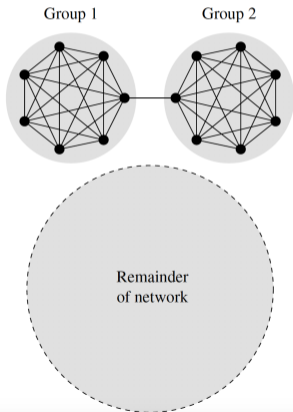


► Maximización espectral de la modularidad

- forma de los vértices indica pertenencia a la comunidad
- línea punteada indica la partición encontrada por el algoritmo
- colores de los vértices indican la fuerza de la pertenencia

Resolución límite de la modularidad máxima

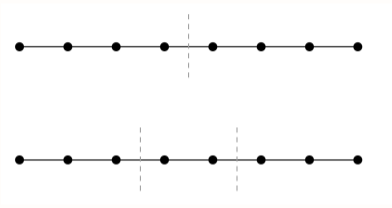
- ▶ El método de modularidad máxima tiene problema de **resolución límite**
- ▶ Incapaz de detectar comunidades muy chicas respecto al tamaño de la red



- $\Delta Q = \frac{1}{2m} \left(1 - \frac{k_1 k_2}{2m} \right)$ cambio al juntar grupos
 - Si $\Delta Q > 0$ conviene juntarlos
 - Comunidades con $k_1 k_2 < 2m$ no se detectan
 - Ejemplo: si $m = 5000$ y $k_1, k_2 < 100$
- ▶ Las mismas comunidades pueden no ser detectadas si se aumenta la red

Múltiples comunidades

- ▶ Primer idea: bisecciones sucesivas (cuidado! los cambios afectan a la modularidad de toda la red)



⇒ arriba la mejor bisección

⇒ abajo la partición óptima sin imponer cantidad de comunidades

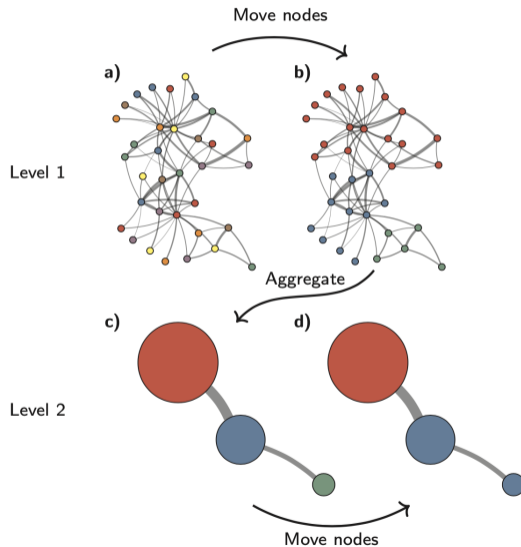
- ▶ Maximizar directamente sobre un número desconocido de grupos: problema de optimización
- ▶ Adaptar la maximización espectral, Zhang & Newman '15

Múltiples comunidades

- **Algoritmo de Louvain.** Blondel et. al.'08 (20.219 citas al 22/08/23)¹
- Método aglomerativo:
 1. Definir N_v grupos individuales.
 2. Calcular ΔQ al mover i al grupo de cada uno de sus vecinos
 3. Mover i al grupo que tenga el mayor incremento la modularidad.
 4. Los grupos resultantes se toman como nuevas unidades (self-loops y aristas con pesos) y se repite el paso 2.
 6. Terminar si ningún movimiento aumenta la modularidad
- Ventaja de ser muy rápido e implementado en muchos paquetes (networkx)
- También se puede usar con otras funciones de calidad de la partición: CPM
Constant Potts Model (no tiene el problema de la resolución límite)

¹“Fast unfolding of communities in large networks” Vincent D Blondel et al J. Stat. Mech. (2008)

