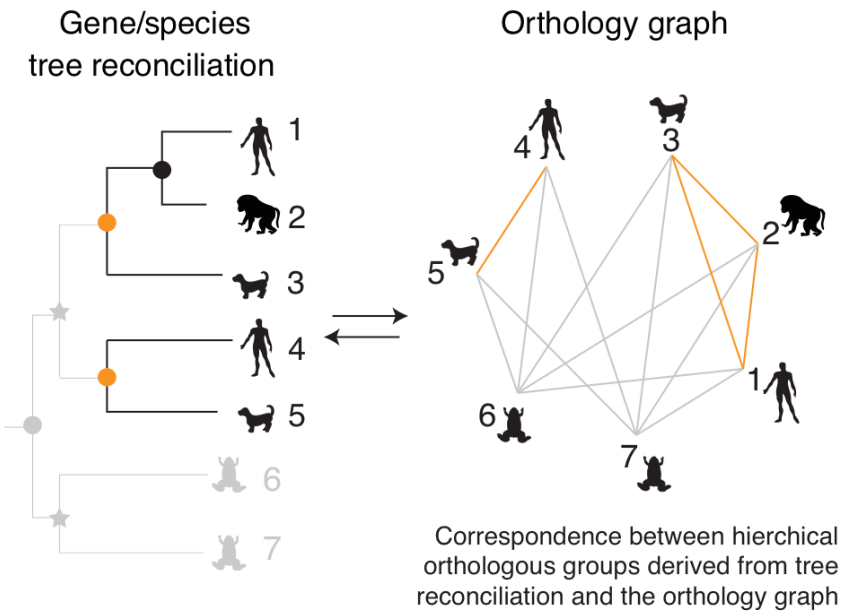
Traitement des graphes et réseaux biologiques

Master 1 BBS



- Plan
  - Evolution des génomes : importance de l'orthologie
  - Définitions et hypothèse(s) sous jacente(s)
  - Approches pour réaliser la construction de groupes de gènes othologues
  - Méthodes basées sur des partitionnement de graphes

Pourquoi étudier l'évolution des génomes ?

- **Structure** et **organisation** des génomes
  - Lien avec l'expression du programme génétique
- **Transmission verticale/horizontale:** impact de la reproduction sexée, de la recombinaison, des transferts de gènes.
- **Coévolution** : entre organismes différents, hôte/symbiote ou hôte/pathogène (microbiote intestinal).
- **Adaptation des organismes à leur environnement** : rôles des duplications, des délétion et des éléments génétiques mobiles (domestication).
- **Phylogénie des espèces**, : différentes échelles, ex. l'histoire des populations (ADN ancien/fossile).
- **Origine de la vie**

➢ Ces différentes analyses reposent sur l'identification de liens **d'orthologies**

En pratique: utilisations de l'orthologie

1. **Reconstruction d'arbre phylogénétiques** basés sur un ensemble de gènes orthologues (super arbre, super matrice), sous l'hypothèse que ces gènes suivent la divergence des espèces.
2. **Inférence fonctionnelle** : établir des relations fonctionnelles entre différents génomes, sous l'hypothèse que les gènes orthologues conservent la même fonction.
3. **Phylogénomique** : prérequis pour l'analyse comparative et évolutive des génomes.

- Importante communauté internationale s'est structurée autour de la question de l'identification des gènes orthologues.

http://questfororthologs.org/orthology_databases

QUEST FOR ORTHOLOGS

QfO 7 will take place in Frankfurt, Germany, in summer 2021. Stay tuned!

Welcome

This is the site of the Quest for Orthologs consortium. Proteins and functional modules are evolutionarily conserved even between distantly related species, and allow knowledge transfer between well-characterized model organisms and human. The underlying biological concept is called 'Orthology' and the identification of gene relationships is the basis for comparative studies.

More than 30 phylogenomic databases provide their analysis results to the scientific community. The content of these databases differs in many ways, such as the number of species, taxonomic range, sampling density, and applied methodology. What is more, phylogenomic databases differ in their concepts, making a comparison difficult – for the benchmarking of analysis results as well as for the user community to select the most appropriate database for a particular experiment.

The Quest for Orthologs (QfO) is a joint effort to benchmark, improve and standardize orthology predictions through collaboration, the use of shared reference datasets, and evaluation of emerging new methods.

The main sections of this site are:

- Meetings
- Community Standards (Reference proteome, standardized formats, benchmarking, etc..)
- Working groups
- Orthology databases
- Documents (Intranet)
- Mailing-List and Contact

To contribute to this website, please create an account (see below) and contact us!

Orthology Benchmarking

http://questfororthologs.org/orthology_databases

QUEST FOR ORTHOLOGS

List of orthology databases

If you know of any other database, please edit this page directly or contact us.

1. COGs/TWOGs/KOGs
2. COGs-COCO-CL
3. COGs-LOFT
4. eggNOG
5. EGO
6. Ensembl Compara
7. Gene-Oriented Ortholog Database
8. GreenPhylDB
9. HCOP
10. HomoloGene
11. HOGENOM
12. HOVERGEN
13. HOMOLENS
14. HOPS
15. INVHOGEN
16. InParanoid
17. KEGG Orthology
18. MBGD
19. MGD
20. OMA
21. OrthoDB
22. OrthologID
23. ORTHOLUGE
24. OrthoInspector
25. OrthoMCL
26. Panther
27. PhIGs
28. PHOG
29. PhylomeDB
30. PLAZA
31. P-POD
32. ProGMap
33. Proteinortho
34. RoundUp
35. TreeFam
36. YOGY

Définitions : Homologie

Définitions (Fitch, 2000)

- **Homologie**: relation entre deux entités biologiques (caractères anatomique, séquences…) qui dérivent d'un ancêtre commun.
- **Orthologues**: séquences qui dérivent par un événement de **spéciation** de leur dernier ancêtre commun.
- **Paralogues**: séquences qui dérivent par un événement de **duplication** de leur dernier ancêtre commun.

Concepts définies dans le cadre de la théorie de l'évolution,

- pas directement lié à la **fonction** des séquences impliquées!

Remarque, les protéines homologues ont généralement conservées la même structure 3D.

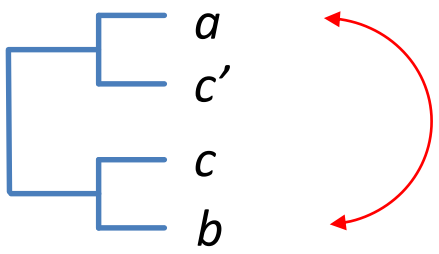
Duplication:

- néo ou sub fonctionnalisation.

Problèmes

La relation d'orthologie **n'est pas transitive** (exemple espèces A, B et C):

- Le gène *a* est orthologue au gène *b*
- Le gène *b* est orthologue au gène *a*

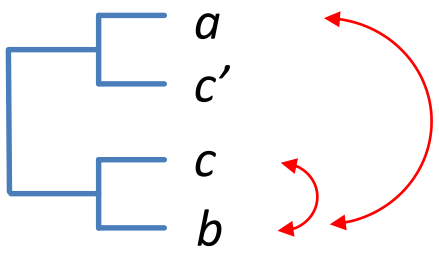


Définitions : Homologie entre plusieurs génomes

Problèmes

La relation d'orthologie **n'est pas transitive**:

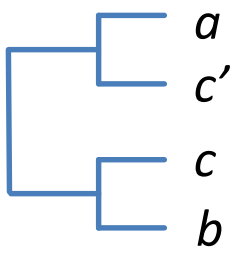
- Le gène *a* est orthologue au gène *b*
- Le gène *b* est orthologue au gène *a*
- Les gènes *b* et *c* sont orthologues
- Les gènes *a* et *c* sont ?

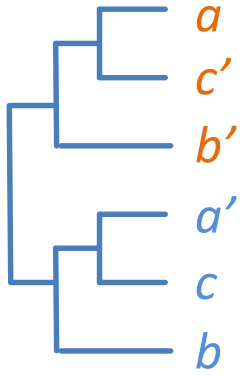


Problèmes

La relation d'orthologie **n'est pas transitive**:

- Le gène *a* peut être orthologue au gène *b* et le gène *b* orthologue au gène *c* mais les gènes *a* et *c* ne sont pas nécessairement orthologues.



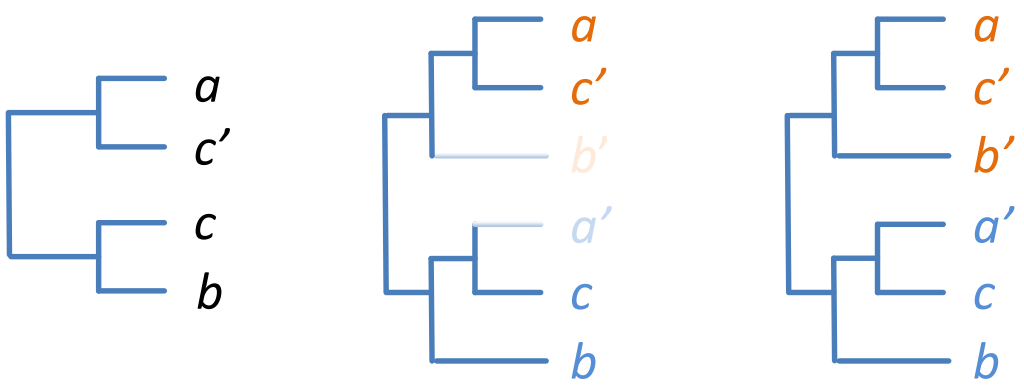


Définitions : Homologie entre plusieurs génomes

Problèmes

La relation d'orthologie **n'est pas transitive**:

- Le gène *a* peut être orthologue au gène *b* et le gène *b* orthologue au gène *c* mais les gènes *a* et *c* ne sont pas nécessairement orthologues.



-> Difficulté de définir un **'groupe de gènes orthologues'**.

Définitions : Homologie entre deux génomes

Autres définitions basées sur une paire de gènes et un **événement** de spéciation (Remm *et al.,* 2001)

- **in-paralogues** :
  - séquences paralogues issues d'une duplication **postérieur** à un évènement de spéciation (paralogues récents)

    -> **fonction similaire**?

- **out-paralogues** :
  - séquences paralogues issues d'une duplication **antérieur** à un évènement de spéciation (paralogues anciens)

    -> **fonction différente**?

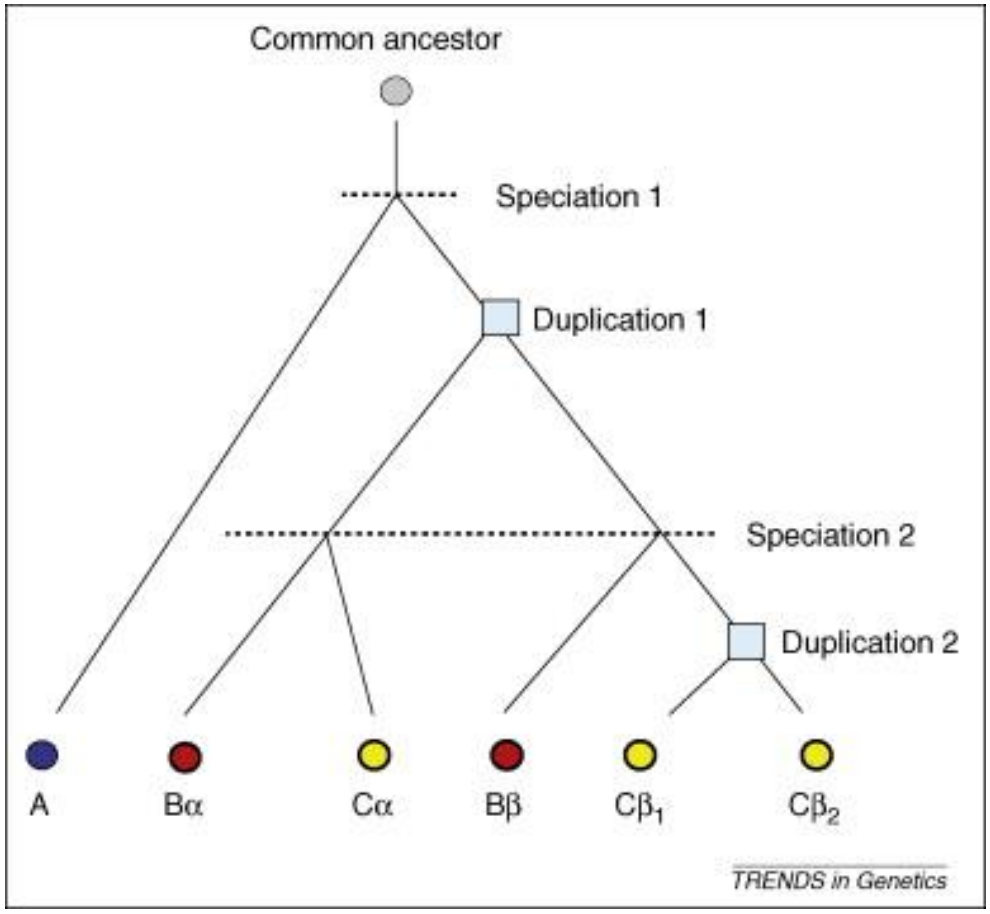
Définitions : Homologie entre plusieurs génomes

Le gros problème!

Les définitions précédentes se rapportent à des événements de spéciation et de duplication observés sur l'arbre **modélisant** l'évolution de ces séquences (structure hiérarchique).

Et cet arbre est inconnu!!!

Illustration



Studer et Robinson-Rechavi, 2009

Arbre décrivant l'évolution de 6 gènes homologues appartenant à trois espèces (A, B et C).

Duplication 1 : α et β chez le dernier ancêtre commun de B and C,

Duplication 2 : β_1 et β_2 dans la lignée C.

Seul le gène de l'espèce A n'a pas de ?.

Tous les gènes de B et C sont ? au gène de A.

Les gènes α et β sont ? / spéciation 1 et ? / spéciation 2.

Les gènes β_1 et β_2 sont ? / spéciations 1 et 2.

Les gènes Bα et Cα sont ?.

Définitions : groupe de gènes orthologues

Groupe de gènes orthologues (OG)

Ensemble de gènes homologues dont chaque paire possible est une relation **d'orthologie** ou de **in-paralogie** par rapport au dernier évènement de spéciation (en pratique: une duplication dans la même espèce!).

