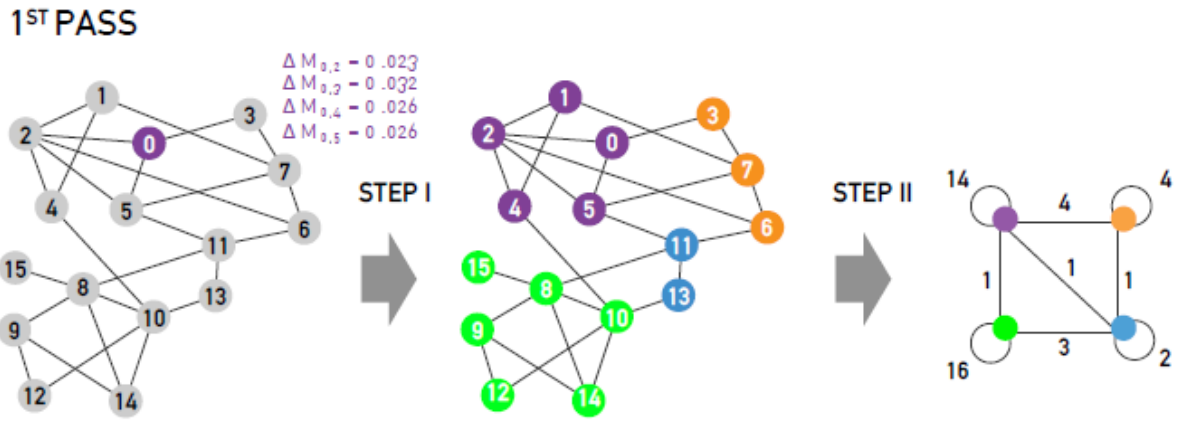
Detección de Comunidades II

- Louvain, Infomap
- Cfinder, Link CLustering
- Testing / Verifying communities
- MsigDB - GO – HyoperG
- GO-dist

Algoritmo Louvain

Algoritmo de reconocimiento de comunidades para redes pesadas, de complejidad computacional o(L).

Modularidad **M** optimizada en pasadas de dos pasos



Paso 1

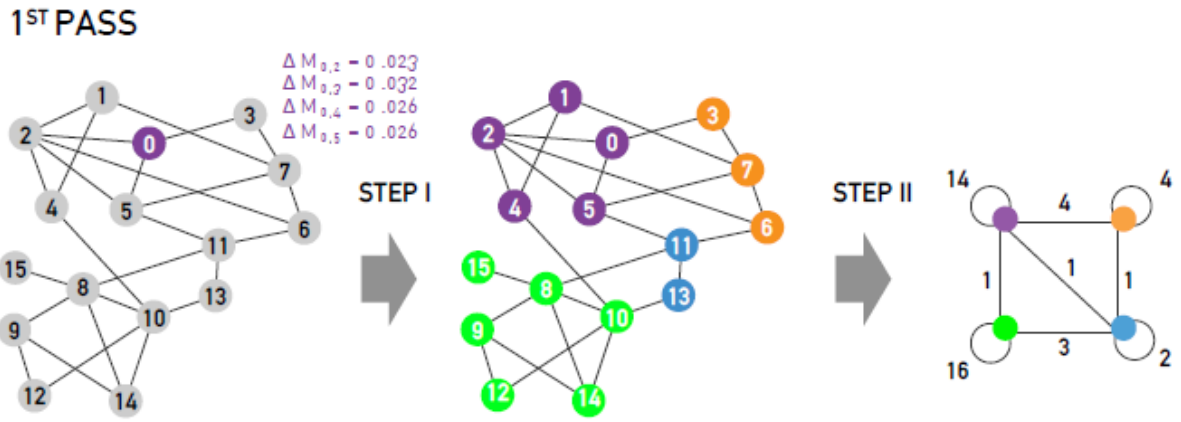
Se optimiza M con cambios locales, tratando de unir un nodo con sus vecinos. Se elige el cambio de mayor ΔM (si el cambio es positivo) Se repite esto para cada nodo de la red

Blondel, J.Stat.Mech 2008

Algoritmo Louvain

Algoritmo de reconocimiento de comunidades para redes pesadas, de complejidad computacional o(L).

Modularidad **M** optimizada en pasadas de dos pasos



Paso 1

Se optimiza M con cambios locales, tratando de unir un nodo con sus vecinos. Se elige el cambio de mayor ΔM (si el cambio es positivo) Se repite esto para cada nodo de la red

Paso 2

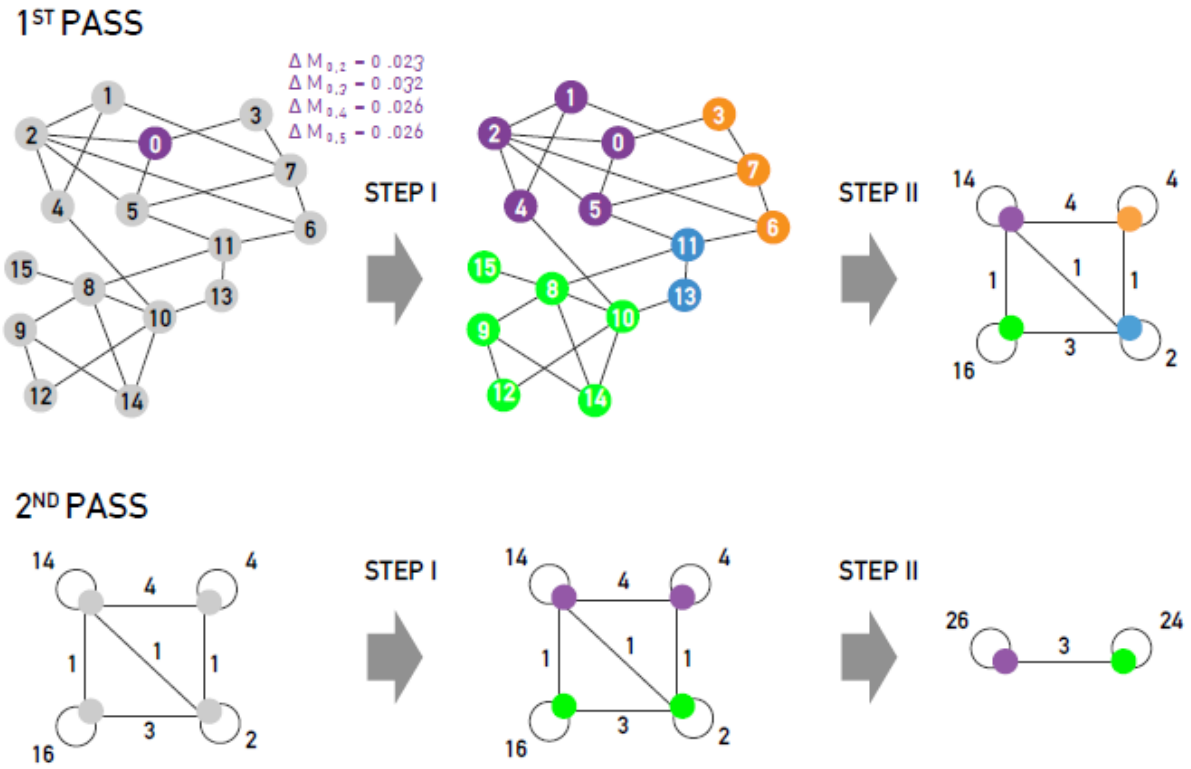
Se arma una nueva red donde cada nodo es una comunidad encontrada en el Paso 1. Se generan auto-enlaces que corresponden a lazos intra-comunidad.

Blondel, J.Stat.Mech 2008

Algoritmo Louvain

Algoritmo de reconocimiento de comunidades para redes pesadas, de complejidad computacional o(L).

Modularidad **M** optimizada en pasadas de dos pasos



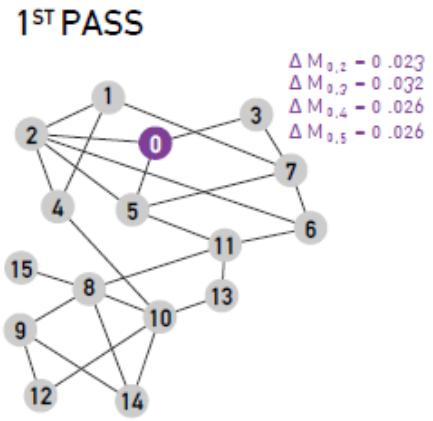
Se repite hasta no poder obtener incremento de modularidad

Blondel, J.Stat.Mech 2008

Algoritmo Louvain

Algoritmo de reconocimiento de comunidades para redes pesadas, de complejidad computacional o(L).