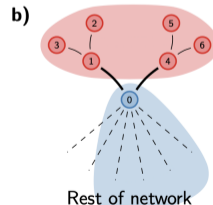
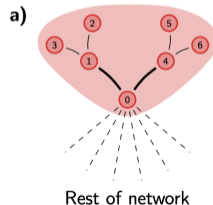
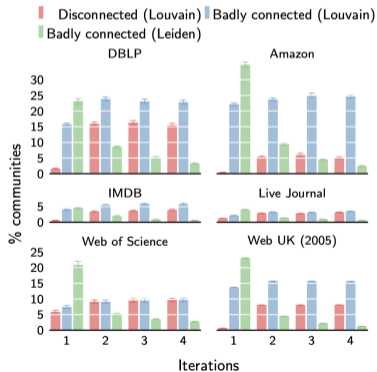
Algoritmo de Louvain



De Louvain a Leiden

- From Louvain to Leiden: guaranteeing well-connected communities. V.A Traag et al. Scientific Reports. Nature (2019)

⇒ Louvain puede dar como resultado comunidades pobremente conectadas e incluso desconectadas

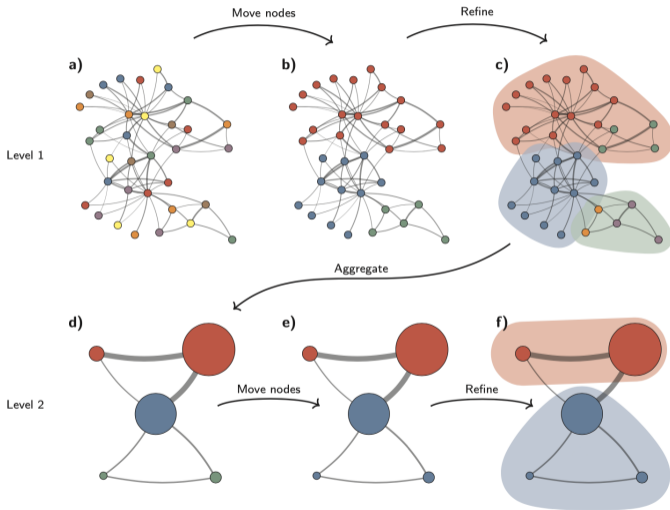


Algoritmo de Leiden

- ...that is faster, finds better partitions and provides explicit guarantees and bounds.
- El nuevo algoritmo integra mejoras previas, combinando **movimientos locales astutos**, y **rápidos**, más **movimientos de vecinos aleatorios**
- Produce particiones donde las comunidades están internamente conectadas
- Converge a a una partición asintóticamente estable: todo subconjunto de todas las comunidades están asignados localmente de forma óptima
 - ⇒ es una cota superior de la calidad de una partición óptima
- Considerablemente más complejo que Louvain