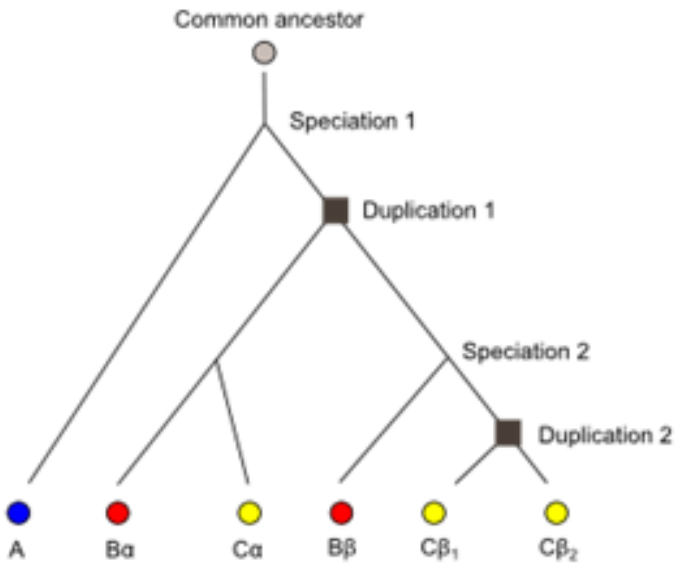
Dans un OG les paires de gènes sont

- **orthologues** si les gènes appartiennent à des espèces différentes
- **paralogues** si les gènes appartiennent à la même espèce.

Pièges dans la construction d'OG?

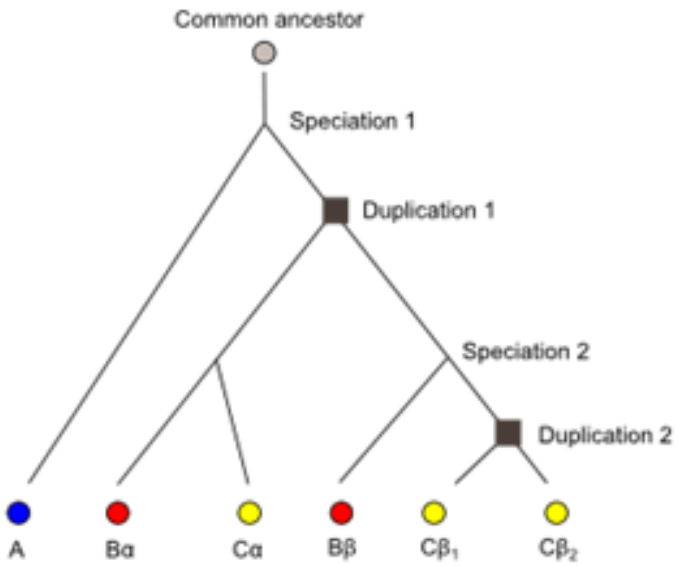
Pièges dans la construction d'OG:

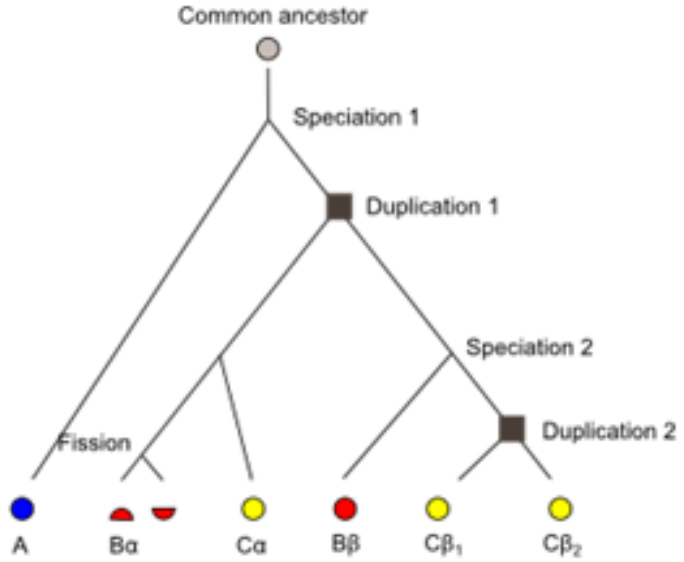
on ne connait pas l'histoire des séquences!



Les gènes Bα et Cβ1, Cβ2 sont ?

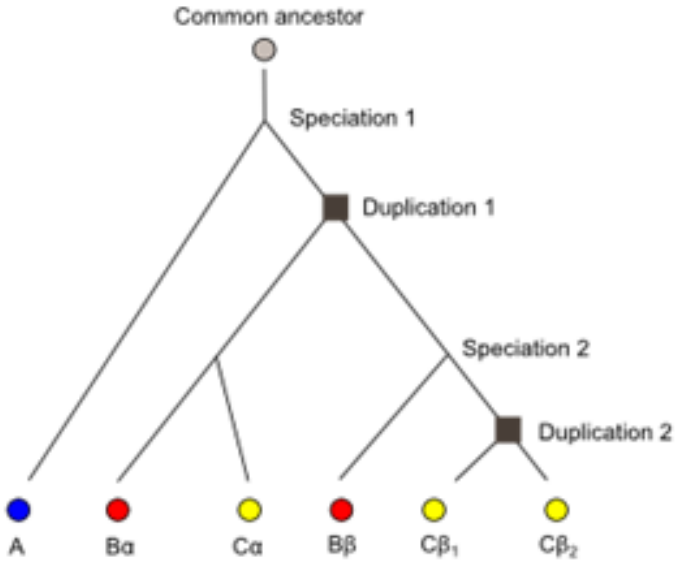
Pièges dans la construction d'OG: on ne connait pas l'histoire des séquences!

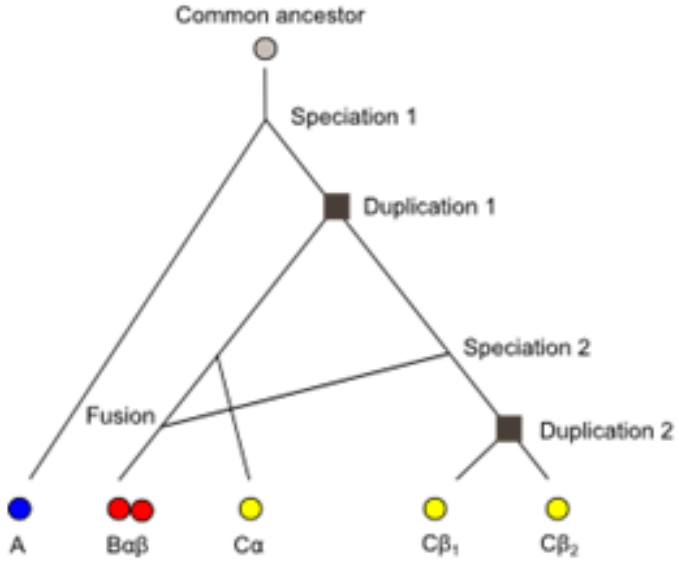




Les gènes Bα1 et Bα2 sont **?** de Cα

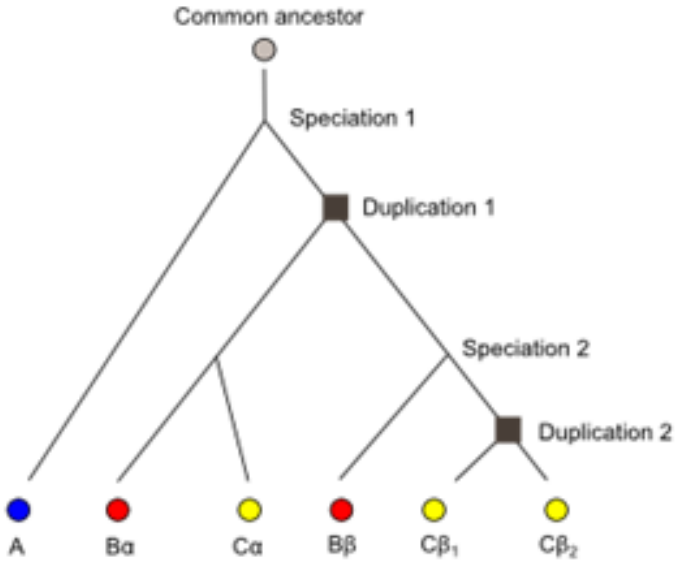
Pièges dans la construction d'OG: on ne connait pas l'histoire des séquences!

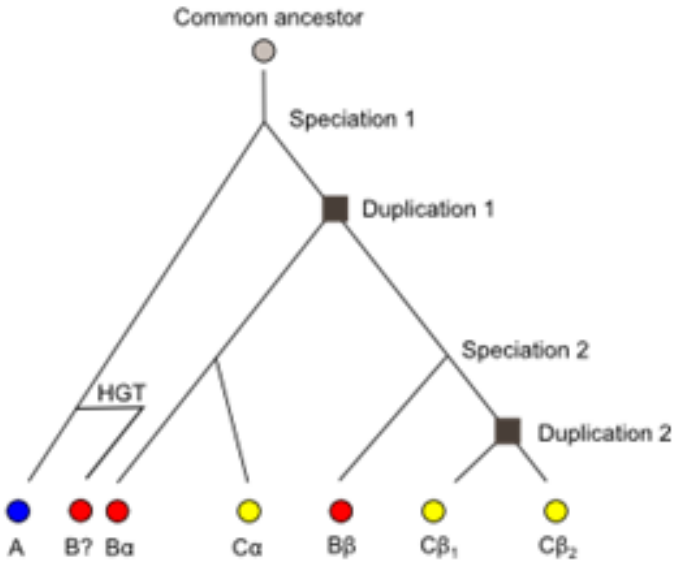




Le gène Bαβ est ? à Cα et ? à Cβ1, Cβ2

Pièges dans la construction d'OG: on ne connait pas l'histoire des séquences!





- + erreurs liées à la méthodologie
  - Envisager la construction d'OG pouvant se recouvrir!

Comment établir les relations d'orthologie (Kuzniar *et al.,* 2008)?

Méthodes d'identification : Etablir les relations d'orthologie

Comment établir les relations d'orthologie (Kuzniar *et al.,* 2008)

Approche classique à l'échelle d'une famille de gènes:

- reconstruction d'arbres et identification des événements de spéciation et de gain et perte de gènes.

A l'échelle des génomes

1. Méthodes basées sur la reconstruction d'un **arbre** phylogénétique (référence) et d'une analyse de l'évolution des gènes homologues / référence.
2. Méthodes basées sur l'analyse du **graphe** constitué de l'ensemble de paires de gènes orthologues.
3. Méthodes hybrides (arbres et graphes).

Utilisation d'autres informations que la séquences (synthénie, ontologie…)

Observations

Les arbres obtenus sur les gènes ne sont pas nécessairement **congruents**

- entre eux
- et avec l'**arbre** phylogénétique (des espèces)

➢ méthode de **réconciliation d'arbres:** prédire le nombre minimum de duplications et de pertes de gènes pour expliquer les données (Dufayard *et al.,* 2005; Zmasek et Eddy 2001; Goodman *et al.,* 1979; Page et Charleston 1997)

Observations

Limitations

- Les arbres obtenus doivent être fiables or c'est rarement le cas (prise en compte des nœuds incertains)!
- Les arbres doivent être correctement enracinés (manuellement?).
- Les alignements multiples utilisés pour construire les arbres doivent être de très bonnes qualités.
- Les logiciels d'alignements multiples et de reconstruction d'arbres voient leurs performances décroitre avec l'augmentation du nombre de séquences (heuristiques, parallélisations…).
- L'ensemble de la procédure (contrôle qualité) est difficile à automatiser.

Méthodes basées sur les graphes

Repose sur l'identification de liens d'orthologie entre paires de séquences.

- Approche indirecte: les liens d'orthologie sont inférés à partir de l'alignement de paires de séquences.
- Alignement global ou local?

Méthodes basées sur les graphes

Méthode la plus répandue:

Programme : BlastP ou équivalent

Réaliser les BlastP pour chaque paire de souches

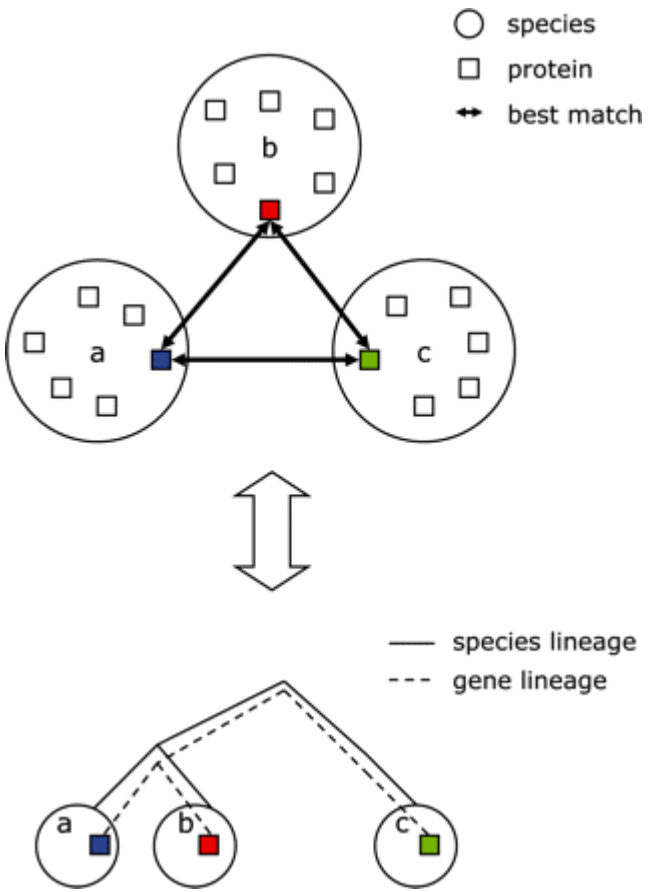
Critères utilisés : score de similarité (ou e-value), pourcentage de séquence alignée.

Notation :

BP(*A*, *A'*), si *A* et *A'* appartiennent à la même souche (Best Paralogs)

BH(*A*, *B*), si *A* et *B* appartiennent à des souches différentes (Best Homologs)

- Pour chaque paire de souches
  - Retenir pour chaque séquence soumise *A*, la séquence *B* maximisant le critère (Score > S_{seuil}) et présentant une couverture (%ali) > S_{ali}.
    - si *BH*(*A*, *B*) = *BH*(*B*, *A*) alors *A* et *B* sont **Best Bidirectional Hits** (BBH).
    - si *BBH(A, B)* > *BP(A, A')* et > *BP*(*B*, *B'*) alors *A* et *B* sont **orthologues 1:1**.



Relation entre graphe et arbre phylogénétique.