Modularidad **M** optimizada en pasadas de dos pasos



$$M = \sum_r \left(\frac{L_r}{L} - \left(\frac{k_r}{2L} \right)^2 \right)$$

La variación de modularidad al mover un nodo aislado *i* dentro de la comunidad C se puede computar **eficientemente** de manera local

Cambio de M:
nodo-i anexado a comunidad C

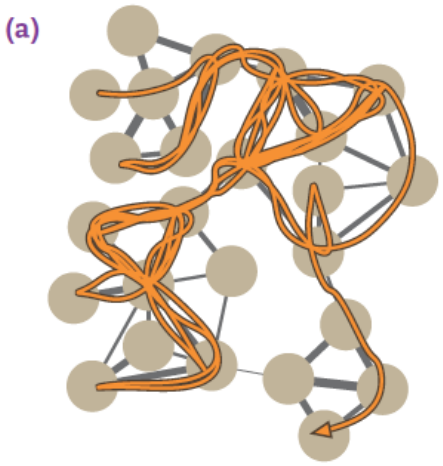
suma de pesos de nodo-i a nodos del cluster

suma de pesos enlaces C

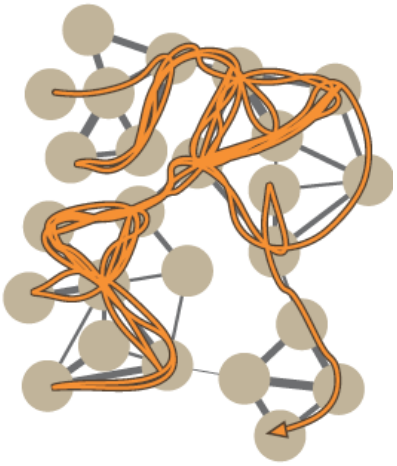
$$\Delta M = \left[\frac{\Sigma_{in} + 2k_{i,in}}{2W} - \left(\frac{\Sigma_{tot} + k_i}{2W} \right)^2 \right] - \left[\frac{\Sigma_{in}}{2W} - \left(\frac{\Sigma_{tot}}{2W} \right)^2 - \left(\frac{k_i}{2W} \right)^2 \right]$$

suma de pesos enlaces intra-C

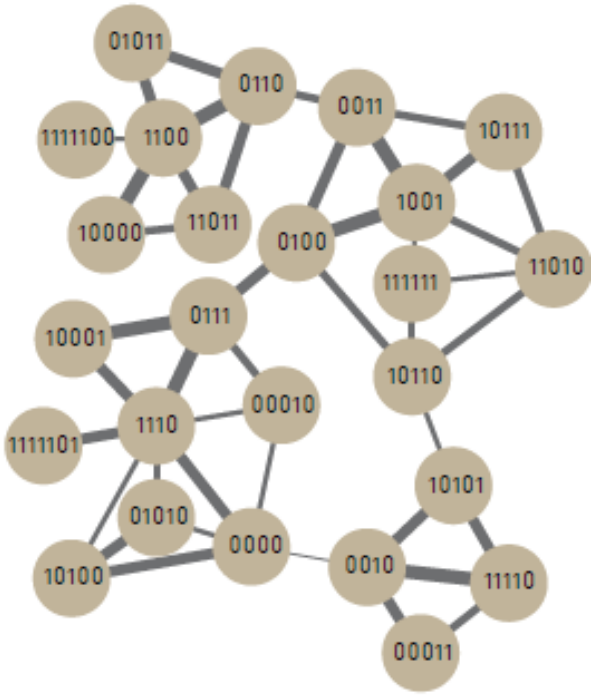
Infomap



Se trata de describir de la manera **más eficiente** posible la trayectoria de un caminante aleatorio sobre la red

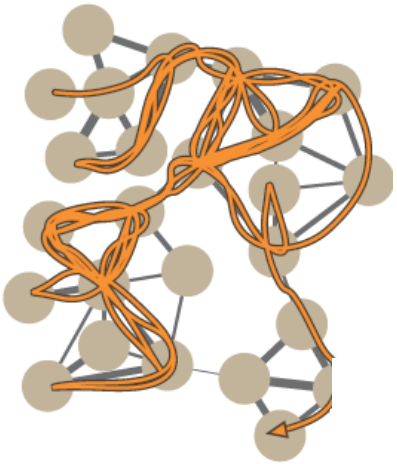


Infomap

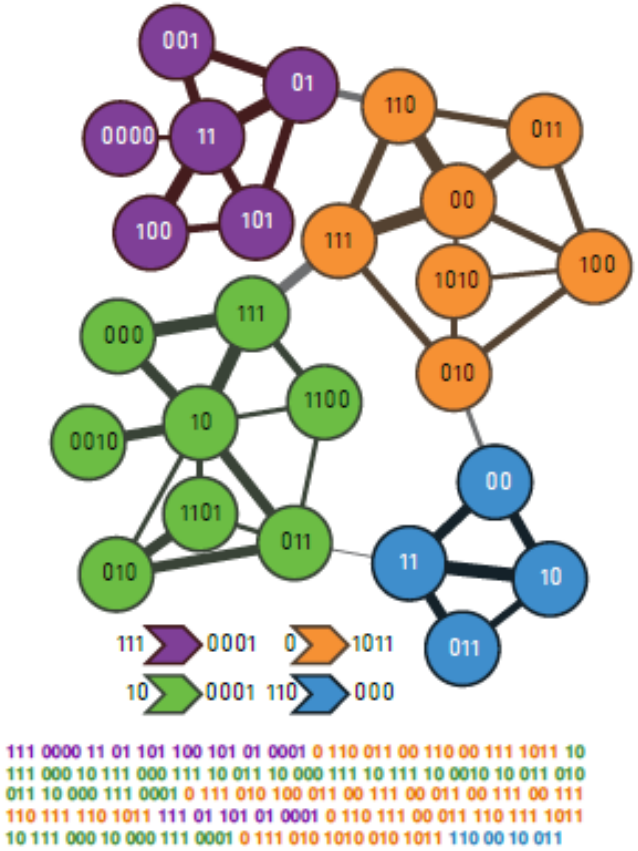


1111100 1100 0110 11011 10000 11011 0110 0011 10111 1001 0011 1001 0100 0111 10001 1110 0111 10001 0111 1110 0000 1110 10001 0111 1110 0111 1110 1111101 1110 0000 10100 0000 1110 10001 0111 0100 10110 11010 10111 1001 0100 1001 10111 1001 0100 1001 0100 0011 0100 0011 0110 11011 0110 0011 0100 1001 10111 0011 0100 0111 10001 1110 10001 0111 0100 10110 111111 10110 10101 11110 00011

- Para poder describir la trayectoria, necesito etiquetar a cada nodo.
- Código de **compresión de Huffman** asigna nombres usando la probabilidad de visita de un caminante aleatorio a cada nodo-i $(\sim \sum_j A_{ij})$.
- En el ejemplo esto resulta en una descripción de 314 bits para la caminata de 70 pasos que comienza en el 1111100 y finaliza en el 00011

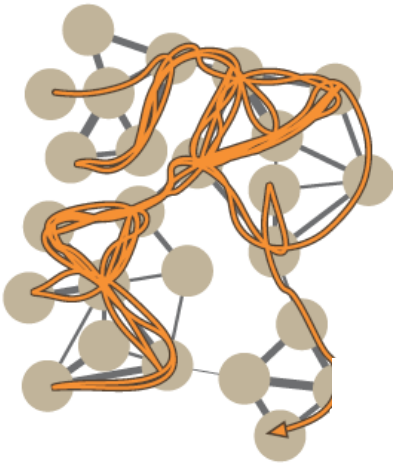


Infomap

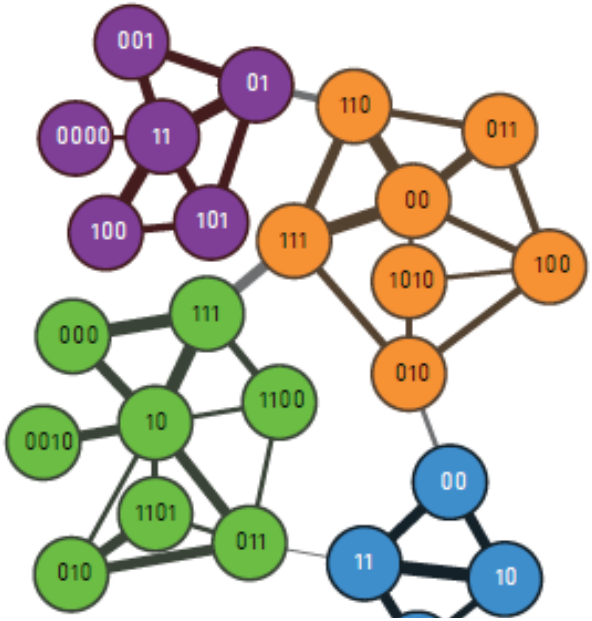


- Infomap propone un etiquetado de 2 niveles:
  - **Index code-book**: códigos asignado a entrada y salida de una comunidad
  - **Module code-book**: codigo interno de cada nodo dentro de su comunidad.
- Con esta estrategia se pueden reusar nombres (en particular nombres cortos) y se suelen alcanzar descripciones más cortas que usando Huffman
- La descripción de la misma caminata ahora usa 243bits (< 314bits)

Encontrar una **descripción óptima** (en particular el **index code-book**) en este esquema de compresión es encontrar **buenos clusters** (!)



Infomap



La **descripción óptima** en terminos de longitud de descripción (i.e. **buenos clusters**) se logra minimizando la Map equation:

$$\mathcal{L} = qH(Q) + \sum_{c=1}^{n_c} p_{\circlearrowright}^{c} H(P_c)$$

Bits necesarios en promedio para describir movimientos **entre** comunidades

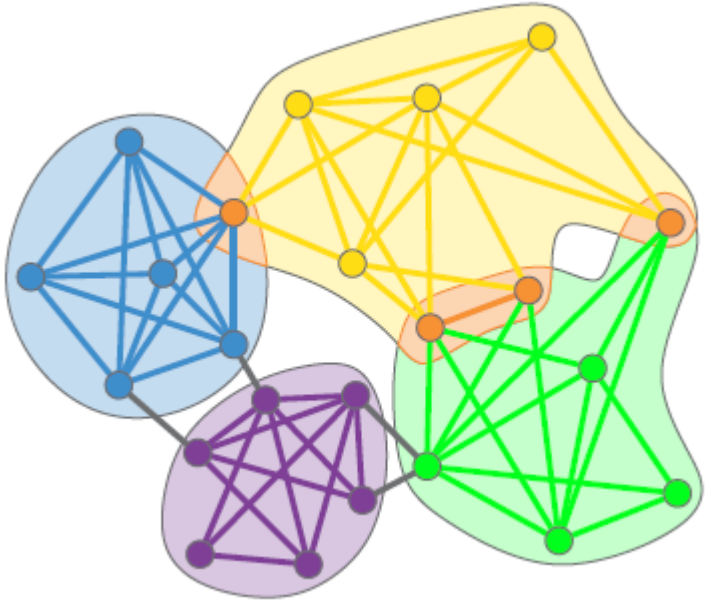
Bits necesarios en promedio para describir movimientos **dentro** de comunidades