Algoritmo de Leiden

4



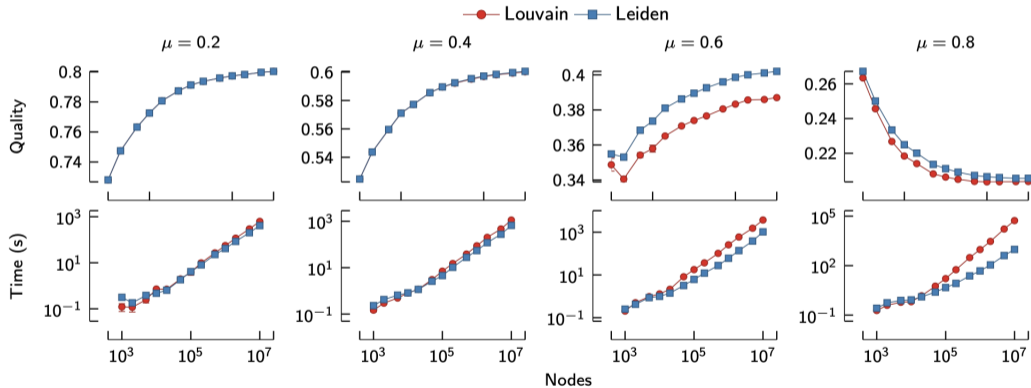
Algoritmo de Leiden

1. El algoritmo de Leiden parte de una partición individual (a).
2. Mueve nodos individuales de una comunidad a otra para encontrar una partición (b), que luego se refina (c).
 - ⇒ la comunidad roja en (b) se refina en dos subcomunidades en (c),
3. Se crea una red agregada (d) basada en la partición refinada, utilizando la partición no refinada para crear una partición inicial para la red agregada:
 - ⇒ tras la agregación las dos sub-comunidades refinadas se convierten en dos nodos separados en(d), ambos pertenecientes a la misma comunidad.
4. Luego, el algoritmo mueve nodos individuales en la red agregada (e).
 - ⇒ en este caso, el refinamiento no cambia la partición (f).
5. Estos pasos se repiten hasta que no se pueden realizar más mejoras.

Diferencias entre Louvain y Leiden

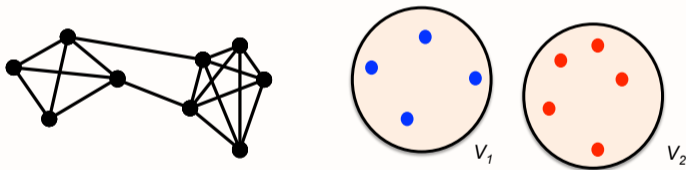
- ▶ Leiden visita solo los nodos a los cuáles les cambió el vecindario (**astuto**)
- ▶ Cola aleatoria de nodos a mover, se mueve el primero y todos los vecinos que no pertenecen a la nueva comunidad pasan para el final (**rápido**)
- ▶ Durante el refinamiento los nodos se mueven se unen a cualquier comunidad que aumente la modularidad o CPM (al azar con probabilidad proporcional al aumento) y no a la que maximice (**aleatorio**)
 - ⇒ permite refinar después de agregar, lo que permite que se desarmen y armen nuevas comunidades

Algoritmo de Leiden



Bisección de grafos

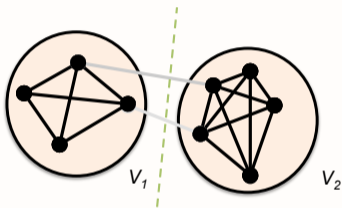
- ▶ Sea $G(V, E)$ un grafo no dirigido
- ▶ **Bisección del grafo** dividir V en dos grupos tales que:
 - Grupos V_1 y $V_2 = V_1^C$ son disjuntos
 - Grupos tienen tamaño dado, i.e., $|V_1| = N_1$ y $|V_2| = N_2$



- ▶ ¿Cuál es un buen criterio para partir el grafo?
⇒ Vimos la modularidad, veamos otro(s)

Corte de grafos

- **Desiderata:** elementos de cada grupo cumplan con
 - ⇒ estar bien conectados entre ellos; y
 - ⇒ estar relativamente bien separados del otro grupo



Definición

Un **corte** C del grafo en grupos V_1 y V_2 es el número de aristas entre los grupos

$$C := \text{cut}(V_1, V_2) = \sum_{i \in V_1, j \in V_2} A_{ij}$$

De corte de grafos...

- ▶ **Criterio natural de bisección:** minimizar corte entre V_1 y $V \setminus V_1$
- ▶ Se definen variables binarias de pertenencia por vértice a los grupos

$$s_i = \begin{cases} +1, & \text{vértice } i \text{ pertenece al grupo 1} \\ -1, & \text{vértice } i \text{ pertenece al grupo 2} \end{cases}$$

- ▶ Sea g_i el grupo al que pertenece el vértice i , se cumple que

$$\mathbb{I}\{g_i \neq g_j\} = \frac{1}{2}(1 - s_i s_j) = \begin{cases} 1, & i \text{ y } j \text{ en grupos diferentes} \\ 0, & i \text{ y } j \text{ en el mismo grupo} \end{cases}$$

- ▶ Se puede expresar los *cortes* en términos de las variables s_i :

$$C = \sum_{i \in V_1, j \in V_2} A_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i, j \in V} A_{ij} (1 - s_i s_j)$$