Graphe G:

sommets: gènes/protéines

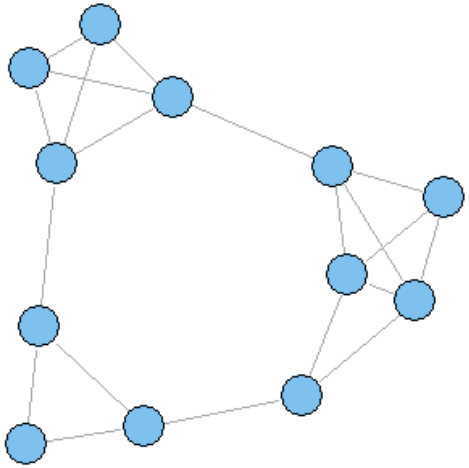
arrêtes: liens d'orthologies

- Un sous graphe de G est un triangle entre *a*, *b* et *c* si (*a*, *b*), (*b*, *c*) et (*a*, *c*) sont orthologues (génomes différents).

Version original de la BD COG

- Chaque groupe de gènes orthologues est un sous-graphe de G initialisé par un triangle auquel on ajoute les triangles ayant un coté en communs.

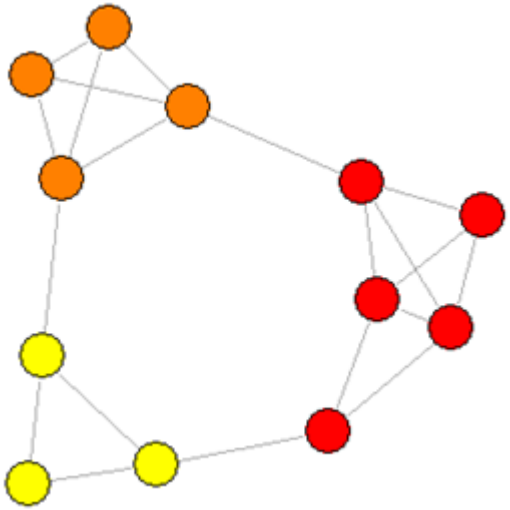
Groupes d'orthologues = communautés dans les graphes?



Combien de communautés?

Structure en communautés dans les graphes

- Graphes aléatoires :
  - la distribution des arêtes entre les sommets est très homogène.
- Dans les graphes réels (biologiques) :
  - forte hétérogénéité, traduisant une organisation complexe,
  - un grand nombre de sommets de faible degré coexistent avec un petit nombre de sommets de degré élevé
    - scale-free network, graphes dont les degrés des nœuds ~> loi de puissance.
- Cas des relations d'orthologies => structure en **communautés**.
- Exemple : un graphe avec trois communautés

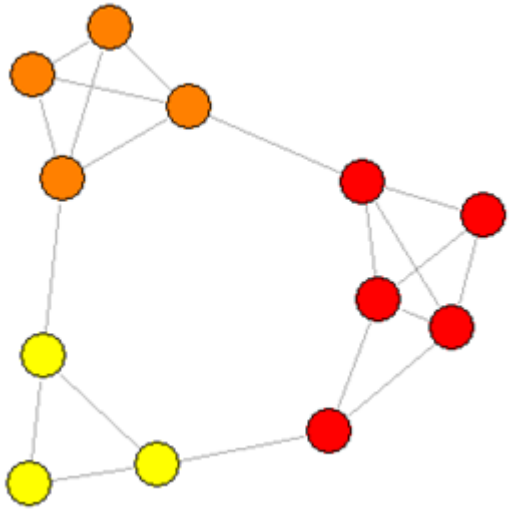


Sources : Fortunato and Castellano *Community structure in graphs. C*hapter in *Encyclopedia of Complexity and System Science* (2008)

- Approche basée sur les graphes :
  - Identifier des communautés uniquement sur la base de la topologie du graphe.

- Questions toujours débattues:
  - Quelle est le meilleur partitionnement d'un graphe en communautés?
  - Communautés chevauchantes ou non?
  - Une partition ou une organisation hiérarchique des partitions?
  - Comment comparer des partitions réalisées sur le même graphe?
  - Mesurer la qualité d'une partition?

- **Remarque**: Identifier des communautés n'est possible que si le graphe est peu dense.
- Intuitivement, une communauté se caractérise par une plus grande densité d'arêtes *intra* / *inter*.



- **Remarque**: Identifier des communautés n'est possible que si le graphe est peu dense.
- Intuitivement, une communauté se caractérise par une plus grande densité d'arêtes *intra* / *inter*.
- Trois façons de considérer le problème:
  - **localement**: focaliser sur les arêtes du voisinage immédiat.
    - Exemple, une communauté = sous graphe pour lequel chaque sommet à plus de voisins dans, qu'en dehors du sous graphe .
  - **globalement**: considérer le graph dans son ensemble.
    - On a recours à un modèle nul: un graphe aléatoire (pas de structure en communautés) pour estimer la qualité d'une partition.
      - Exemple, un graphe version randomisée du graphe original dans lequel les sommets conservent leur degré.
  - **similarité entre les sommets**: les communautés sont des groupes de sommets similaires. Reste à définir la similarité entre les sommets!

Evaluer la qualité d'une partition : modularité Q

- Problème : existe un grand nombre de partitions possibles!

Evaluer la qualité d'une partition : modularité Q

- Problème : existe un grand nombre de partitions possibles!

  - Utiliser des heuristiques et une fonction objective à minimiser ou maximiser
    - Un plus : estimer la **qualité de la partition** obtenue

Evaluer la qualité d'une partition : modularité Q

- Estimer la **qualité de la partition** obtenue

- La fonction de modularité *Q* (Newman et Girvan, 2004) est la plus populaire.

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

observé attendu

- avec
  - A_{ij} : matrice d'adjacence du graphe,
  - d_i : degré du sommet *i* (aussi noté *k*(*i*))
  - m : nombre total d'arêtes dans le graphe
- La fonction δ est égale à 1 si *i* et *j* appartiennent à la même communauté et 0 sinon.
  - Ainsi, seules les contributions provenant de sommets appartenant à la même communauté seront prises en compte.

Evaluer la qualité d'une partition : modularité Q

- D'où une autre formulation en fonction des liens dans la communauté:

$$Q = \sum_{s=1}^{n_m} \left[\frac{l_s}{m} - \left(\frac{d_s}{2m} \right)^2 \right]$$

- avec
  - n_m : le nombre de communautés dans le graphe
  - l_s : le nombre total d'arêtes dans la communauté *s*
  - m : le nombre total d'arêtes dans le graphe
  - d_s : la somme des degrés des sommets de la communauté *s*

Evaluer la qualité d'une partition : modularité Q

$$Q = \sum_{s=1}^{n_m} \left[\frac{l_s}{m} - \left(\frac{d_s}{2m} \right)^2 \right]$$

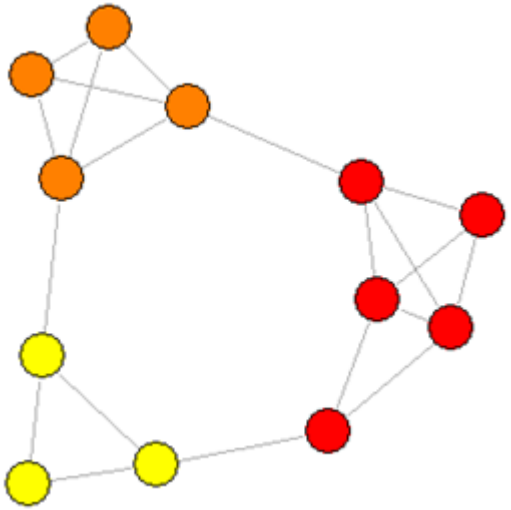
observé attendu

- Premier terme:
  - fraction d'arêtes **observées** dans la communauté *s*.
- Second terme,
  - fraction des arêtes **attendues** dans la communauté *s*, si le graphe était aléatoire, sous la contrainte de la conservation du degré des sommets.

  Un sommet peut être lié à n'importe quel autre sommet du graphe et la probabilité d'un lien entre deux sommets est proportionnel au produit de leur degré.

- Un écart important entre observé et attendu conduit à des valeurs positives *Q*, signalant une structure en communautés : $max(Q) = 1$.
- $Q \leq 0$, -> absence de structure.

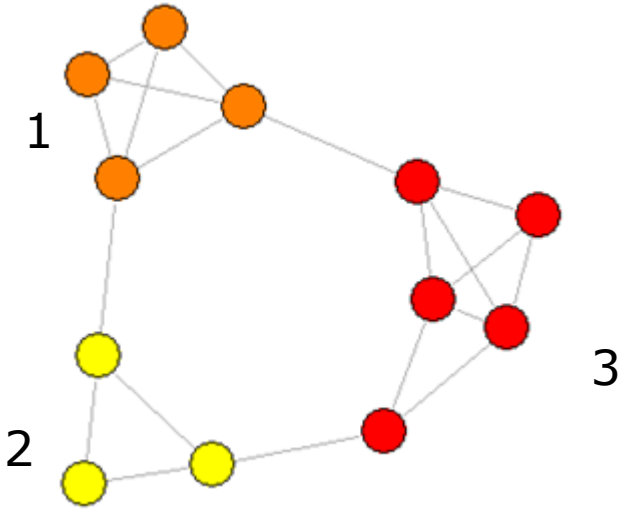
Exemple



Modularité de la partition?

$$Q = \sum_{s=1}^{n_m} \left[\frac{l_s}{m} - \left(\frac{d_s}{2m} \right)^2 \right],$$

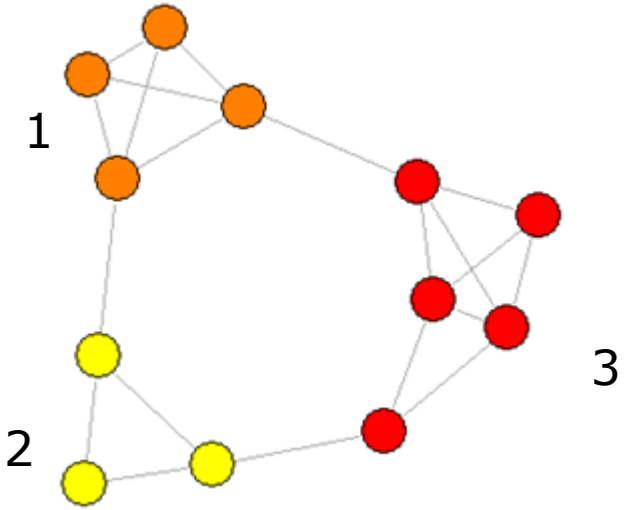
Exemple



Modularité de la partition?

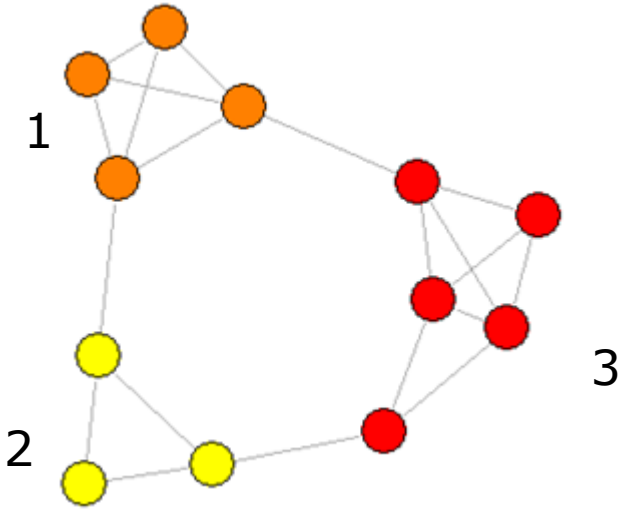
communauté	arêtes communautaires (l_s)	sommes des degrés (d_s)	l_s/m	$(d_s/2m)^2$	$l_s/m-(d_s/2m)^2$
1					
2					
3					
m					

Exemple



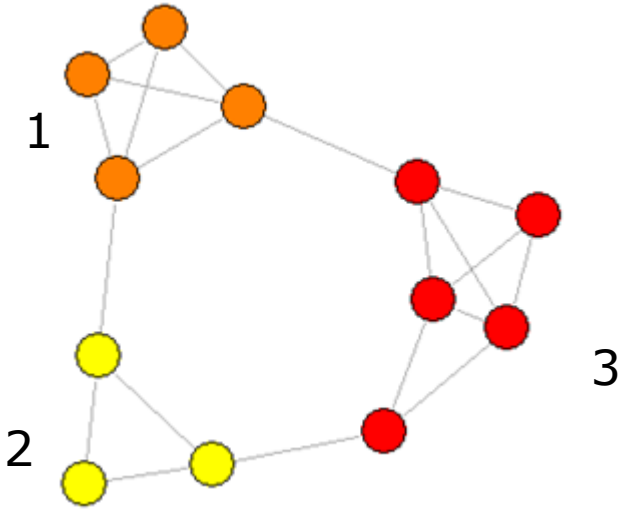
communauté	arêtes communautaires (l_s)	sommes des degrés (d_s)	l_s/m	$(d_s/2m)^2$	$l_s/m-(d_s/2m)^2$
1	6				
2	3				
3	8				
m	20				

Exemple



communauté	arêtes communautaires (l_s)	sommes des degrés (d_s)	l_s/m	$(d_s/2m)^2$	$l_s/m-(d_s/2m)^2$
1	6	14			
2	3	8			
3	8	18			
m	20				

Exemple



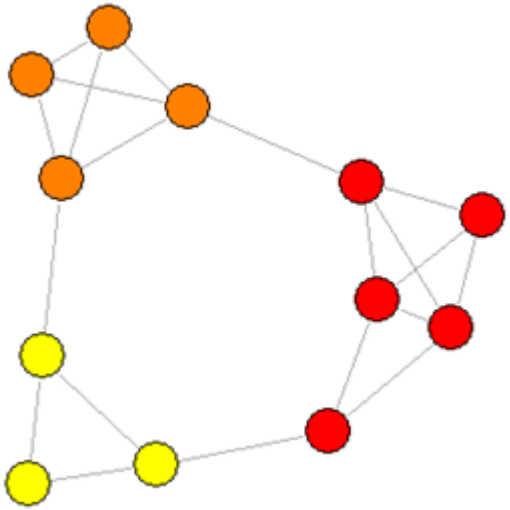
Modularité de la partition = 0.485

communauté	arêtes communautaires (l_s)	sommes des degrés (d_s)	l_s/m	$(d_s/2m)^2$	$l_s/m - (d_s/2m)^2$
1	6	14	0,3	0,1225	0,1775
2	3	8	0,15	0,04	0,11
3	8	18	0,4	0,2025	0,1975
					0,485
m	20				

Evaluer la qualité d'une partition : modularité Q

- Inconvénients de la modularité *Q*:
  - A partir de quelle valeur de *modularité* a t'on une structure en communautés dans le graphe?
    - Comme des graphes aléatoires peuvent avoir de grandes valeurs de *Q*, un graphe a une structure en communautés si sa modularité est significativement plus grande que celle de graphes aléatoires équivalents.
  - La *modularité Q* est sensible à la **taille du graphe**
    - ➢ pas comparable entre différents graphes.
  - Des graphes aléatoires peuvent avoir des modularités $\gg 0$.
  - **Mesure globale**, donc pas prise en compte d'hétérogénéités locales!