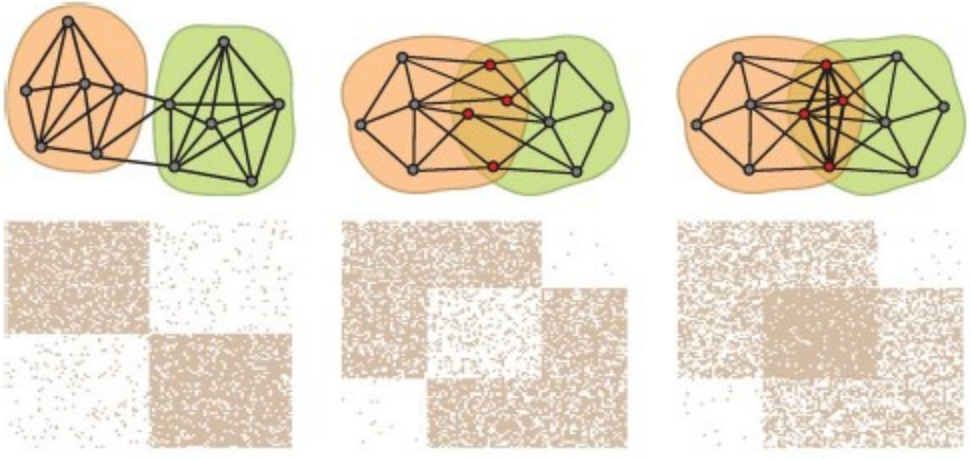
111 0000 11 01 101 100 101 01 0001 0 110 011 00 110 00 111 1011 10
111 000 10 111 000 111 10 011 10 000 111 10 111 10 0010 10 011 010
011 10 000 111 0001 0 111 010 100 011 00 111 00 011 00 111 00 111
110 111 110 1011 111 01 101 01 0001 0 110 111 00 011 110 111 1011
10 111 000 10 000 111 0001 0 111 010 1010 010 1011 110 00 10 011

www.mapequation.org

Rosvall & Bergstrom PNAS 2008 Maps of random walks on complex networks reveal community structure

Comunidades solapadas

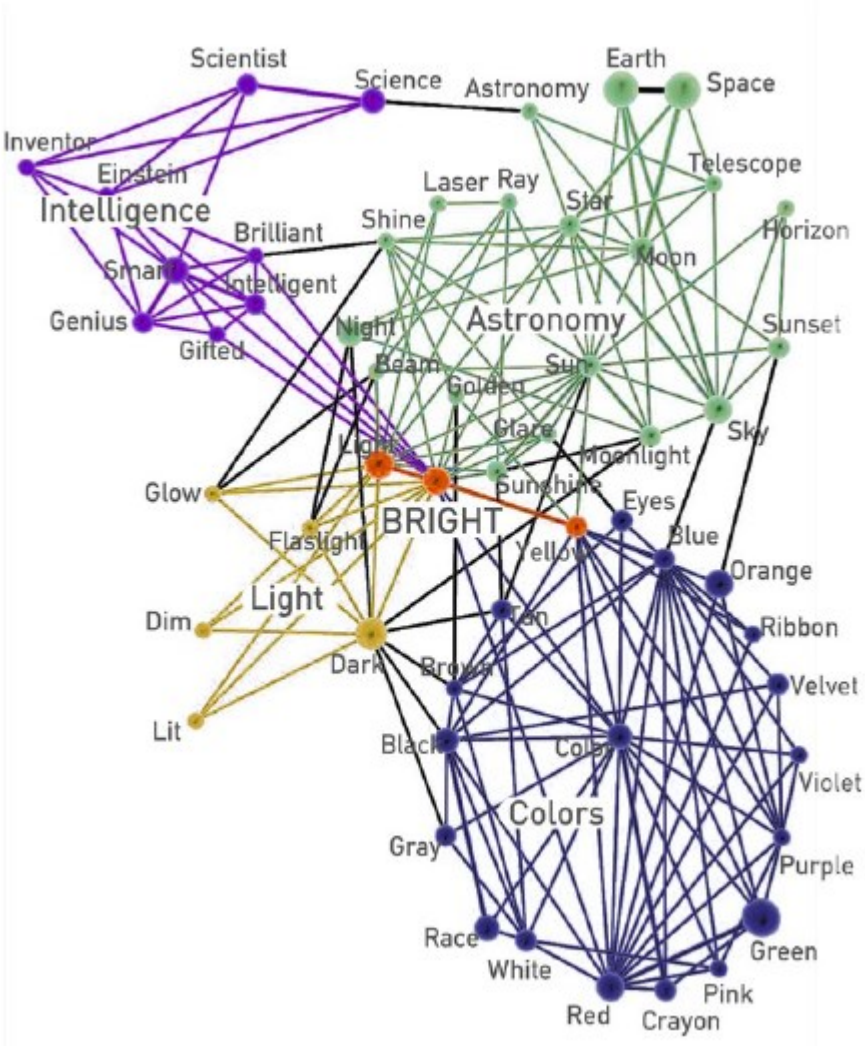




Diferentes posibilidades

a. Sin overlap
b. Overlap poco conectado
c. Overlap muy conectado

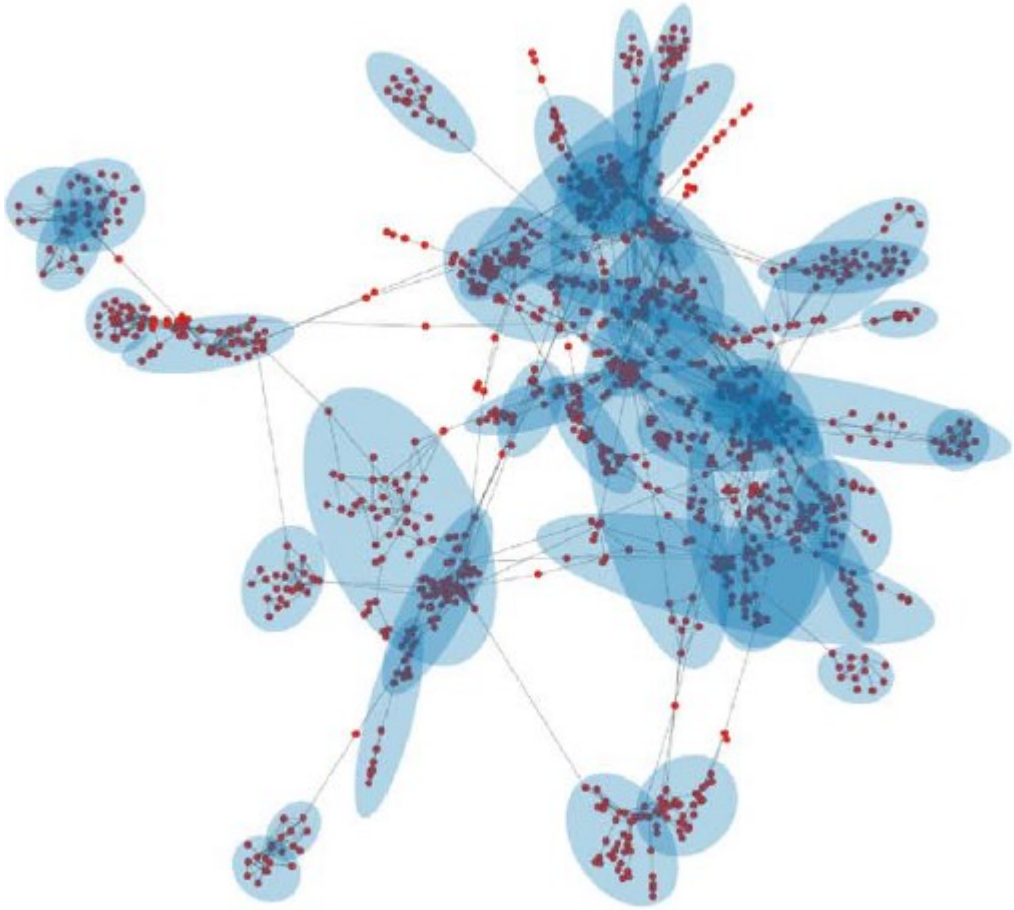
Comunidades solapadas



Red ego para la palabra **bright** en la *South Florida Free Association Network* en la que dos palabras estan conectadas si poseen un significado relacionado.

La pertenencia **simultanea** de **b*right*** a diferentes comunidades (CFinder) da cuenta de los diferentes significados de la palabra.

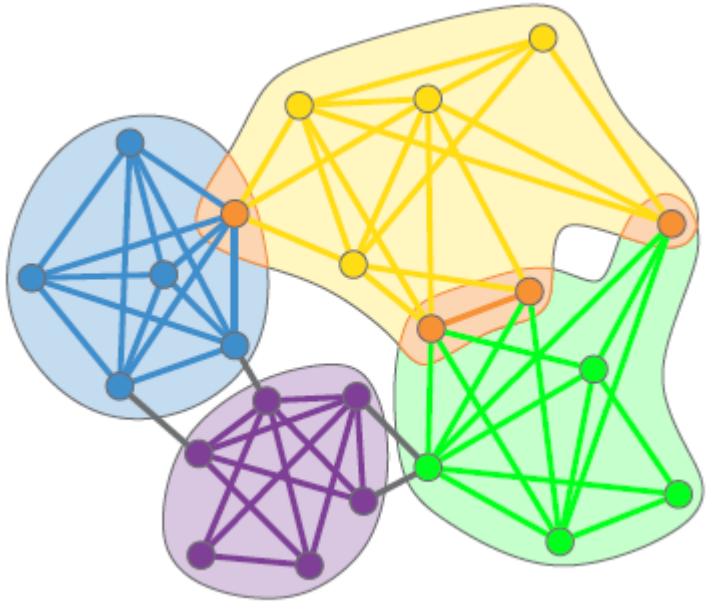
Comunidades solapadas



Comunidades AGM de una red de interacción de proteinas.