... al Laplaciano del grafo

- ▶ Primer sumando en $C = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij}(1 - s_i s_j)$ es

$$\sum_{i,j \in V} A_{ij} = \sum_{i \in V} d_i = \sum_{i \in V} d_i s_i^2 = \sum_{i,j \in V} d_i s_i s_j \mathbb{I}\{i = j\} \quad \text{usamos } s_i^2 = 1$$

- ▶ El corte resulta

$$C = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in V} (d_i \mathbb{I}\{i = j\} - A_{ij}) s_i s_j = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in V} L_{ij} s_i s_j$$

- ▶ Corte en términos de las entradas L_{ij} del **Laplaciano del grafo** $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$, i.e.,

$$C(\mathbf{s}) = \frac{1}{2} \mathbf{s}^\top \mathbf{L} \mathbf{s}, \quad \mathbf{s} := [s_1, \dots, s_{N_V}]^\top$$

- ▶ Maximizar modularidad $Q(\mathbf{s}) \propto \mathbf{s}^\top \mathbf{B} \mathbf{s}$ vs. Minimizar cortes $C(\mathbf{s}) \propto \mathbf{s}^\top \mathbf{L} \mathbf{s}$

Minimizar cortes del grafo

- ▶ Dado que si $|V_1| = N_1$ entonces $|V_2| = N_2 = N - N_1$, tenemos la restricción

$$\sum_{i \in V} s_i = \sum_{i \in V_1} (+1) + \sum_{i \in V_2} (-1) = N_1 - N_2 \Rightarrow \mathbf{1}^T \mathbf{s} = N_1 - N_2$$

- ▶ **Criterio de minimizar cortes** para la bisección de grafos se traduce en

$$\hat{\mathbf{s}} = \arg \min_{\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}} \mathbf{s}^T \mathbf{L} \mathbf{s}, \quad \text{sujeto a } \mathbf{1}^T \mathbf{s} = N_1 - N_2$$

- ▶ Nuevamente, restricciones binarias $\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}$ hacen que la minimización de cortes sea compleja

⇒ **Relajar restricciones binarias** como en maximización de la modularidad

Función de costo equivalente

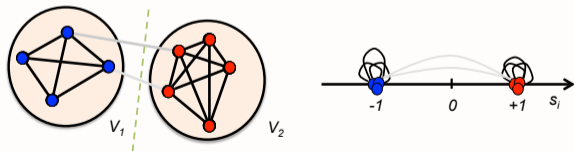
- Vimos que $\mathbf{s}^\top \mathbf{L} \mathbf{s} = \sum_{(i,j) \in E} (s_i - s_j)^2$, de donde la formulación resulta:

$$\hat{\mathbf{s}} = \arg \min_{\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}} \sum_{(i,j) \in E} (s_i - s_j)^2, \quad \text{sujeto a } \mathbf{1}^\top \mathbf{s} = N_1 - N_2$$

- ¿Cómo se interpreta esta función de costo equivalente?

⇒ Aristas que unen vértices en el mismo grupo no aportan a la suma

⇒ Aristas que unen vértices en grupos diferentes aportan 4 a la suma



► **Minimizar cortes:** asignar valores s_i a vértices i tal que pocas aristas crucen el 0

Relajar restricciones binarias

- ▶ Relajar las restricciones $\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}$ a $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^{N_v}$, $\|\mathbf{s}\|_2 = 1$

$$\hat{\mathbf{s}} = \arg \min_{\mathbf{s}} \mathbf{s}^T \mathbf{L} \mathbf{s}, \quad \text{sujeto a } \mathbf{1}^T \mathbf{s} = N_1 - N_2 \text{ y } \mathbf{s}^T \mathbf{s} = 1$$

⇒ se resuelve directo usando multiplicadores de Lagrange

- ▶ Caracterización de la **solución $\hat{\mathbf{s}}$** [Fiedler '73]:

$$\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{v}_2 + \frac{N_1 - N_2}{N_v} \mathbf{1}$$