Méthodes?



Méthodes locales descendantes

- Première approche pour identifier des communautés (locale) :
  - détecter les arêtes qui **connectent** des sommets appartenant à des communautés différentes et les supprimer.
    - Simple, sauf que l'on ne connait pas les communautés!

Méthodes descendantes

- Première approche pour identifier des communautés:
  - détecter les arêtes qui connectent des sommets appartenant à des communautés différentes et les supprimer.
- Le point crucial est de définir une propriété qui caractérise les arêtes intercommunautaires (**centralité**).

Méthodes descendantes

- Première approche pour identifier des communautés:
  - détecter les arêtes qui connectent des sommets appartenant à des communautés différentes et les supprimer.
- Le point crucial est de définir une propriété qui caractérise les arêtes intercommunautaires (**centralité**).

- Remarque: ces méthodes sont, par construction, **hiérarchiques descendantes** (partitions représentées par un dendrogramme).

- Principe:
  1. Calculer la centralité de chaque arête.
  2. Supprimer l'arête de plus grande centralité.
  3. Recalculer la centralité des arêtes de chaque sous-graphes.
  4. Répéter l'étape 2 jusqu'à #communautés > seuil fixé par l'utilisateur.

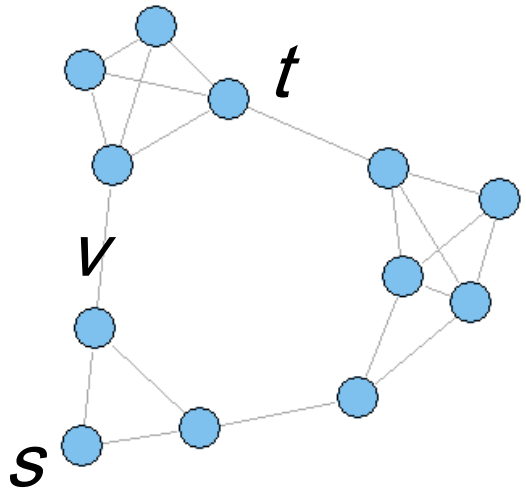
Exemple: Edge-betweenness (Girvan et Newman 2002).

- *Betweenness* : mesure de centralité.

betweenness d'une arête: somme sur les paires de sommets,

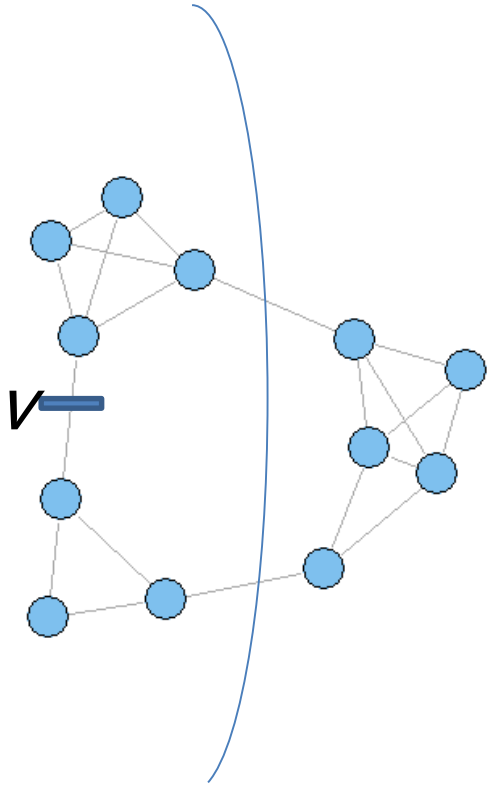
- du nombre de chemins les plus courts entre les sommets *s* et *t* qui passent par cette arête *v*: $\sigma_{st}(v)$
- divisé par le nombre total de de chemins les plus courts entre les sommets *s* et *t* : σ_{st}

$$g(v) = \sum_{s \neq v \neq t} \frac{\sigma_{st}(v)}{\sigma_{st}}$$

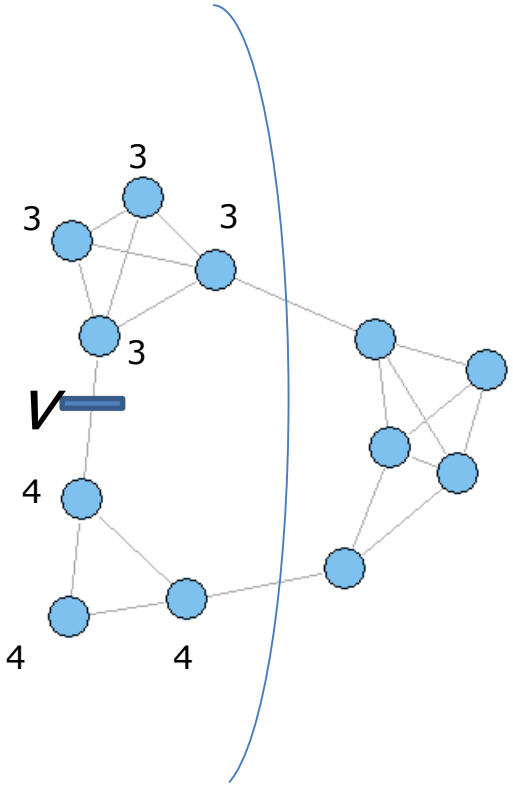


- La modularité *Q* peut être utilisée pour sélectionner la meilleur partition.

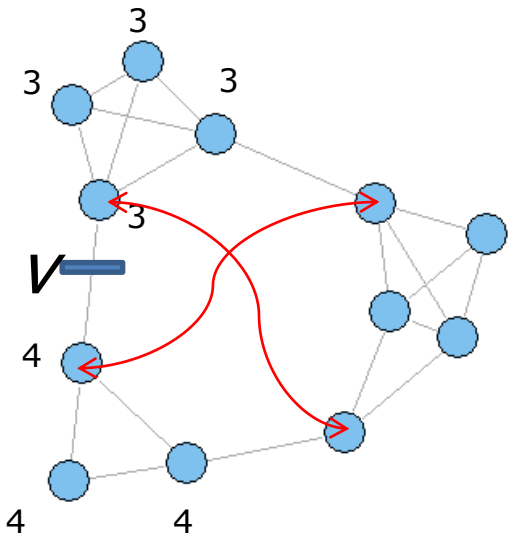
Nombre de chemins les plus courts entre les sommets *s* et *t* qui passent par l'arête *v* ?



Nombre de chemins les plus courts entre les sommets *s* et *t* qui passent par cette arête ?

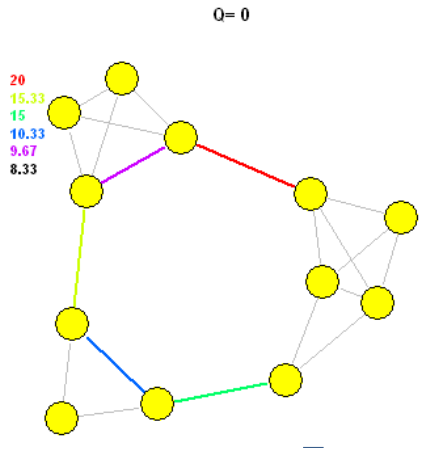


Arête de plus grande betweenness ?



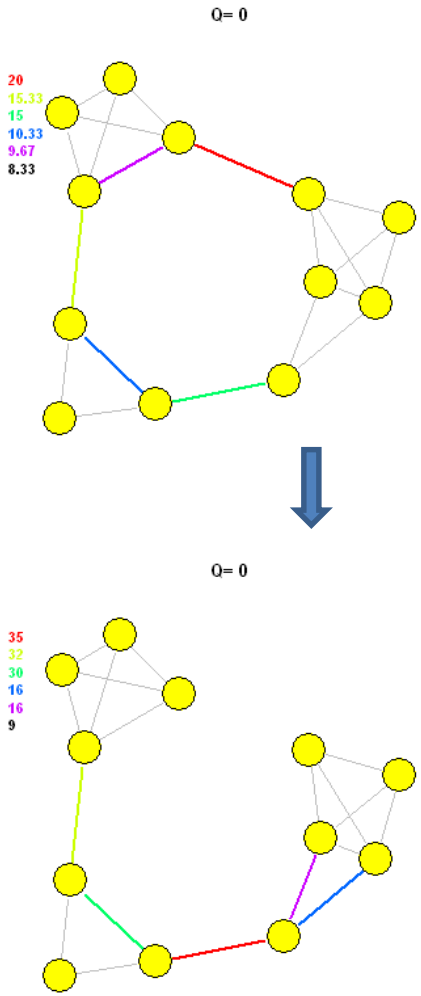
Edgebetweenness, déroulement pas à pas

- Les *betweenness* des arêtes sont triées par ordre décroissant de betweenness.
- 20, 15.33, 15, 10.33, 9.676, 8.33…



Edgebetweenness, déroulement pas à pas

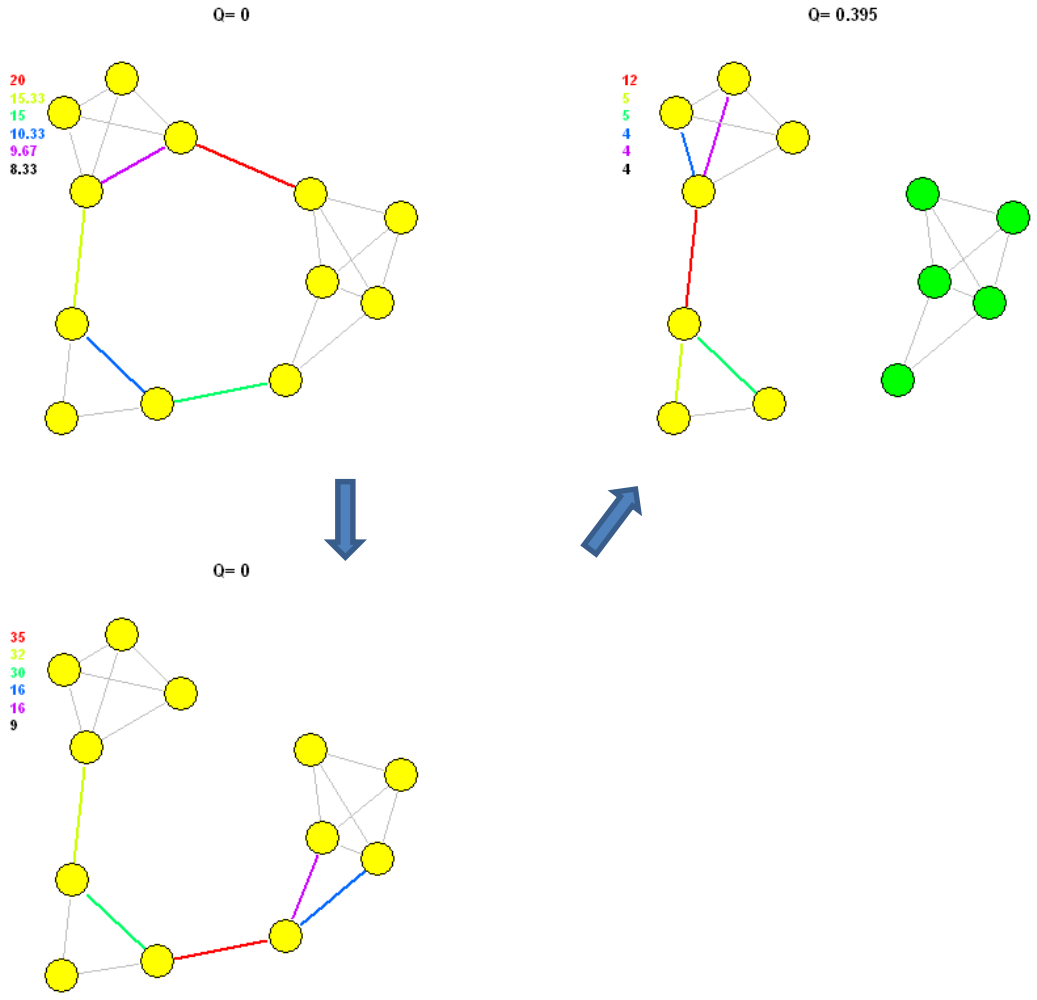
- les *betweenness* des arêtes sont triées par ordre décroissant.



- Suppression de l'arête de plus grande betweenness,
- mise à jour de la betweenness.

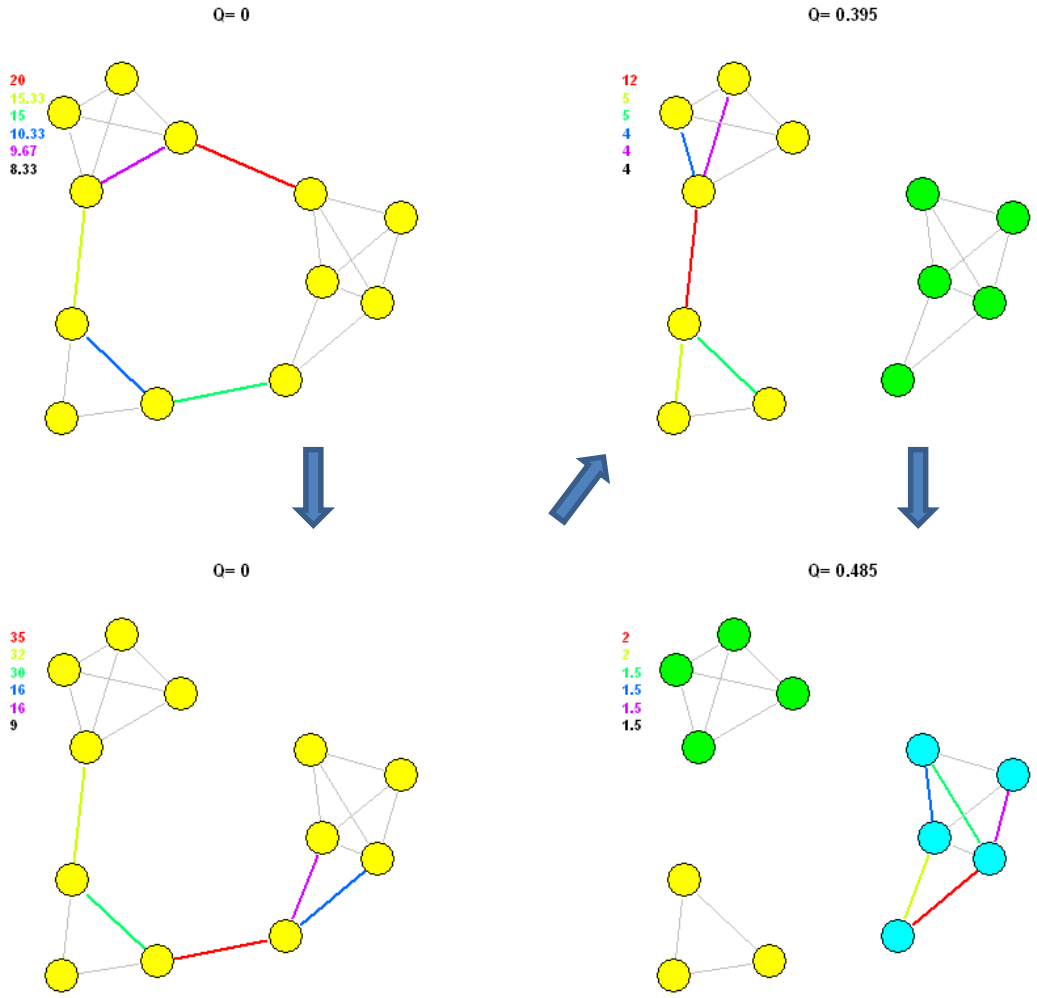
Edgebetweenness, déroulement pas à pas

- On peut suivre l'évolution de Q.