Comunidades solapadas pueden dar cuenta de ´múltiples funciones que pueda llevar adelante un determinado producto génico en diferentes contextos

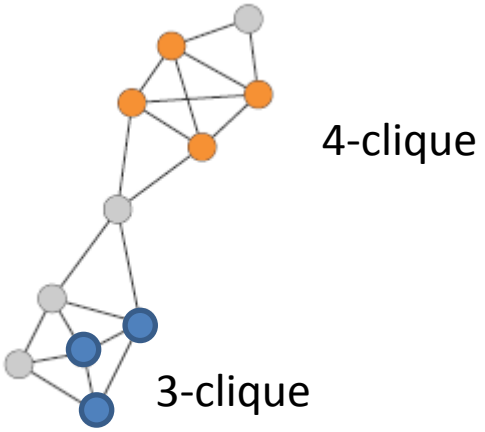
Comunidades solapadas



- Cfinder: Percolación de k-cliques
- Link Clustering
- Affiliation Graph Model

Método de percolación de cliques

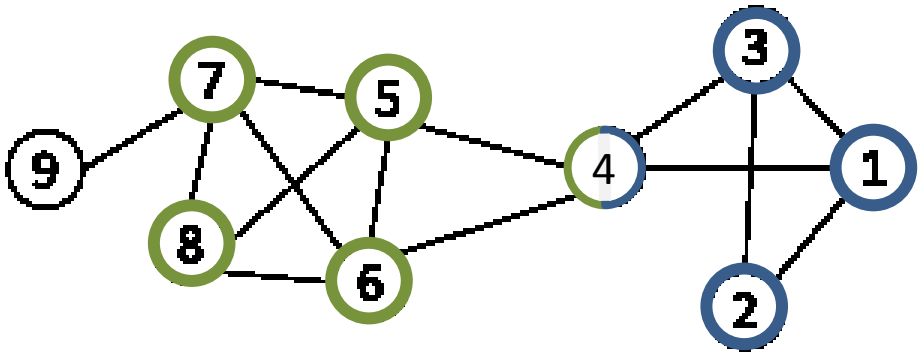
- Vimos que un clique implica una noción fuerte de comunidad
- Se los suele usar como **estructuras semilla** a partir de las cuales definir comunidades más grandes
- MPC es una metodología que permite busacar comunidades solapadas.



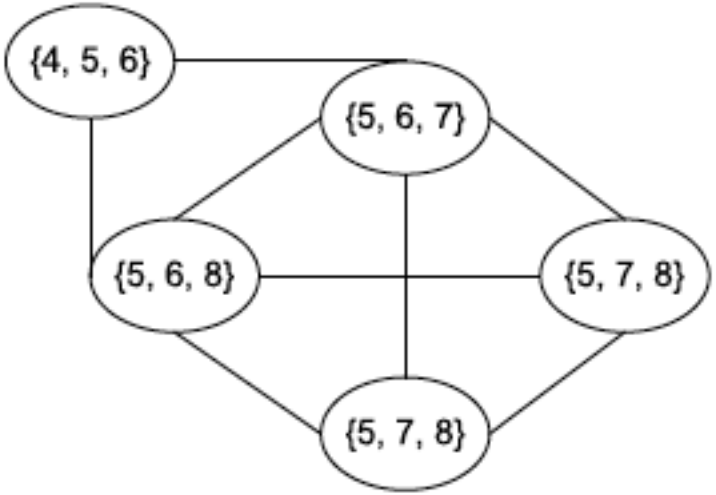
1. Se elige un valor para k
2. Se encuentran todos los k-cliques de la red
3. Se construye un **grafo de cliques**, donde dos k-cliques estarán vinculados si comparten k-1 nodos.
4. Cada componente conexa de este grafo forma una comunidad

Palla 2005 Nature , Uncovering the overlapping community structure of complex networks in nature and society

Ejemplo de MPC

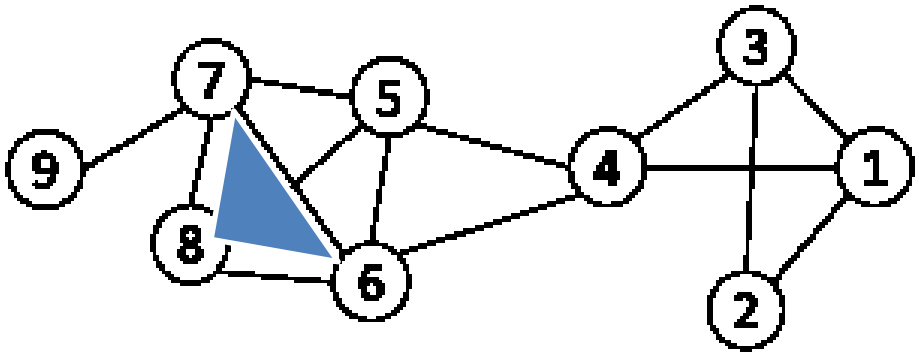


3-Cliques:
{1, 2, 3}, {1, 3, 4}, {4, 5, 6}, {5, 6, 7}, {5, 6, 8}, {5, 7, 8}, {6, 7, 8}

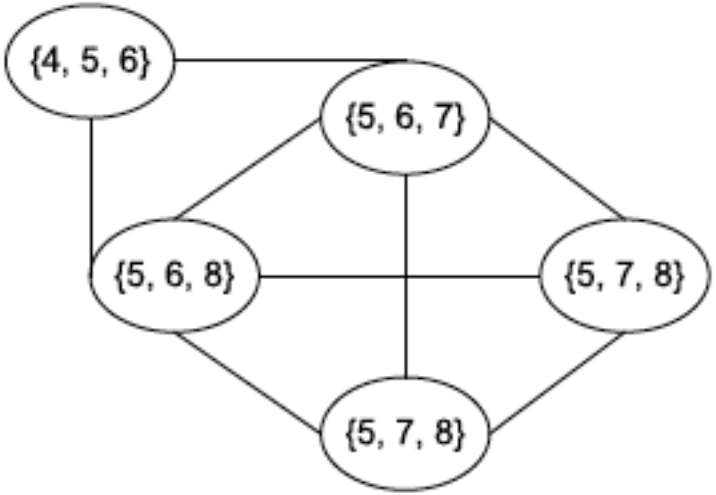


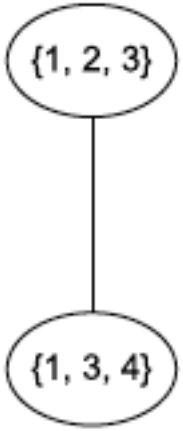
Comunidades:
{1, 2, 3, 4}
{4, 5, 6, 7, 8}

Ejemplo de MPC: rolling k-cliques



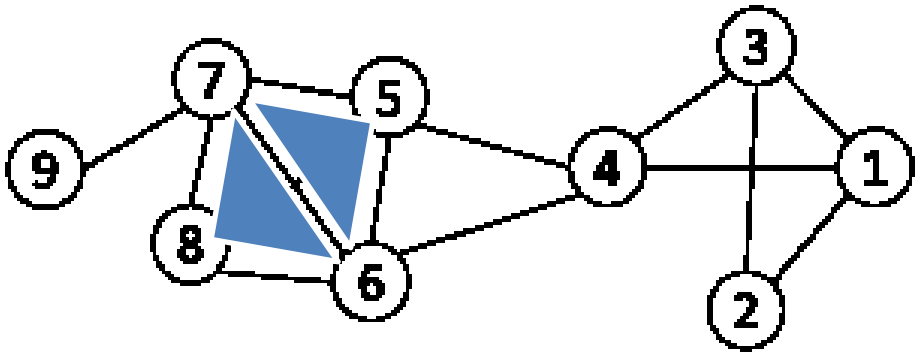
3-Cliques:
{1, 2, 3}, {1, 3, 4}, {4, 5, 6}, {5, 6, 7}, {5, 6, 8}, {5, 7, 8}, {6, 7, 8}



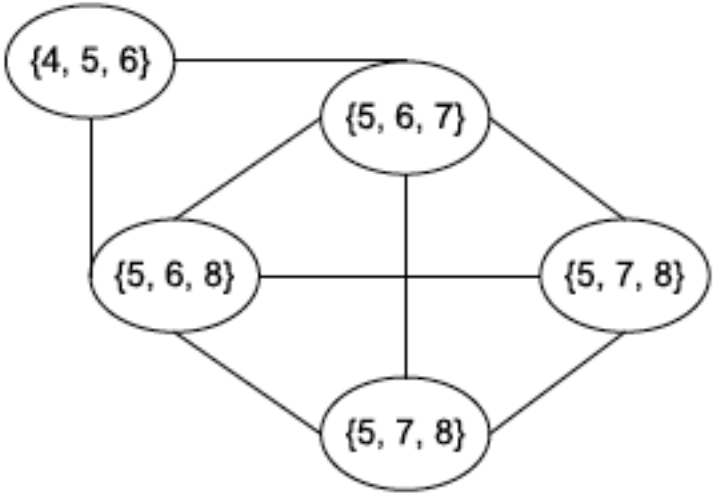


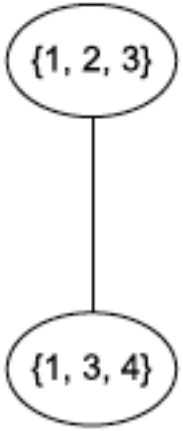
Comunidades:
{1, 2, 3, 4}
{4, 5, 6, 7, 8}

Ejemplo de MPC: rolling k-cliques



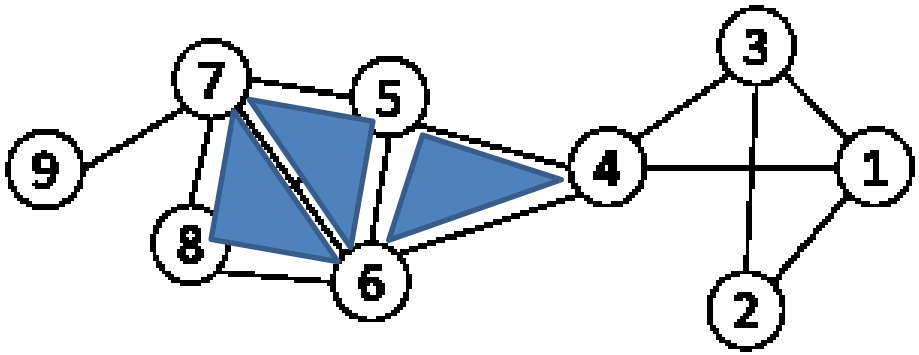
3-Cliques:
{1, 2, 3}, {1, 3, 4}, {4, 5, 6}, {5, 6, 7}, {5, 6, 8}, {5, 7, 8}, {6, 7, 8}