⇒ El **segundo vector propio más chico \mathbf{v}_2** de \mathbf{L} verifica que $\mathbf{1}^T \mathbf{v}_2 = 0$

⇒ Mínimo corte resulta $C(\hat{\mathbf{s}}) = \hat{\mathbf{s}}^T \mathbf{L} \hat{\mathbf{s}} = \mathbf{v}_2^T \mathbf{L} \mathbf{v}_2 \propto \lambda_2$

- ▶ Si G está desconectado sabemos que $\lambda_2 = 0 = C(\hat{\mathbf{s}})$

⇒ **Si G es susceptible de bisección, el corte es pequeño y también lo es λ_2**

Bisección espectral de grafos

- ▶ ¿Cómo obtener las etiquetas binarias de la partición $\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^{N_v}$ a partir de $\hat{\mathbf{s}} \in \mathbb{R}^{N_v}$?

⇒ nuevamente, maximizar la medida de similitud $\mathbf{s}^\top \hat{\mathbf{s}}$

$$s_i = f(\mathbf{v}_2) := \begin{cases} +1, & [\mathbf{v}_2]_i \text{ entre las } N_1 \text{ coordenadas más grandes de } \mathbf{v}_2 \\ -1, & \text{otro caso} \end{cases}$$

- ▶ Algoritmo espectral de bisección de grafos

s1: Calcular el laplaciano \mathbf{L} con entradas $L_{ij} = D_{ij} - A_{ij}$

s2: Hallar el vector propio asociado al segundo valor propio más chico \mathbf{v}_2 de \mathbf{L}

s3: Proponer pertenencia del vértice i como $\bar{s}_i = f(\mathbf{v}_2)$ (o $\underline{s}_i = f(-\mathbf{v}_2)$)

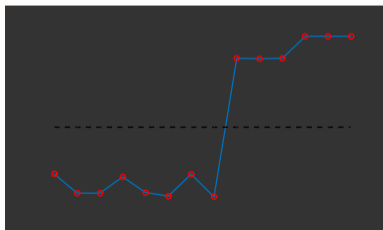
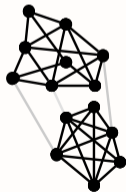
s4: Elegir entre $\bar{\mathbf{s}}$ y $\underline{\mathbf{s}}$ el que minimiza $C(\mathbf{s})$

Spectral gap en las entradas del vector de Fiedler

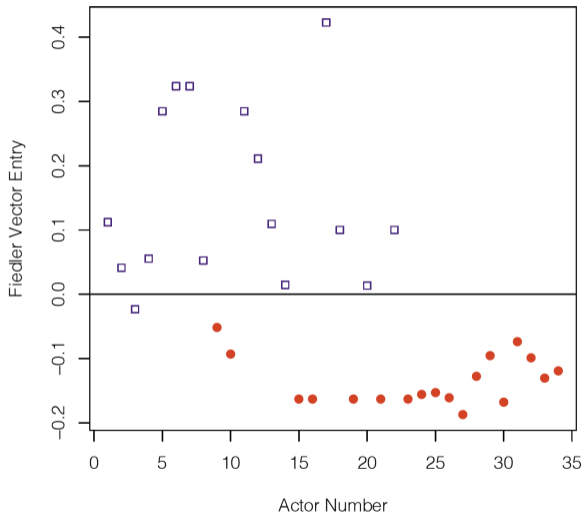
- ▶ Sea G no conectado con dos componentes conexas
 - L es diagonal con bloques, dos vectores propios más chicos indican grupos, i.e.,

$$\mathbf{v}_1 = [1, 1, \dots, 1, 0, \dots, 0]^T \text{ and } \mathbf{v}_2 = [0, 0, \dots, 0, 1, \dots, 1]^T$$

- ▶ Si G is conectado pero pasible de bisección $\mathbf{v}_1 = \mathbf{1}$ y $\lambda_2 \approx 0$
 - Además, $\mathbf{1}^T \mathbf{v}_2 = \sum_i [\mathbf{v}_2]_i = 0 \Rightarrow$ entradas positivas y negativas en \mathbf{v}_2