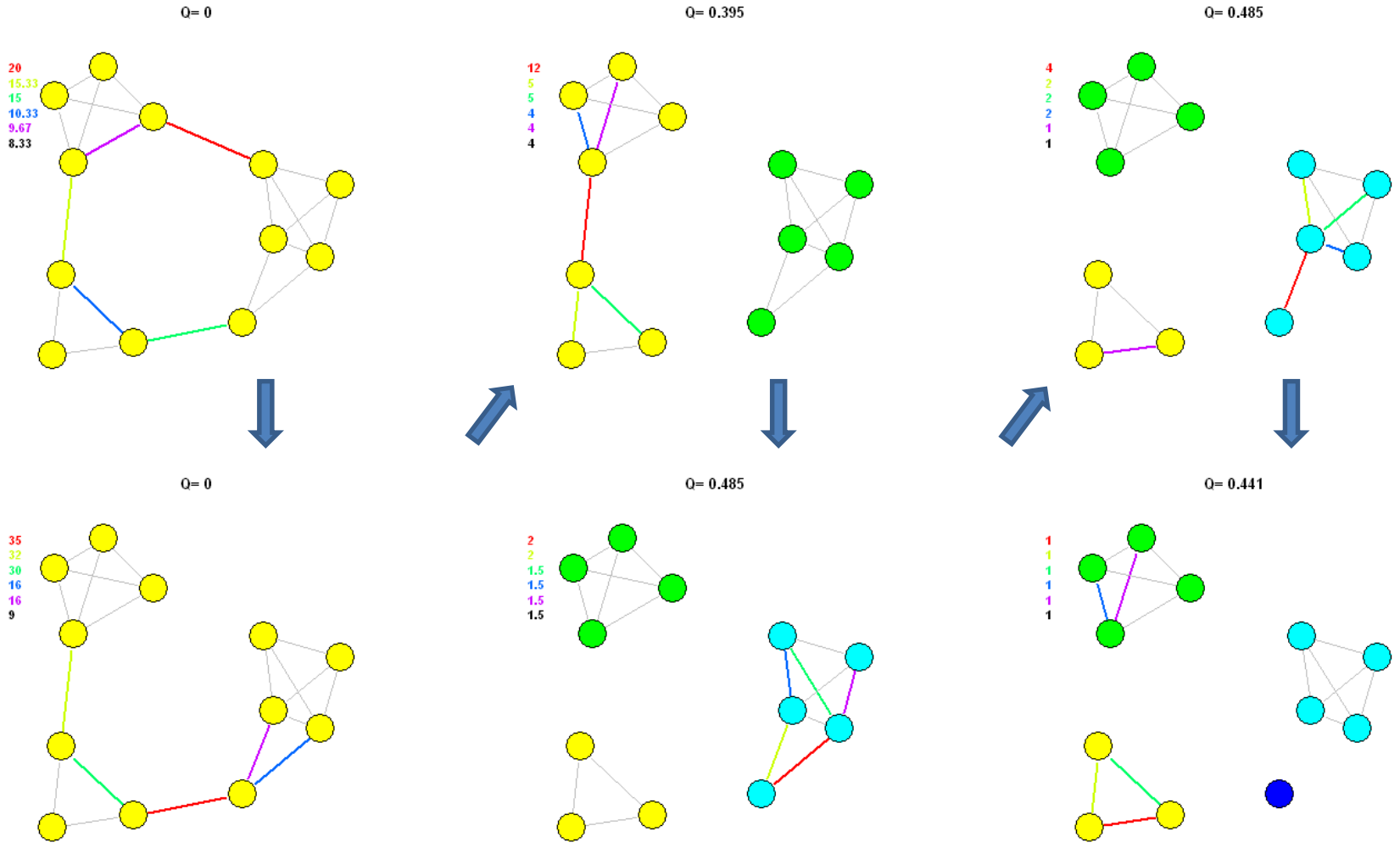
Edgebetweenness, déroulement pas à pas

- On peut suivre l'évolution de Q.



Edgebetweenness, déroulement pas à pas

- On peut suivre l'évolution de Q.



Méthodes : optimisation de la modularité

Méthodes : optimisation de la modularité

Si la modularité *Q* est un bon indicateur de la qualité d'une partition, alors la partition qui maximise *Q* doit être la meilleur!

- Problème: maximiser *Q* est impossible pour la grande majorité des graphes => approximations en un temps raisonnable.

- Méthode **hiérarchique ascendante** (agglomérative)
  - Exemple: Fastgreedy (Newman, 2004)

Méthodes : Fastgreedy

Algorithme

1. *n* communautés (une communauté = 1 sommet), pas d'arête, *Q*=0,
2. addition de l'arête qui maximise l'augmentation de *Q* -> *n*-1 communautés,
3. addition des arêtes qui ne changent pas *Q* (arêtes intra-communautés)
4. répéter les étapes 2-3 jusqu'à obtenir tous les sommets dans une seule communauté.

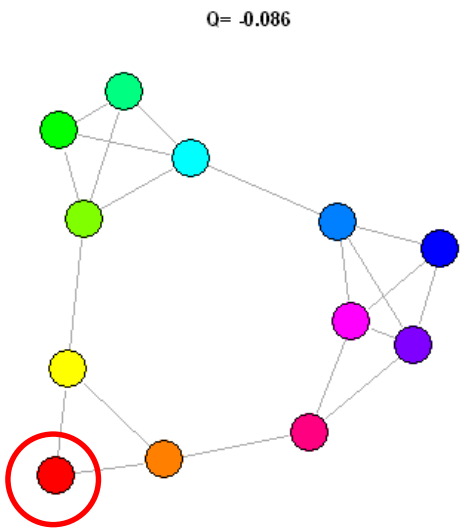
- Avantages:

  simplicité et rapidité (grâce à des heuristiques!),

  traitement de graphes de très grande taille.

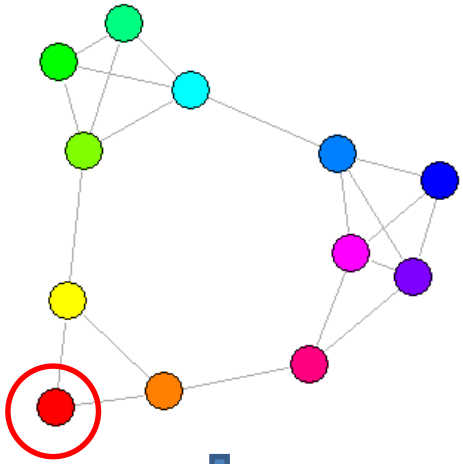
- Inconvénients majeurs:
  1. *Q* peut s'écarter de l'optimum (séquentiel),
  2. *Q* est estimée sur la globalité du graphe.