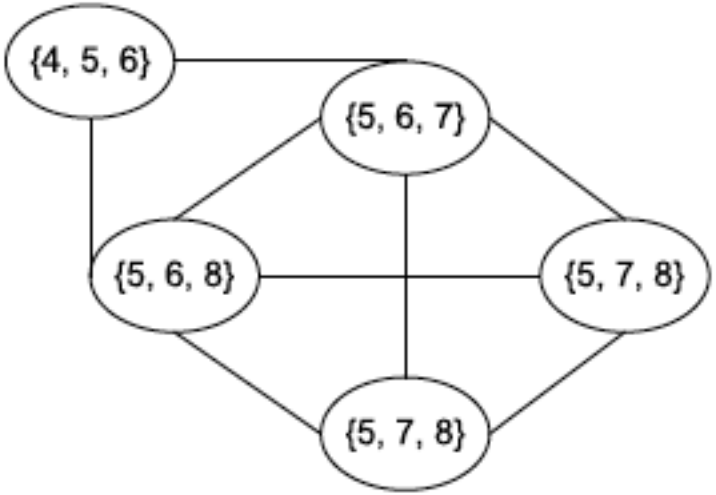


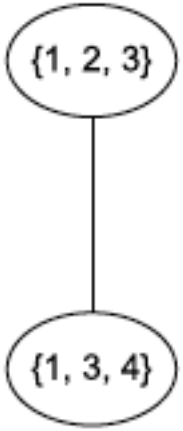
Comunidades:
{1, 2, 3, 4}
{4, 5, 6, 7, 8}

Ejemplo de MPC: rolling k-cliques



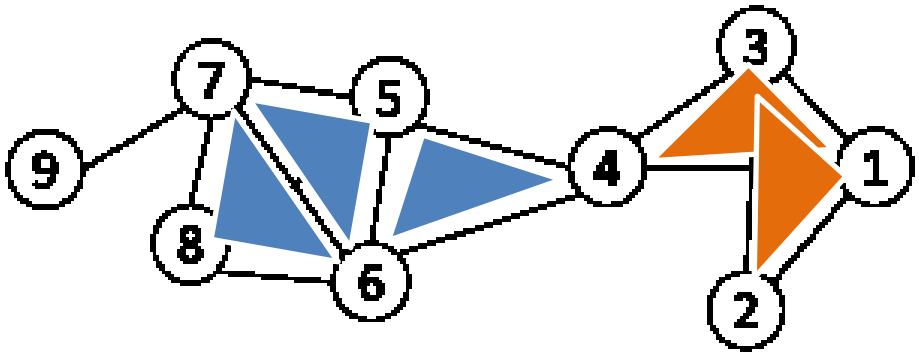
3-Cliques:
{1, 2, 3}, {1, 3, 4}, {4, 5, 6}, {5, 6, 7}, {5, 6, 8}, {5, 7, 8}, {6, 7, 8}



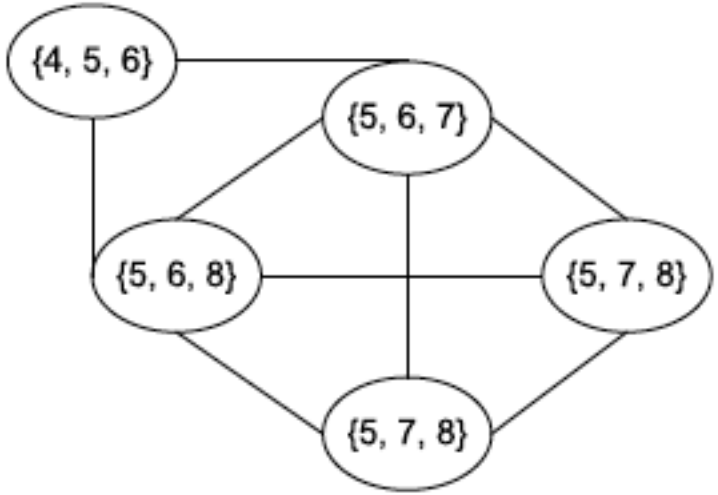


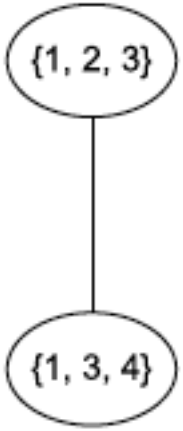
Comunidades:
{1, 2, 3, 4}
{4, 5, 6, 7, 8}

Ejemplo de MPC: rolling k-cliques

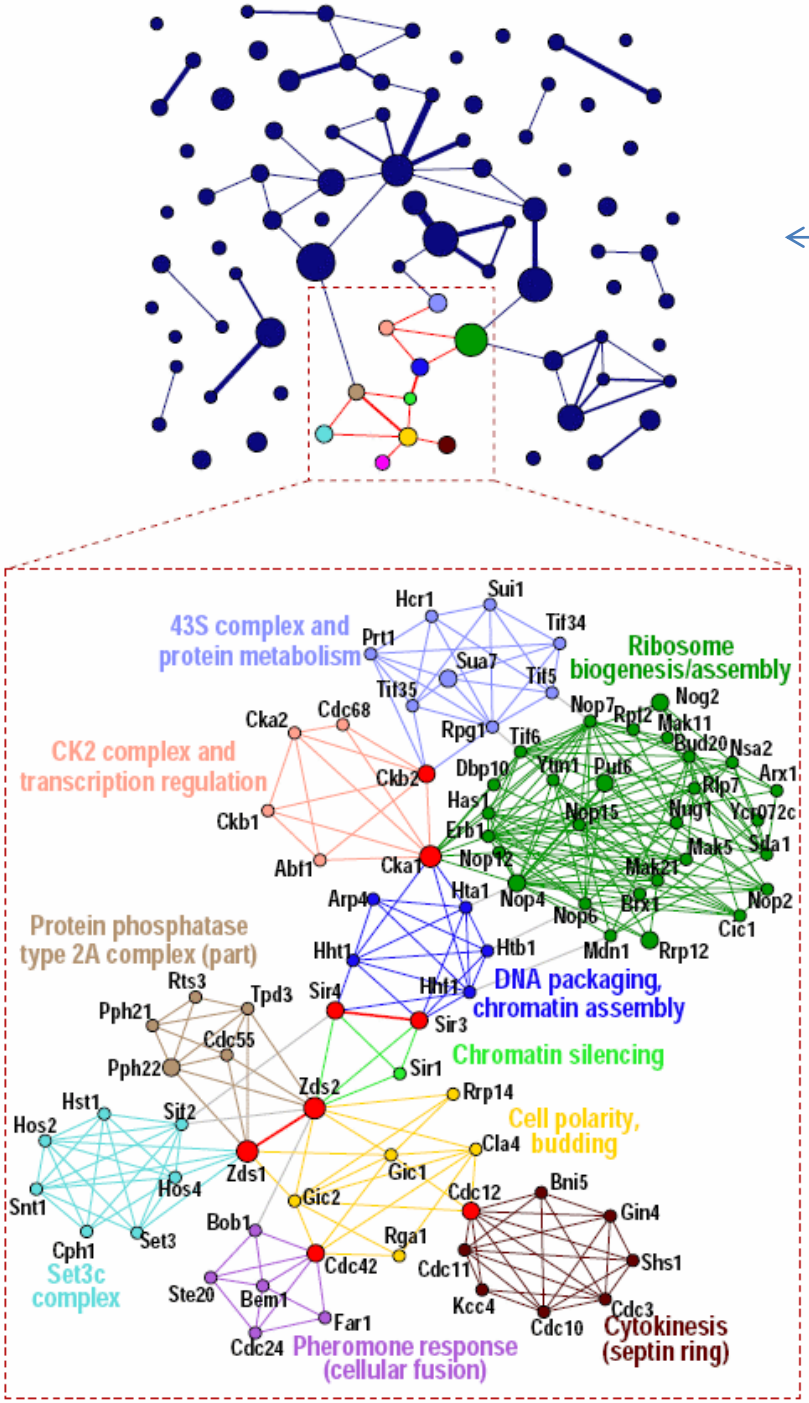


3-Cliques:
{1, 2, 3}, {1, 3, 4}, {4, 5, 6}, {5, 6, 7}, {5, 6, 8}, {5, 7, 8}, {6, 7, 8}





Comunidades:
{1, 2, 3, 4}
{4, 5, 6, 7, 8}



Red de 82 comunidades (MPC, k=4) de la red de interacción de proteinas DIP para *S. cerevisiae*

Área de círculos y ancho de líneas proporcionales al tamaño de comunidad y overlap respectivamente

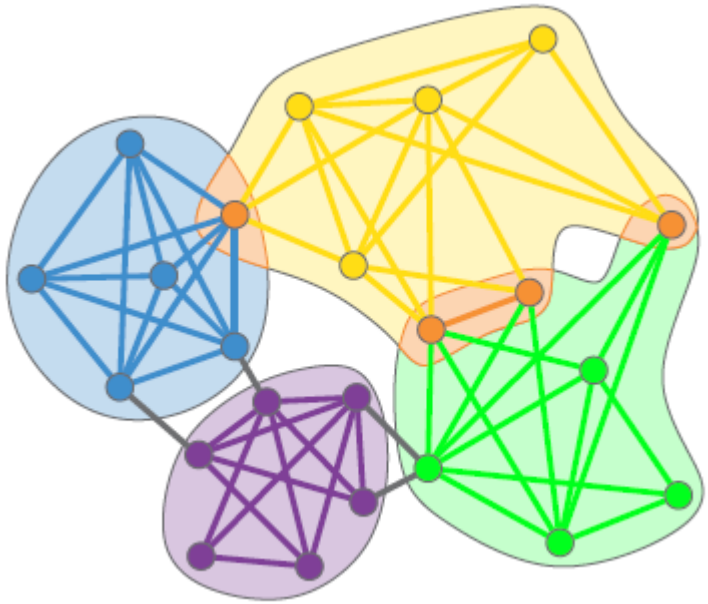
En el zoom se han coloreado las comunidades y los nodos que pertenecen a más de una comunidad aparecen en rojo

Adamcsek 2006 Bioinformatics

Agrupamiento de enlaces

- Nodos pueden pertenecer a más de una comunidad

- Los enlaces capturan la naturaleza de la interacción entre nodos por lo que tienden a ser más específicos.
  - Redes Sociales: vinculos de familia, trabajo, hoby, club, etc
  - Redes biológicas: interacción de lugar a función biológica.