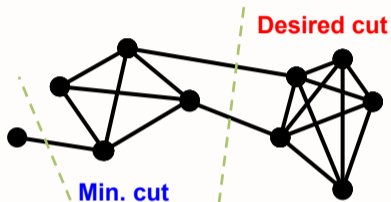


Vector de Fiedler para el Zachary Karate Club



Tamaño de comunidades desconocido

- Problema: bisección del grafo con **tamaño de los grupos desconocidos**
- Minimizar el corte del grafo puede no tener más sentido!



⇒ Costo $C := \sum_{i \in V_1, j \in V_2} A_{ij}$ indiferente a la estructura interna de los grupos

- Un mejor criterio es el **corte ponderado** R definido como

$$R := \frac{C}{|V_1|} + \frac{C}{|V_2|}$$

Minimización de corte ponderado

- ▶ Fijar una partición S de G en los grupos V_1 y V_2
- ▶ Definir $\mathbf{f} : \mathbf{f}(S) = [f_1, \dots, f_{N_v}]^T \in \mathbb{R}^{N_v}$ con entradas

$$f_i = \begin{cases} \sqrt{\frac{|V_2|}{|V_1|}}, & \text{si vértice } i \text{ pertenece a } V_1 \\ -\sqrt{\frac{|V_1|}{|V_2|}}, & \text{si vértice } i \text{ pertenece a } V_2 \end{cases}$$

- ▶ Se pueden probar las siguientes propiedades:
 1. $\sum_i f_i = 0$, i.e., $\mathbf{1}^T \mathbf{f} = 0$
 2. $\|\mathbf{f}\|^2 = N_v$
 3. $\mathbf{f}^T \mathbf{L} \mathbf{f} = C \left(\frac{N_2}{N_1} + \frac{N_1}{N_2} + 2 \right) = N_v R(S)$
- ▶ De 1-3 se deduce que la **minimización de corte ponderado** es equivalente a

$$\min_{\mathbf{f}} \mathbf{f}^T \mathbf{L} \mathbf{f}, \quad \text{sujeto a} \quad \mathbf{1}^T \mathbf{f} = 0 \text{ y } \mathbf{f}^T \mathbf{f} = N_v$$

Bisección espectral y por corte ponderado

- ▶ Minimización por corte ponderado es también NP. Relajación:

$$\hat{\mathbf{s}} = \arg \min_{\mathbf{s} \in \mathbb{R}^{N_v}} \mathbf{s}^\top \mathbf{L} \mathbf{s}, \quad \text{sujeto a } \mathbf{1}^\top \mathbf{s} = 0 \text{ y } \mathbf{s}^\top \mathbf{s} = N_v$$

- ▶ Se obtiene la misma partición \hat{S} con el algoritmo de **bisección espectral**

s1: Calcular el Laplaciano \mathbf{L} con entradas $L_{ij} = D_{ij} - A_{ij}$

s2: Hallar el segundo vector propio más chico \mathbf{v}_2 de \mathbf{L}

s3: Asignar pertenencia al grupo del vértice i como $s_i = \text{sign}([\mathbf{v}_2]_i)$

- ▶ Criterio alternativo es el **corte normalizado** NC definido como

$$NC = \frac{C}{\text{vol}(V_1)} + \frac{C}{\text{vol}(V_2)}, \quad \text{vol}(V_i) := \sum_{v \in V_i} d_v, \quad i = 1, 2$$

⇒ corresponde a usar el **Laplaciano normalizado** $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{L}$

Múltiples comunidades

- ▶ Se define el **corte ponderado** de una partición U en K grupos $\{\mathcal{V}_i\}_{i=1}^K$ como

$$R(U) := \sum_{i=1}^K \frac{C(\mathcal{V}_i, \mathcal{V}_i^c)}{|\mathcal{V}_i|}$$