Fastgreedy, déroulement pas à pas

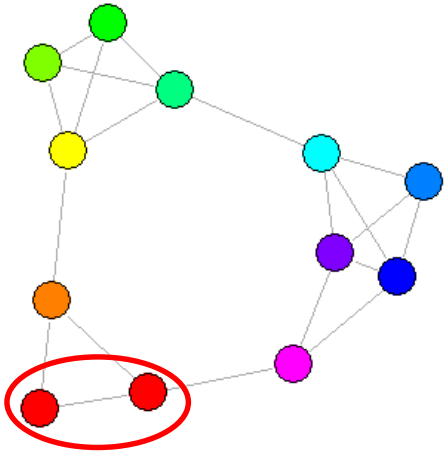


Fastgreedy, déroulement pas à pas

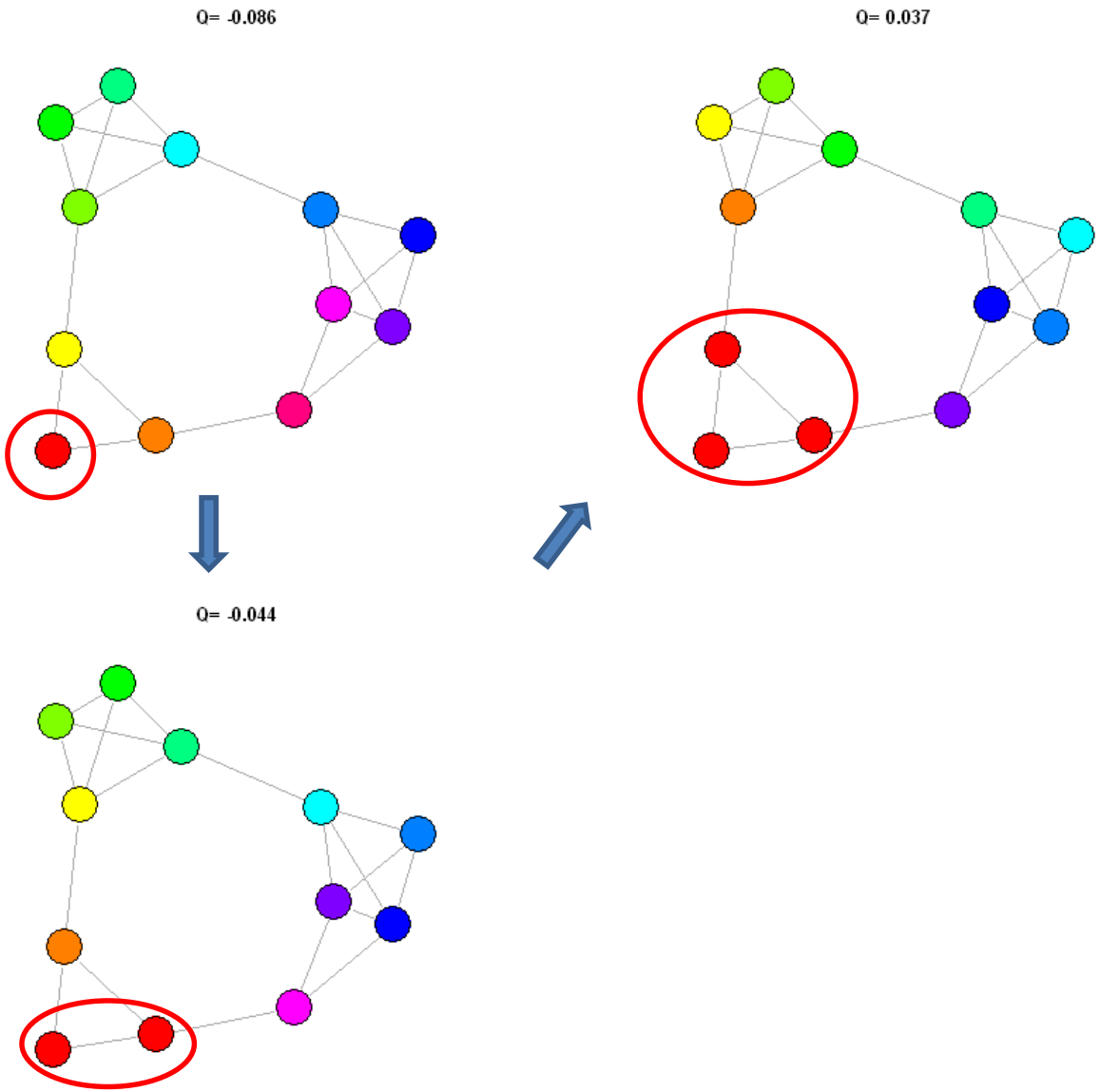
Q= -0.086



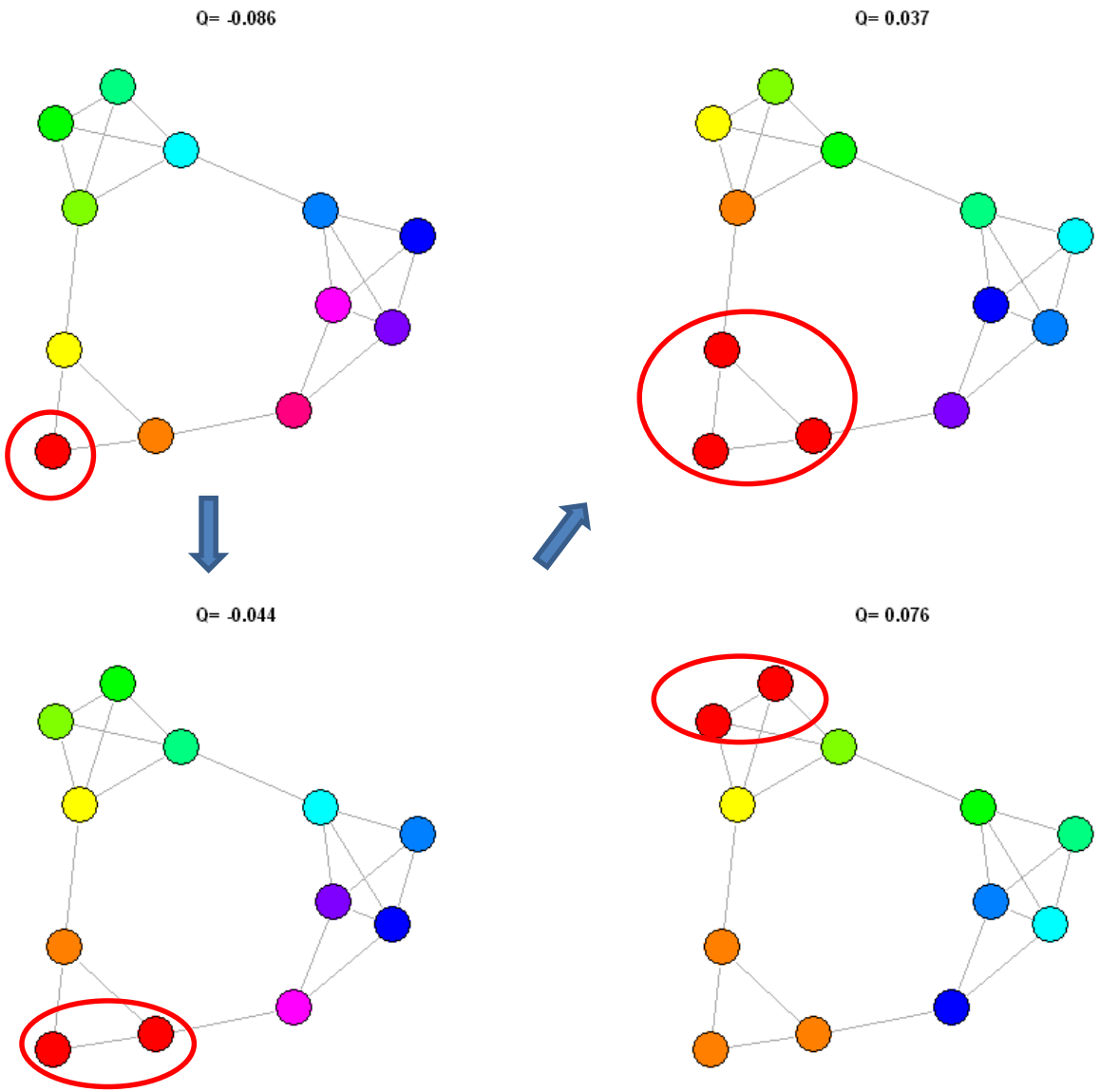
Q= -0.044



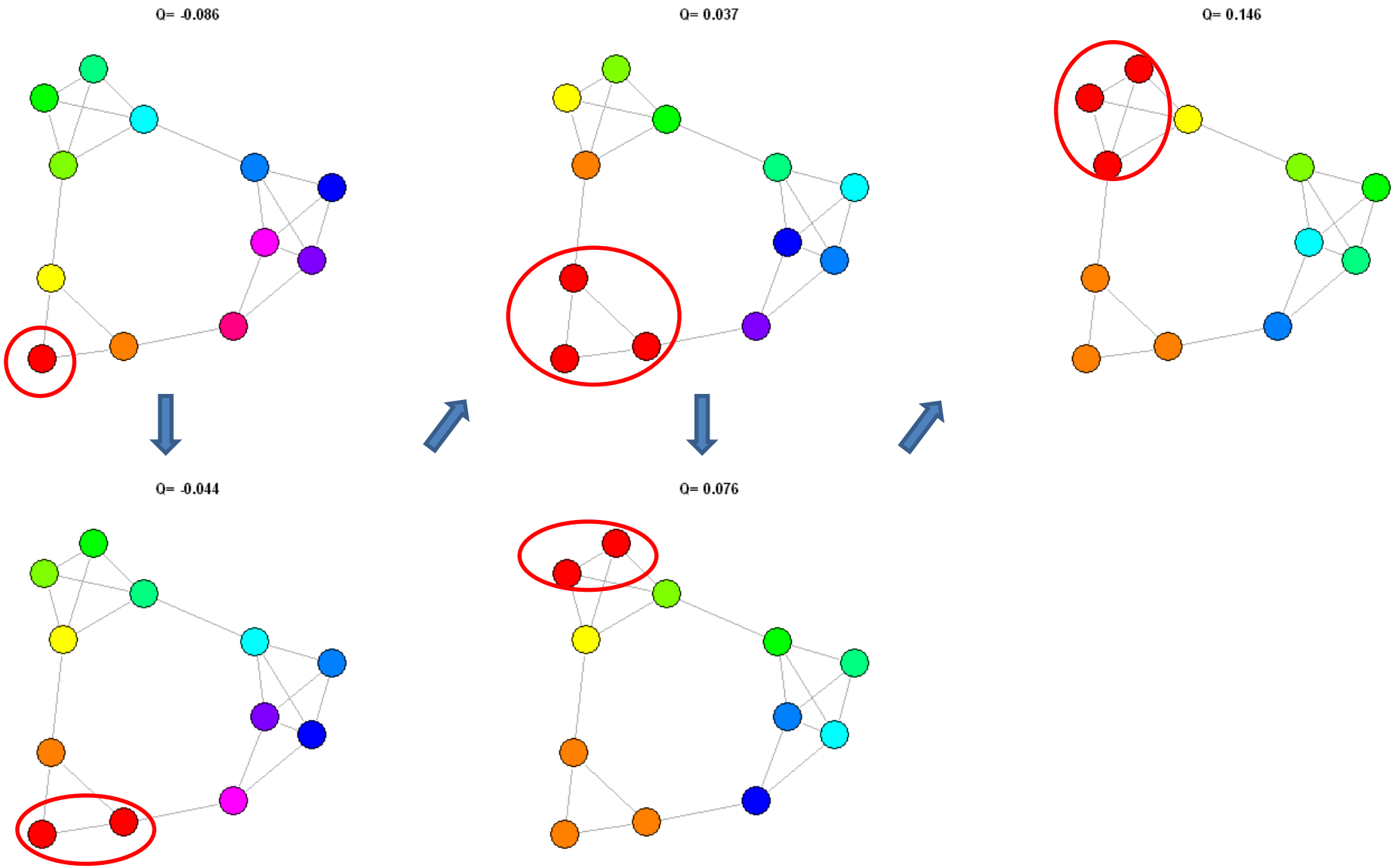
Fastgreedy, déroulement pas à pas



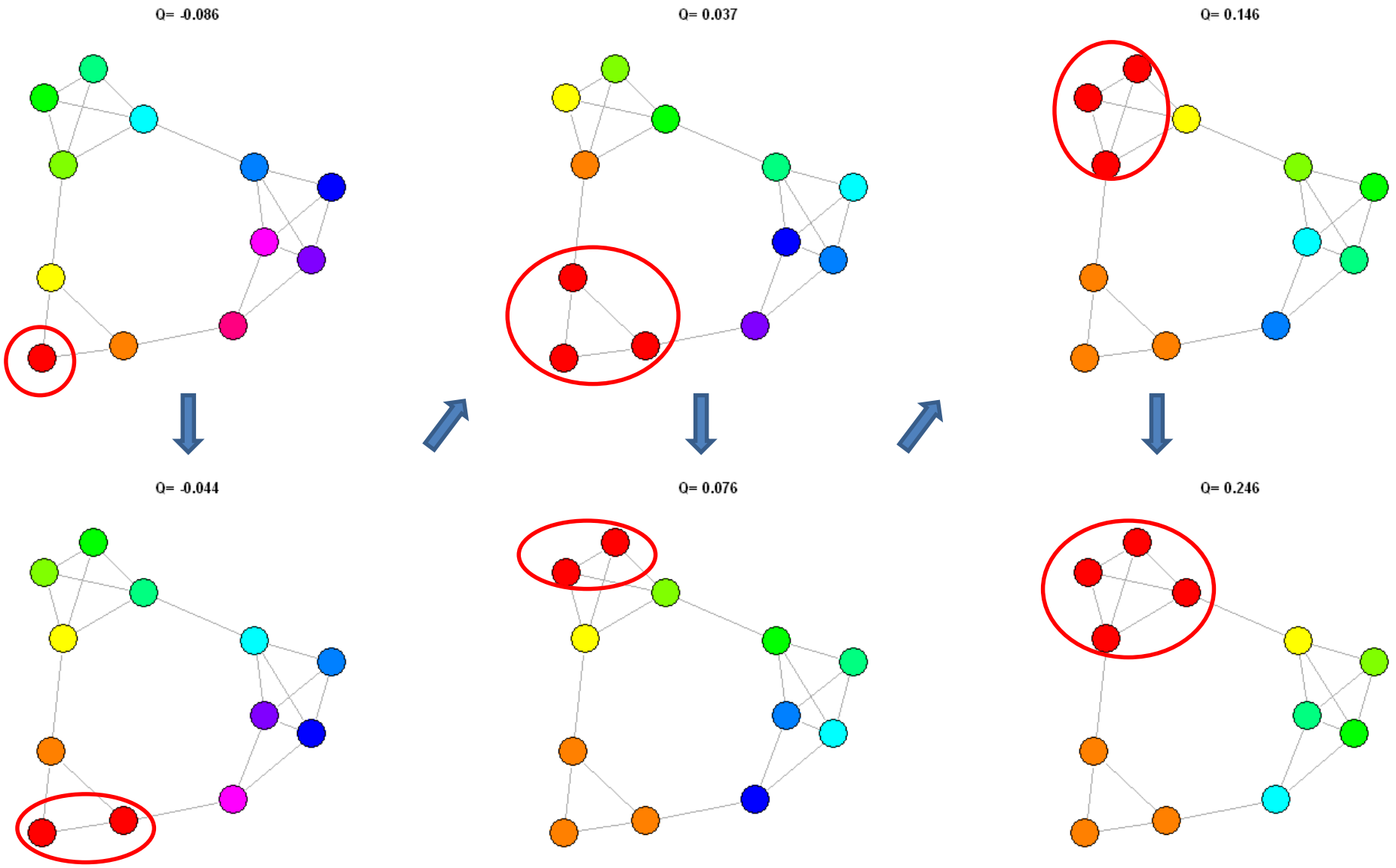
Fastgreedy, déroulement pas à pas



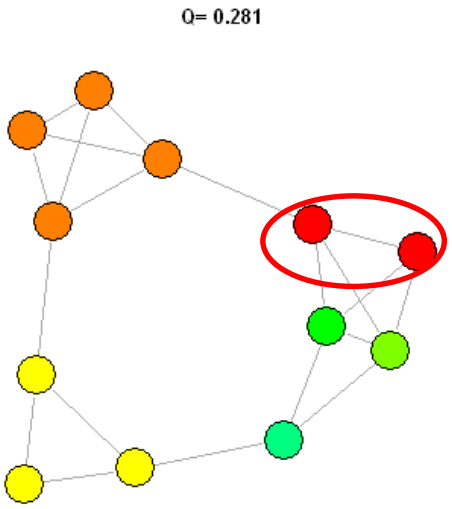
Fastgreedy, déroulement pas à pas



Fastgreedy, déroulement pas à pas

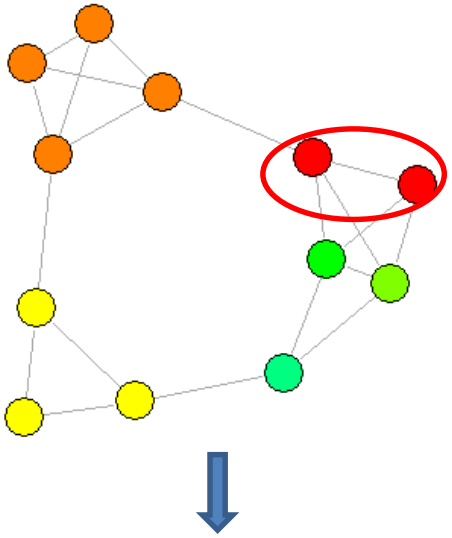


Fastgreedy, déroulement pas à pas

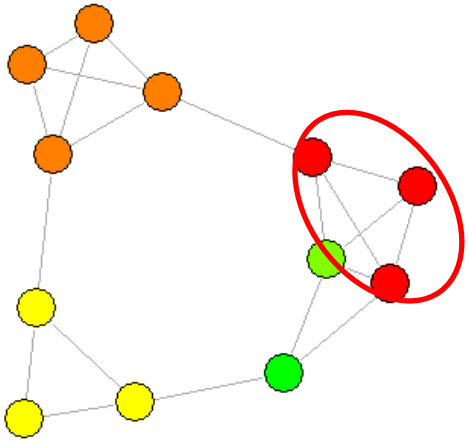


Fastgreedy, déroulement pas à pas

Q= 0.281

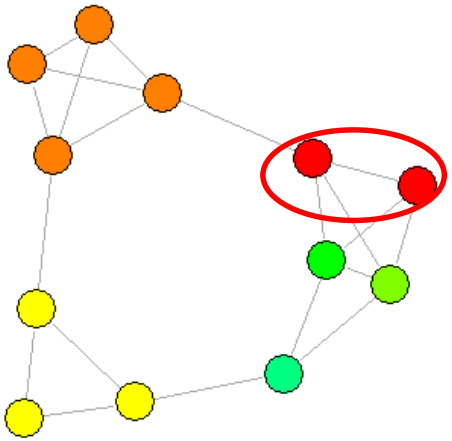


Q= 0.346

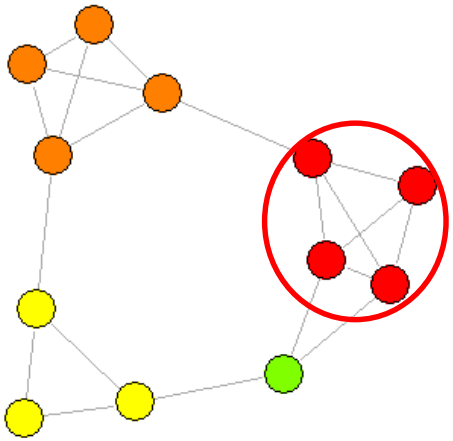


Fastgreedy, déroulement pas à pas

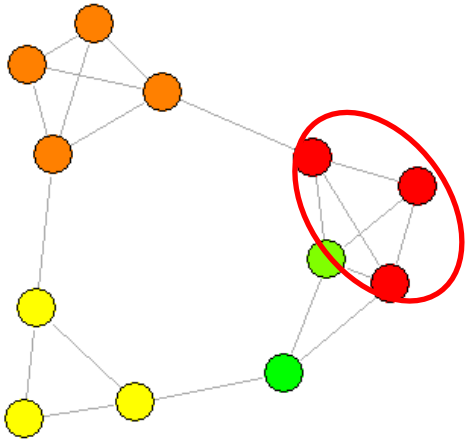
Q= 0.281



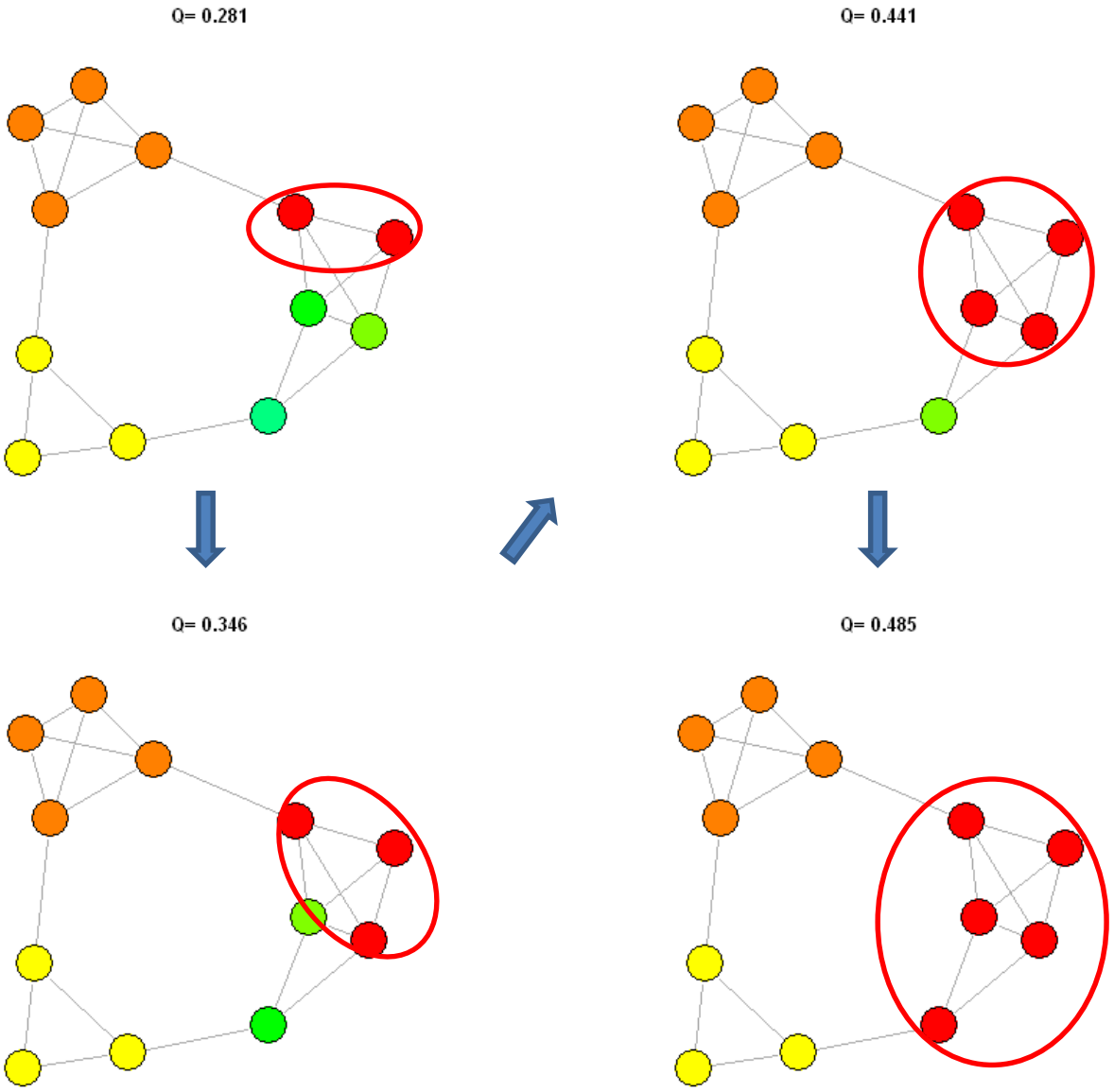
Q= 0.441



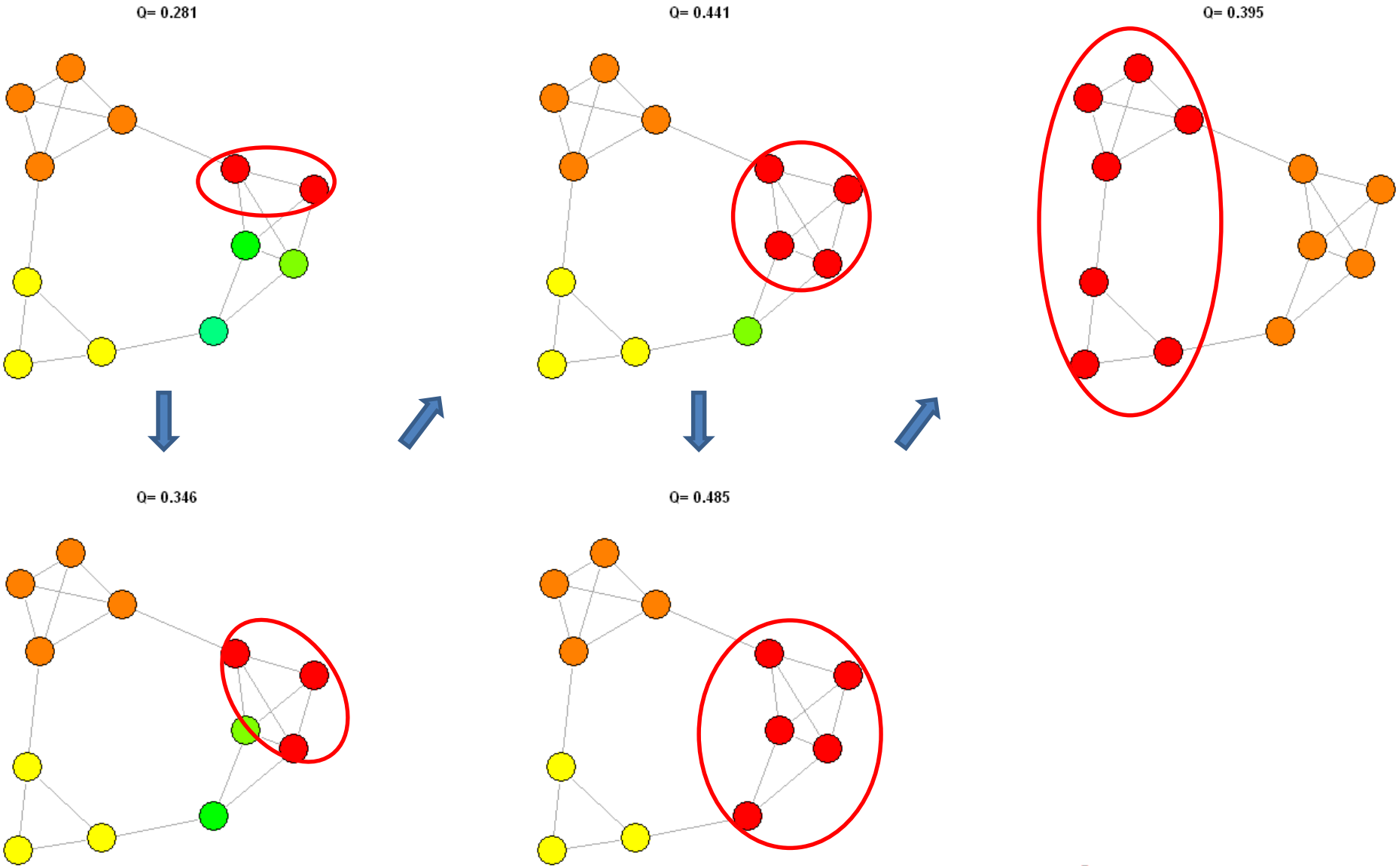