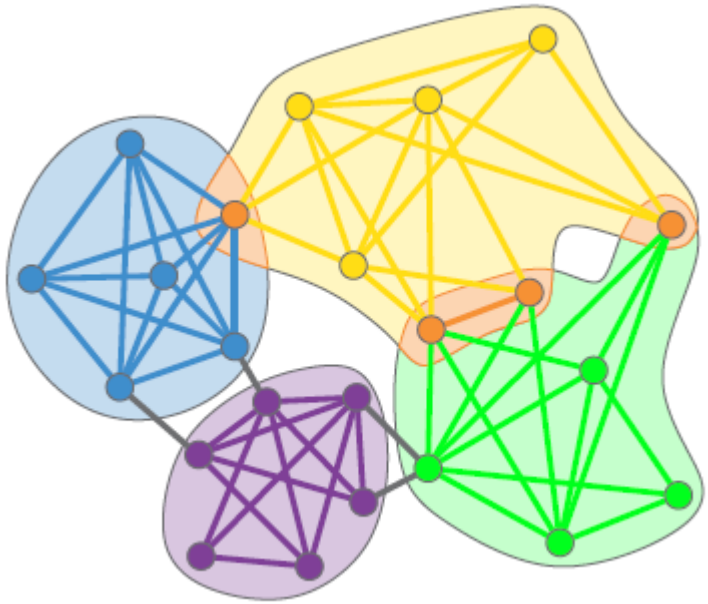


Idea: **agrupar enlaces** de manera jerárquica.
Sólo es necesario saber como medir **similitud entre enlaces**

Ahn, Bragow and Lehmann, *Nature* 466 (2010).

Agrupamiento de enlaces

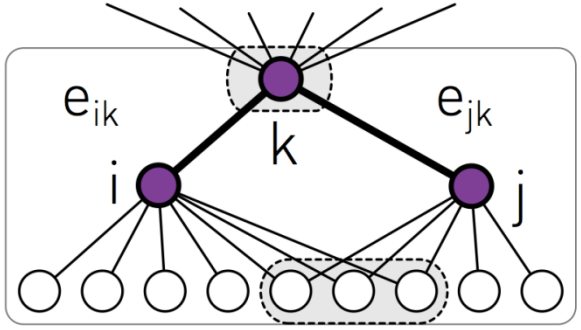
- Nodos pueden pertenecer a más de una comunidad
- Los enlaces capturan la naturaleza de la interacción entre nodos por lo que tienden a ser más específicos.
  - Redes Sociales: vinculos de familia, trabajo, hoby, club, etc
  - Redes biológicas: interacción de lugar a función biológica.



Idea: **agrupar enlaces** de manera jerárquica. Sólo es necesario saber como medir **similitud entre enlaces**

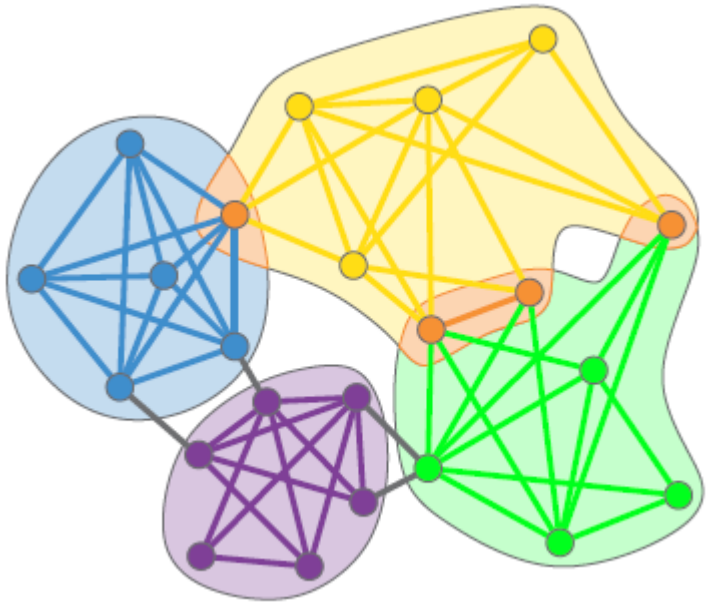
$$S(e_{ik}, e_{jk}) = \frac{|n_+(i) \cap n_+(j)|}{|n_+(i) \cup n_+(j)|}$$

$n_+(i)$: cjto de vecinos del nodo-i U nodo-i



Agrupamiento de enlaces

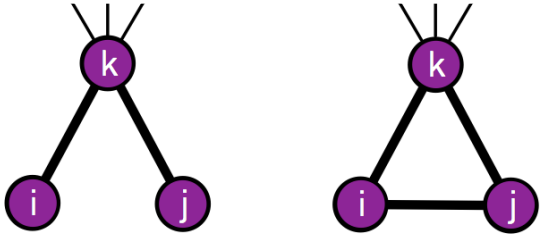
- Nodos pueden pertenecer a más de una comunidad
- Los enlaces capturan la naturaleza de la interacción entre nodos por lo que tienden a ser más específicos.
  - Redes Sociales: vinculos de familia, trabajo, hoby, club, etc
  - Redes biológicas: interacción de lugar a función biológica.



Idea: **agrupar enlaces** de manera jerárquica. Sólo es necesario saber como medir **similitud entre enlaces**

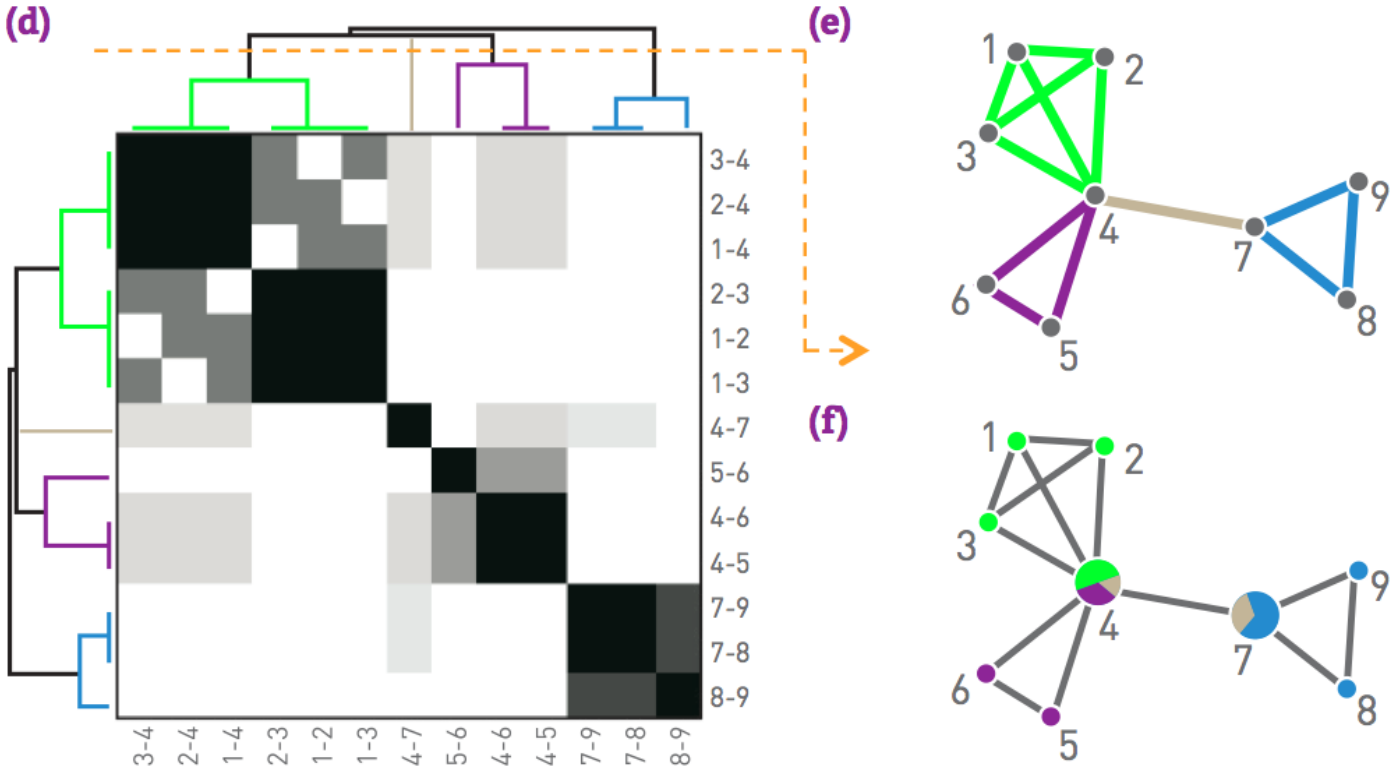
$$S(e_{ik}, e_{jk}) = \frac{|n_+(i) \cap n_+(j)|}{|n_+(i) \cup n_+(j)|}$$