- ▶ Problema de la minimización de la relajación del corte ponderado resulta:

$$\hat{\mathbf{U}} = \arg \min_{\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N_v \times K}} \text{trace}(\mathbf{U}^T \mathbf{L} \mathbf{U}), \quad \text{s. to } \mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$$

- ▶ Partición \hat{U} dada por el **algoritmo de clustering espectral**

s1: Calcular el Laplaciano \mathbf{L} con entradas $L_{ij} = D_{ij} - A_{ij}$

s2: Hallar los K **vectores propios más pequeños** $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_K$ of \mathbf{L}

s3: Definir $\hat{\mathbf{U}} = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_K]$, *embedding* del vértice i como la fila $\hat{\mathbf{u}}_i^T \in \mathbb{R}^{1 \times K}$

S4: Asignar vértices a comunidades vía **K -means en los embeddings**

Clustering espectral

- ▶ ¿Porqué funciona la partición espectral de grafos?
- ▶ Observar que:

$$\text{traza}(\hat{\mathbf{U}}^T \mathbf{L} \hat{\mathbf{U}}) = \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} A_{ij} \|\hat{\mathbf{u}}_i^T - \hat{\mathbf{u}}_j^T\|^2$$

- ⇒ Embeddings están cerca en \mathbb{R}^K si i, j están bien conectados en G
- ⇒ Se conocen como Laplacian eigenmaps [Belkin-Niyogi'01]

- ▶ **Para recordar:** codificar al estructura del grado en embeddings de baja dimensión



Otros algoritmos...

- ▶ Hay muchos otros algoritmos, con enfoques similares o muy distintos
 - Metodo de Radicchi propone otra definición de betweenness
 - Métodos basados en teoría de la información: InfoMap
 - Métodos basados en inferencia estadística (necesita modelo de grafo)
 - Métodos clásicos aplicados a vectores de características (u otros vectores asociados)
 - Clustering jerárquico: basta variar medida de (dis)similaridad entre vértices y entre grupo de vértices para obtener un nuevo método
- ▶ No hablamos ni de complejidad ni de garantías teóricas...
- ▶ Detección de otro tipo de estructuras: comunidades con solapamiento, estructuras *core-periphery*
- ▶ Mark Newman: Networks (2018)

Medidas de desempeño

- ▶ ¿Cuál es el **mejor algoritmo de detección de comunidades**?
 - ⇒ depende: buen desempeño, rigor matemático, velocidad de procesamiento, escalabilidad...
- ▶ ¿Cómo evaluar el **buen desempeño**?
 1. testear en **redes reales** donde se conoce la estructura de comunidades
 2. testear en redes sintéticas
- ▶ Testeo en **redes reales**: probar muchos métodos y si la mayoría coincide tomarlo como *ground-truth*
- ▶ Ejemplos que vimos antes:
 - ⇒ karate club! (sociedad “Karate Club Club”)
 - ⇒ Blogs políticos
 - ⇒ Equipos deportivos
 - ⇒ Red social de delfines (Lusseau’03): similar a ZKC

Medidas de desempeño

- ▶ Testeo en **redes sintéticas**: modelos de grafos aleatorios con estructura de comunidades predeterminada (*coming soon!*)
- ▶ ¿Cómo medir desempeño cuando la detección no es perfecta?
- ▶ **Fracción de vértices bien clasificados**:
 - ⇒ máximo valor sobre las permutaciones de etiquetas (mínimo por azar)
 - ⇒ pueden detectarse diferente cantidad de comunidades
- ▶ **Rand Index**: *fracción de vértices en la misma (o distinta) comunidad en la red test que son asignados a la misma (o distinta) comunidad por el algoritmo*

$$R = 2 \frac{(s + d)}{N_v(N_v - 1)} \quad s = \sum_{i < j} \delta_{g_i g_j} \delta_{t_i t_j} \quad y \quad d = \sum_{i < j} (1 - \delta_{g_i g_j})(1 - \delta_{t_i t_j})$$

⇒ $0 \leq R \leq 1$ e independencia de las etiquetas

▶ Información mutua normalizada