Q= 0.346



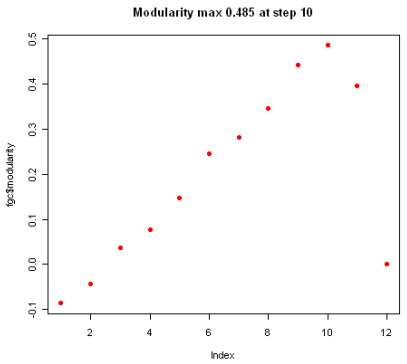
Fastgreedy, déroulement pas à pas



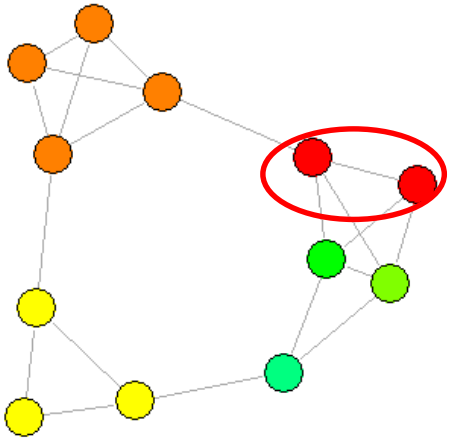
Fastgreedy, déroulement pas à pas



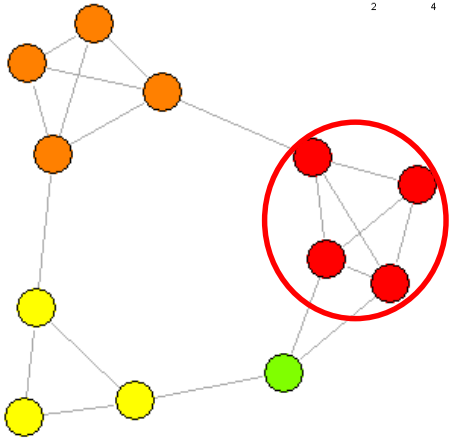
Fastgreedy, déroulement pas à pas



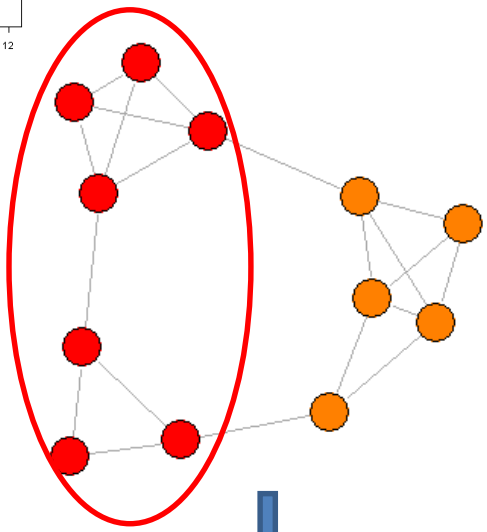
Q= 0.281



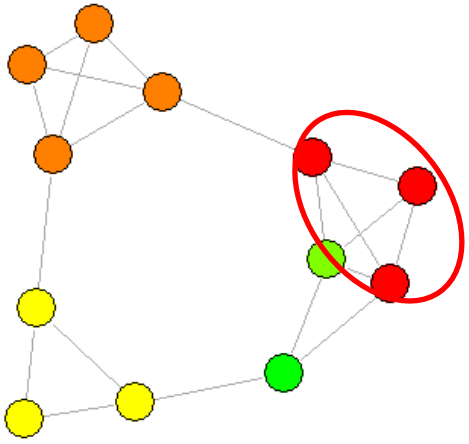
Q= 0.441



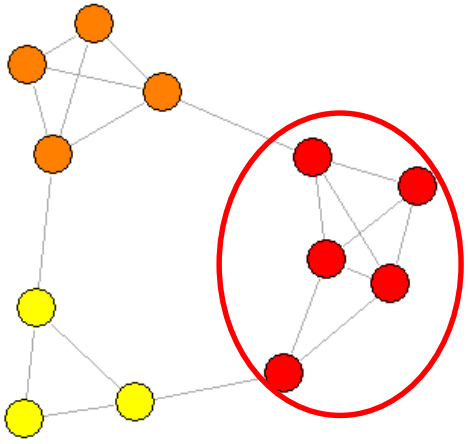
Q= 0.395



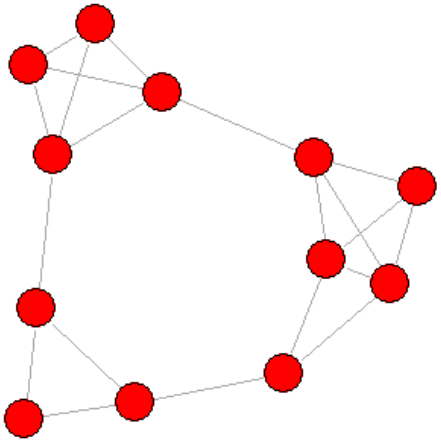
Q= 0.346



Q= 0.485



Q= 0



Méthodes : alternatives

Méthodes : alternatives

- Méthode probabiliste d'optimisation d'une fonction *F*.

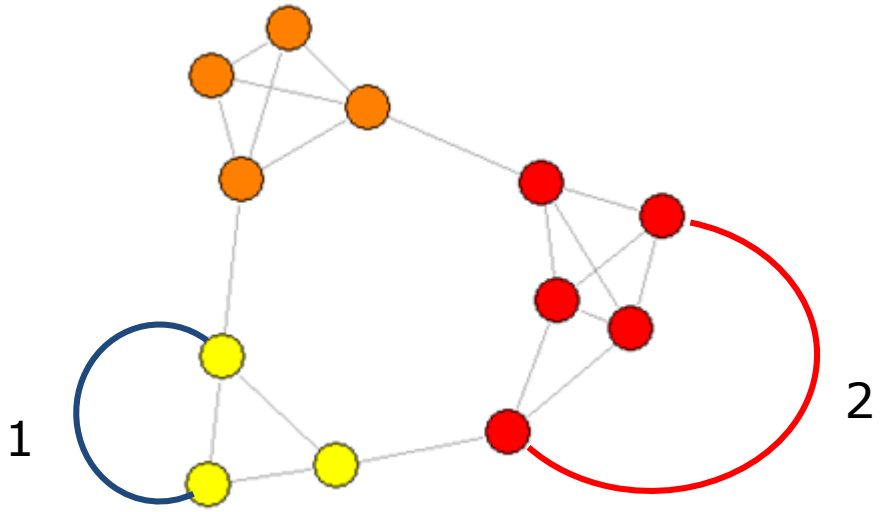
- Deux types de mouvements sont pris en compte:
  1. mouvements locaux, où un seul sommet est déplacé d'une communauté à l'autre, communauté prise au hasard,
  2. mouvements globaux, fusion/fission de communautés.

- Donne de très bon résultats mais au dépend de temps de calculs prohibitifs pour les gros graphes.