$n_+(i)$: cjto de vecinos del nodo-i U nodo-i



$S(e_{ik}, e_{jk}) = \frac{1}{3}$ $S(e_{ik}, e_{jk}) = 1$

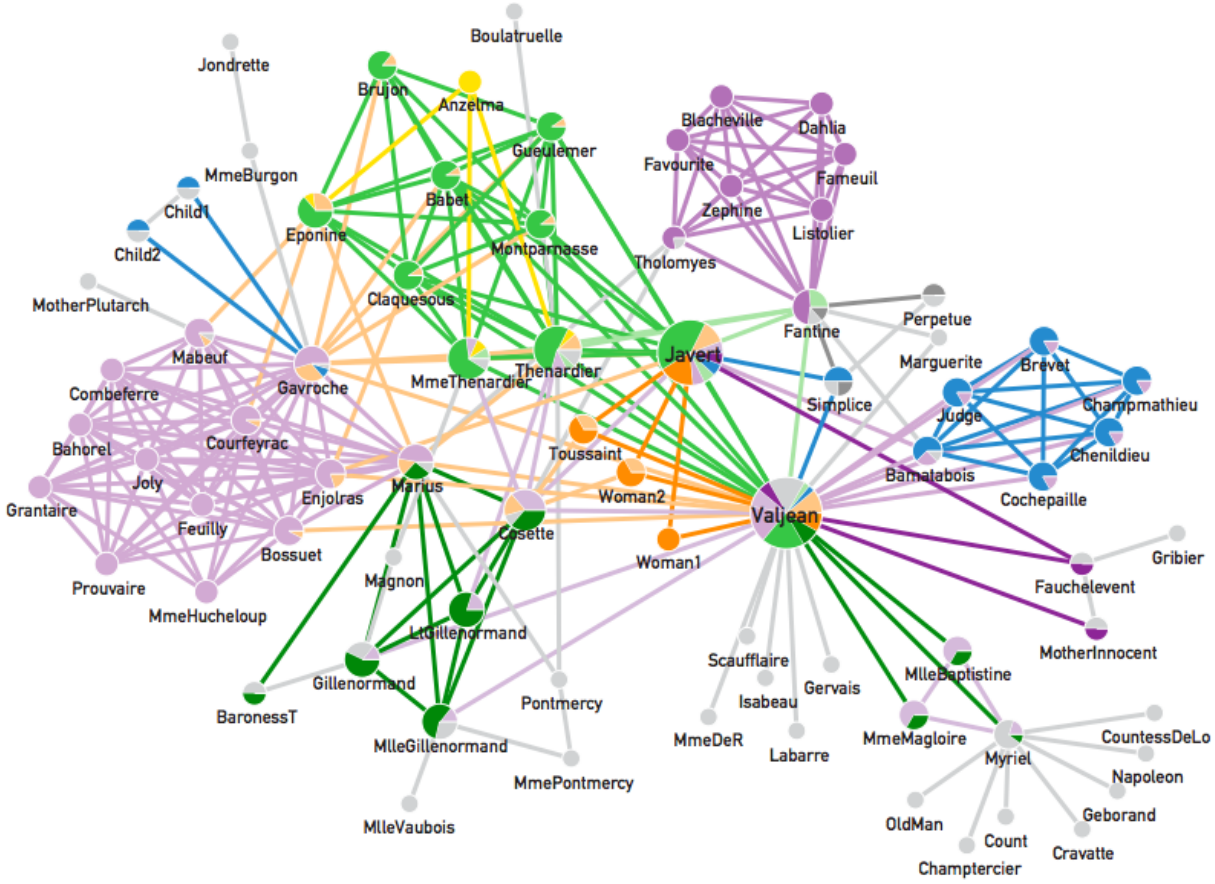
Agrupamiento de enlaces



$$S(e_{34}, e_{24}) = \frac{|n_+(3) \cap n_+(2)|}{|n_+(3) \cup n_+(2)|} = \frac{|\{1,2,4,3\} \cap \{1,3,4,2\}|}{|\{1,2,4,3\} \cup \{1,3,4,2\}\,|} = 1$$

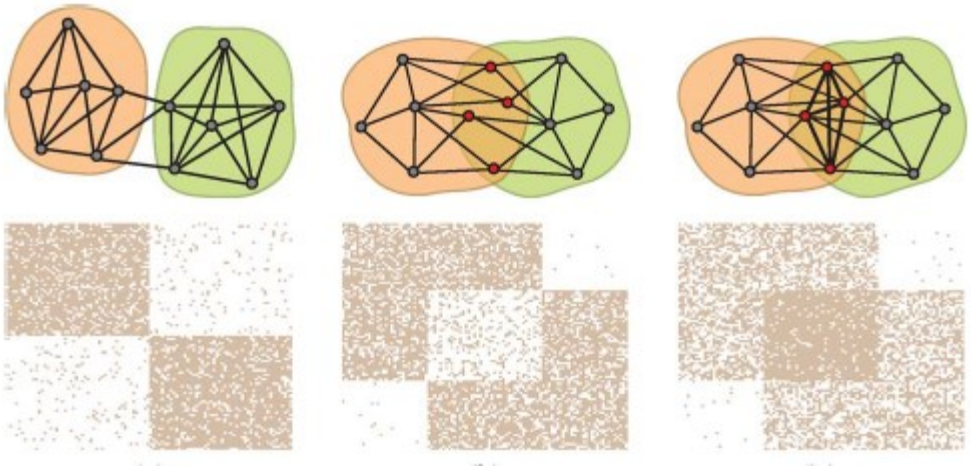
$$S(e_{54}, e_{24}) = \frac{|n_+(5) \cap n_+(2)|}{|n_+(5) \cup n_+(2)|} = \frac{|\{6,4,5\} \cap \{1,3,4,2\}|}{|\{6,4,5\} \cup \{1,3,4,2\}\,|} = \frac{1}{6}$$

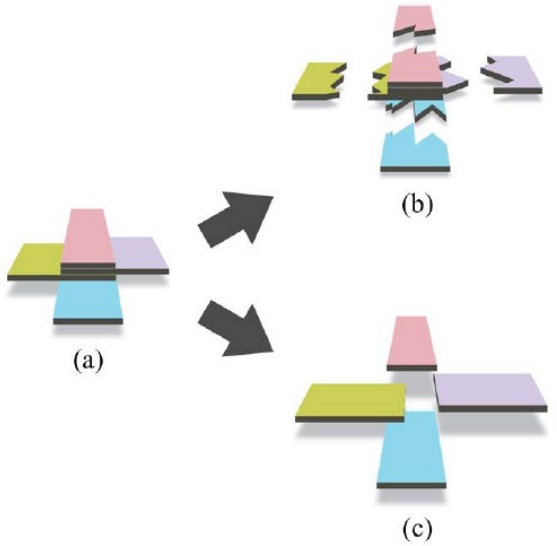
Agrupamiento de enlaces



Nota: En general este enfoque anda bien cuando el overlap entre comunidades es poco denso. Otra alternativa interesante es el Affiliation Graph Model de Leskovec et al

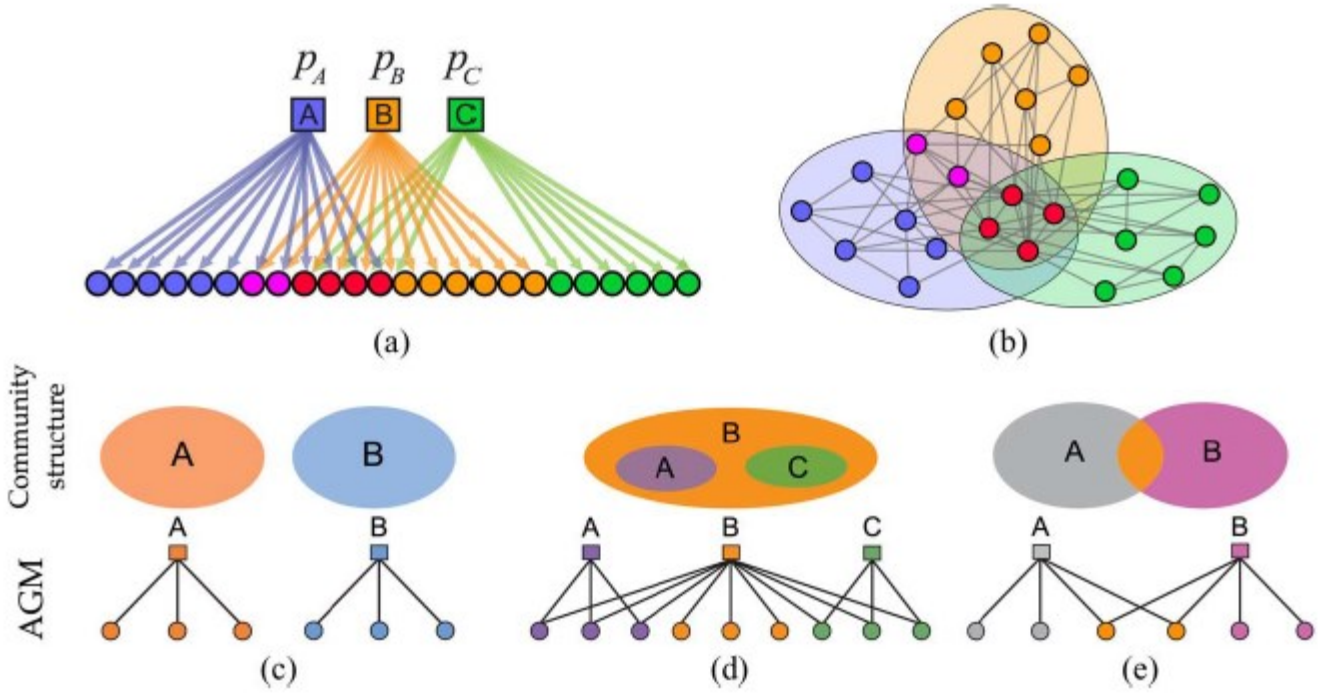
Affiliation Graph Model





Yang and Leskovec 2014 Overlapping communities explain core/periphery organization in networks

Affiliation Graph Model



Modela la red a partir de una estructura de red de filiación subyacente
Estima el **conjunto de filiaciones**: $\{F_A, F_B, \ldots, F_M\}$ y las probabilidades de **intraconectividad** $\{p_A, p_B, \ldots, p_M\}$ respectivas

Yang and Leskovec 2014 Overlapping communities explain core/periphery organization in networks

Evaluando Particiones

- Medidas internas:

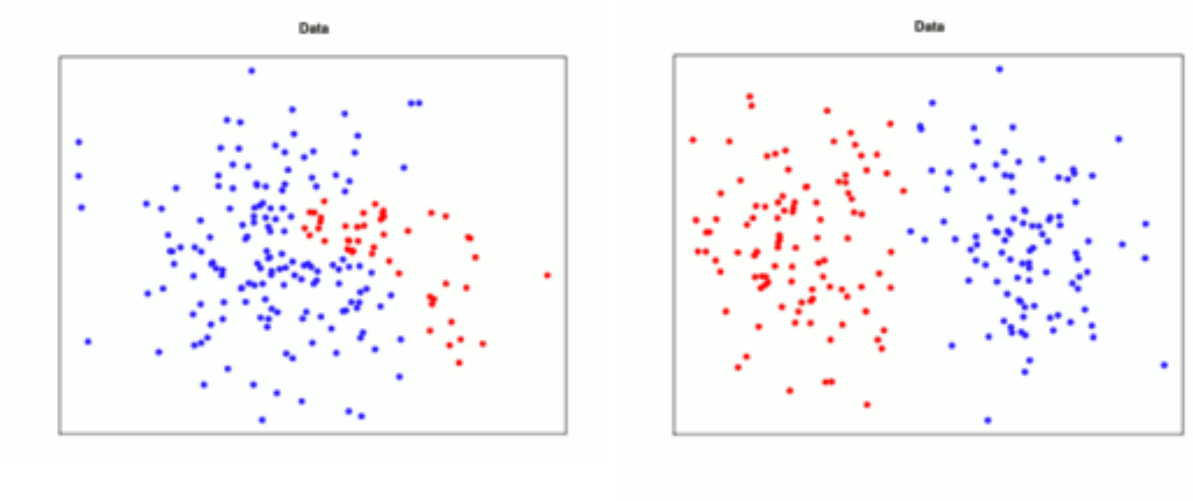
  Idea general, cuantificar nivel de compacidad/separación de grupos

  - Modularidad
  - Silhouette
  - ….

Evaluando Particiones

Compacidad/Separación de grupos : Silhouette

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{max\{a(i), b(i)\}}$$



a(i): distancia media del nodo-i con el resto de su cluster

b(i): mínima distancia del nodo-i con lgun elemento de otro cluster

Evaluando Particiones

- En ausencia de información externa
  - Medidas internas
    - Modularidad
    - Silhouette
    - …
- Con **información externa**
  - Partición de referencia disponible
    - Información mútua
    - Precisión de la asignación de grupos
  - Conocimiento externo
    - Coherencia de grupos

Cuantificando resultados contra partición de referencia

Agrupamiento **Real**

Resultado de Clustering

- El nro de comunidades puede no ser el mismo
- Puede no haber una correspondencia clara en la composición de clusters

Cómo cuantificar acuerdo/desacuerdo?

Proba/Teoría de la Información

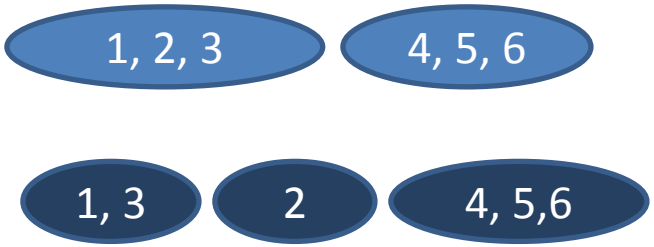
- Consideremos a la asignación en clusters como una variable aleatoria que se le asigna a cada nodo

$$p(C_1) = \frac{N_{C_1}}{\sum_C N_C}$$: probabilidad de que un nodo elegido al azar pertenezca a la comunidad C_1 de una dada partición

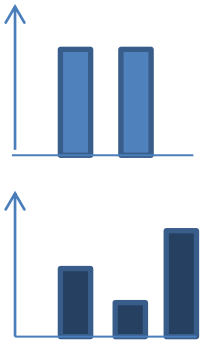
- Si tengo dos particiones alternativas, puedo computar la probabilidad conjunta

$$p(C_1, C_2) = \frac{N_{C_1 C_2}}{\sum_{C_1, C_2} N_{C_1 C_2}}$$: probabilidad **conjunta** de que un nodo elegido al azar pertenezca a la comunidad C_1 de la primera partición y a la C_2 de la segunda

Partición a: [1, 1, 1, 2, 2, 2]
Partición b: [1, 2, 1, 3, 3, 3]



N_{C_1}



N_{C_1,C_2} Matriz de confusión

	j=1	j=2	j=3
i=1	2	1	0
i=2	0	0	3

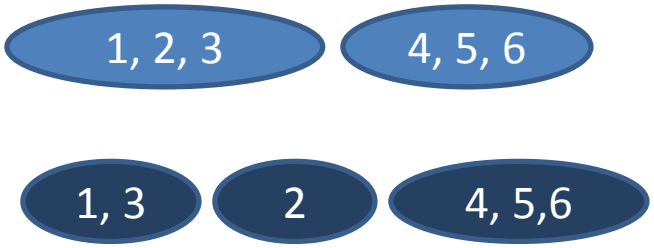
Información Mútua

- Si dos particiones son similares obtengo mucha información de un agrupamiento conociendo el otro.
- Enfoque de teoría de la información: la **información mútua** entre dos variables aleatorias cuantifica la cantidad de información (en bits) que obtengo de una variable, a partir de la otra

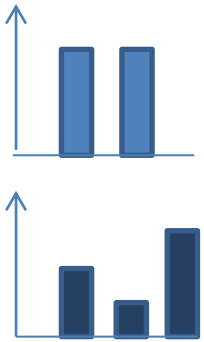
$$I(\{C_1\},\{C_2\}) = \sum_{C_1}\sum_{C_2} p(C_1,C_2)\log\frac{p(C_1,C_2)}{p(C_1)\,p(C_2)}$$

← probabilidad conjunta si asumimos **independencia** entre particiones

Partición a: [1, 1, 1, 2, 2, 2]
Partición b: [1, 2, 1, 3, 3, 3]



N_{C_1}



N_{C_1,C_2} Matriz de confusión

	j=1	j=2	j=3
i=1	2	1	0
i=2	0	0	3

$$I(\{C_1\},\{C_2\}) = \sum_{C_1}\sum_{C_2} p(C_1,C_2)\log\frac{p(C_1,C_2)}{p(C_1)\,p(C_2)}$$

Información Mútua

- Versión normalizada de información mútua

$$I_n = \frac{2\,I(\{C_1\},\{C_2\})}{H(\{C_1\}) + H(\{C_2\})} = 0.8278$$

$$0 < I_n < 1$$

Entropía de Shanon:

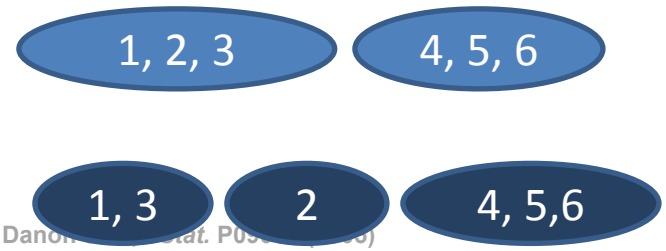
cuanta información obtengo al conocer la realización de una variable aleatoria

$$H(\{C_1\}) = -\sum_{C_1} p_{C_1}\log p_{C_1}$$

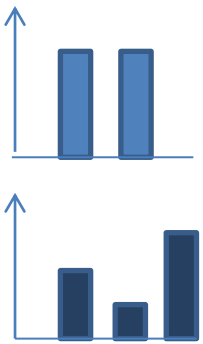
$$= -\sum_{C_1}\frac{N_{C_1}}{\sum_C N_C}\log\frac{N_{C_1}}{\sum_C N_C}$$

Partición a: [1, 1, 1, 2, 2, 2]

Partición b: [1, 2, 1, 3, 3, 3]



N_{C_1}



N_{C_1,C_2} Matriz de confusión

	j=1	j=2	j=3
i=1	2	1	0
i=2	0	0	3

L. Danon ... *Stat.* P05... (2005)
S. Fortunato, *Phys. Rep.* 486 (2010)

Precisión

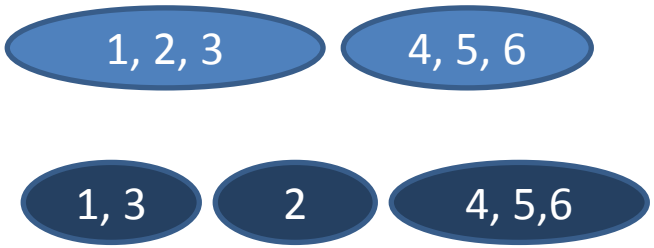
- Consideramos todos los posibles pares de nodos y evaluamos si residen en la misma comunidad que en la partición de referencia luego de la detección
- Habra un error *si*
  - Dos nodos que pertenecen a la misma comunidad de referencia son asignados a comunidades diferentes
  - Dos nodos de diferentes comunidades de referencia son asignados a una misma comunidad
- Para cuantificar esto armamos: matriz confusión

clustering	Referencia: C(i)=C(j)	Referencia: C(i)≠C(j)
C(i)=C(j)	a	b
C(i)≠C(j)	c	d

$$precisión = \frac{a+d}{a+b+c+d} = \frac{a+d}{n(n-1)/2}$$

Precisión

Partición Ref: [1, 1, 1, 2, 2, 2]
Partición : [1, 2, 1, 3, 3, 3]



clustering		Referencia C(i)=C(j)	Referencia C(i)≠C(j)
	C(i)=C(j)	4	0
	C(i)≠C(j)	2	9

$$precisión = \frac{a+d}{a+b+c+d} = \frac{a+d}{n(n-1)/2}$$

$$precisión = 0.87$$

Detección de Comunidades

Basados en noción de Distancia/Similaridad

- Agrupamiento Jerárquico
- k-means
- PAM
- …

Basados en optimización de figura de mérito

- Newman-Girvan
- fast greedy
- Louvain
- Infomap

Detección comunidades solapadas

- Percolación de cliques
- Agrupamiento de enlaces
- Affinity Graph Model

Validación

En ausencia de información externa
- Medidas internas
  - Modularidad
  - Silhouette
  - …

Con **información externa**
- Partición de referencia disponible
  - Información mútua
  - Precisión de la asignación de grupos

Conocimiento externo
- Coherencia de grupos