Méthodes : Hamiltonian

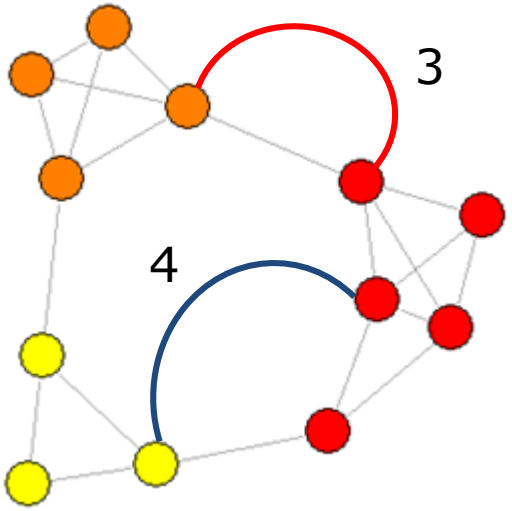
- Une **fonction de qualité** pour l'assignement des sommets à une communauté doit suivre un principe simple:
  - grouper ensemble les sommets qui sont liés et séparer ceux qui ne le sont pas!
- Reichardt et Bornholdt proposent 4 contraintes:

- Une fonction de qualité pour l'assignement des nœuds à une communauté doit suivre un principe simple:
  - grouper ensemble les sommets qui sont liés et séparer ceux qui ne le sont pas!
- Reichardt et Bornholdt proposent 4 contraintes:
  1. gratifier les arêtes internes entre sommets de la même communauté,
  2. pénaliser les arêtes absentes entre sommets de la même communauté,



Méthodes : Hamiltonian

- Une fonction de qualité pour l'assignement des nœuds à une communauté doit suivre un principe simple:
  - grouper ensemble les sommets qui sont liés et séparer ceux qui ne le sont pas!
- Reichardt et Bornholdt proposent 4 contraintes:
  1. gratifier les arêtes internes entre sommets de la même communauté,
  2. pénaliser les arêtes absentes entre sommets de la même communauté,
  3. pénaliser les arêtes entre sommets de communautés différentes,
  4. gratifier les arêtes absentes entre sommets de communautés différentes.



- D'où la fonction suivante:

$$H\left(\{\sigma\}\right) = -\sum_{i \neq j} a_{ij} A_{ij} \delta\left(\sigma_i, \sigma_j\right) + \sum_{i \neq j} b_{ij} \left(1 - A_{ij}\right) \delta\left(\sigma_i, \sigma_j\right)$$
$$+ \sum_{i \neq j} c_{ij} A_{ij} \left(1 - \delta\left(\sigma_i, \sigma_j\right)\right) - \sum_{i \neq j} d_{ij} \left(1 - A_{ij}\right) \left(1 - \delta\left(\sigma_i, \sigma_j\right)\right)$$

$$H\left(\{\sigma\}\right) = -\text{ internal links } + \text{ internal non-links}$$
$$+ \text{ external links } - \text{ external non-links}$$

- Où A_{ij} est la matrice d'adjacence de G,
- $\sigma_i \in \{1, 2, 3, \ldots, q\}$ sont les index des groupes de sommets *i* dans G
- a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, d_{ij} sont les poids des différentes contributions.
- La fonction δ est égale à 1 si *i* et *j* appartiennent à la même communauté et 0 sinon.

Hamiltonian, simplification de H

Simplifications:

- Si les liens intra et inter ont le même poids, $a_{ij} = c_{ij}$ et $b_{ij} = d_{ij}$

  alors il suffit de considérer les liens intra et les liens absents.

- Il reste à choisir a_{ij} et b_{ij}. Un choix pratique est de les exprimer en fonction de la probabilité p_{ij} qu'un lien existe entre les sommets *i* et *j*.

$$a_{ij} = 1-\gamma p_{ij} \text{ et } b_{ij} = \gamma p_{ij},$$

- Simplification de *H*:

$$H(\{\sigma\}) = -2\sum_{i\neq j}(A_{ij} - \gamma p_{ij})\delta(\sigma_i, \sigma_j) + \sum_{i\neq j} A_{ij} - \sum_{i\neq j} \gamma P_{ij}$$

et avec

$$p_{ij} = \frac{d_i d_j}{2M}$$

M : nombre total d'arêtes dans le graphe et $\gamma = 1$

$$H(\{\sigma\}) = -2\sum_{i\neq j}\left(A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2M}\right)\delta(\sigma_i, \sigma_j)$$

- Relation avec la modularité Q ?

Méthodes : relation entre Hamiltonian et *Q*

- Relation entre Hamiltonian et modularité *Q?*
- *Si* $\gamma = 1$:

$$H(\{\sigma\}) = -2\sum_{i\neq j}\left(A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2M}\right)\delta(\sigma_i, \sigma_j)$$

- On a vu que l'on peut écrire la modularité *Q* d'une façon légèrement différente:

$$Q = \frac{1}{2M}\sum_{i\neq j}\left(A_{ij-}\frac{d_i d_j}{2M}\right)\delta(\sigma_i, \sigma_j)$$

- Ainsi:

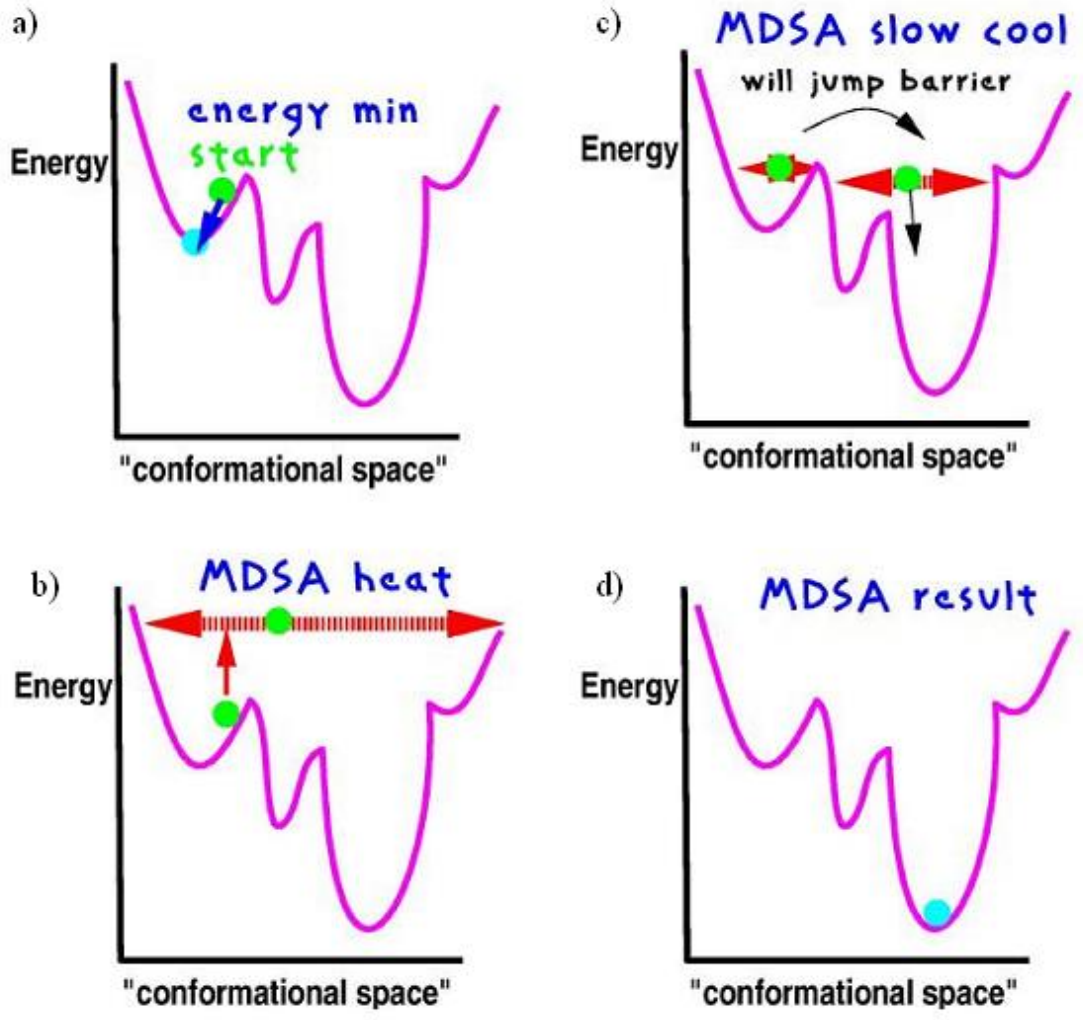
$$Q = -\frac{1}{M}H(\{\sigma\})$$

- **Maximiser *Q* revient à minimiser *H*.**
- Méthode de recuit simulé est utilisée pour optimiser l'assignement des sommets aux groupes.

Méthode de recuit simulé

Méthode de recuit simulé = alternances de cycles de refroidissement lent et de réchauffage qui ont pour effet de minimiser l'énergie du système,

->permet de trouver les configurations qui minimisent la fonction *H* (Metropolis-Hastings).



Méthode de recuit simulé

- Une température initiale permet de fixer le **nombre de sommets** qui vont pouvoir changer de communauté.
- Le système est alors refroidi pas à pas, jusqu'à un seul fixé ou s'il n'y a plus de changement possible.
  - A chaque pas,
    - si un changement améliore la fonction, il est conservé,
    - si non, il est retenu avec une petite probabilité.

Cette procédure est non-hiérarchique et non-déterministe. Elle peut conduire à différentes solutions.

Méthode de recuit simulé

- Une température initiale permet de fixer le nombre de sommets qui vont pouvoir changer de communauté.

- Le système est alors refroidi pas à pas, jusqu'à un seul fixé ou s'il n'y a plus de changement observé.
  - A chaque pas,
    - si un changement améliore la fonction, il est conservé,
    - si non, il est retenu avec une petite probabilité.

Cette procédure est non-hiérarchique et non-déterministe. Elle peut conduire à différentes solutions.

En répétant la procédure plusieurs fois, il est alors possible d'identifier les solutions les plus stables (fréquentes).

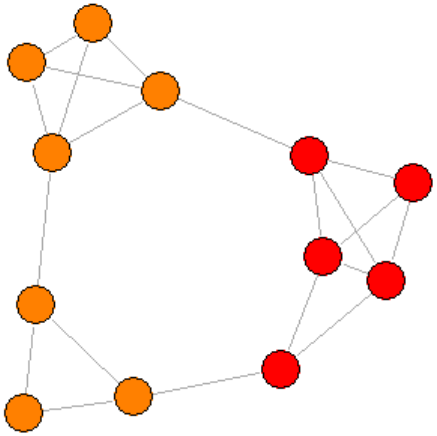
- Un critère peut être la fréquence des pairs de sommets dans les différentes solutions.

- Le paramètre **gamma** permet de pondérer l'importance de la présence/absence d'arêtes dans une communauté.
  - La valeur par défaut, 1.0 donne une importance égale aux deux types de liens.
  - Les plus petites valeurs donnent aux liens observés une plus grande importance qu'aux liens manquants.

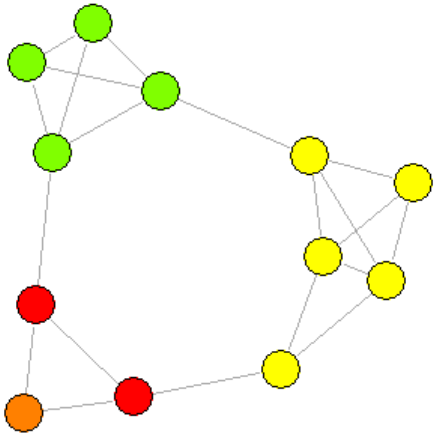
- Le choix de ce paramètre peut être difficile *a priori*, une solution est d'expérimenter une plage de valeurs et de retenir la solution qui minimise *H*.

Spinglass: itérations avec valeurs du paramètre gamma différentes

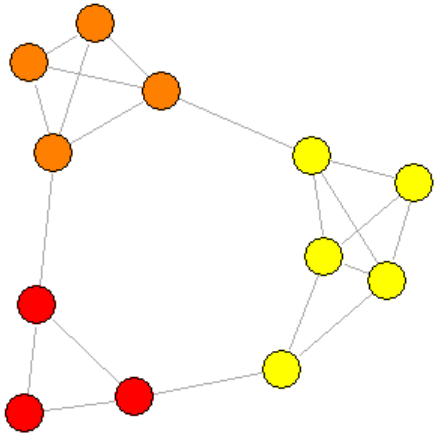
Q= 0.395 gamma= 0.1



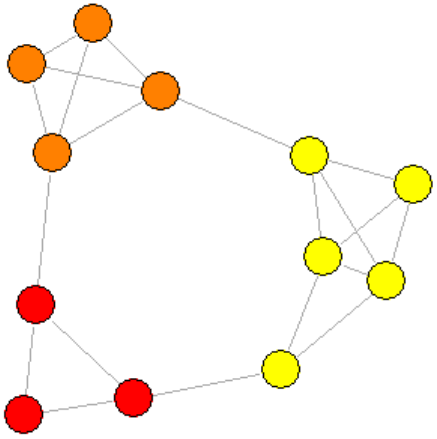
Q= 0.4 gamma= 0.4



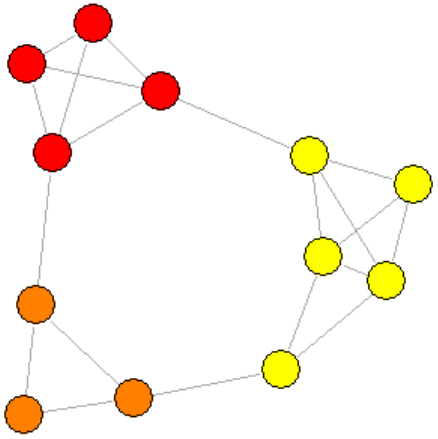
Q= 0.485 gamma= 1



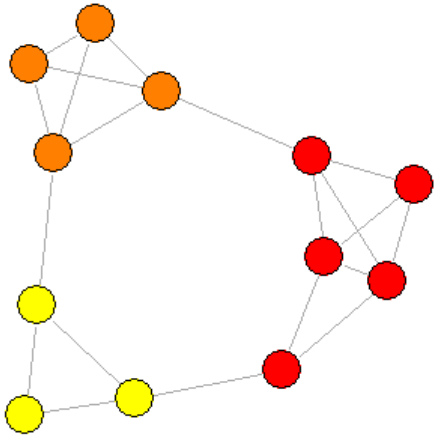
Q= 0.485 gamma= 0.2



Q= 0.485 gamma= 0.6

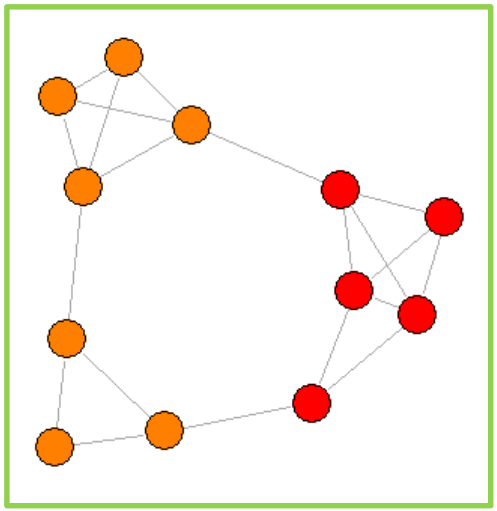


Q= 0.485 gamma= 1.2

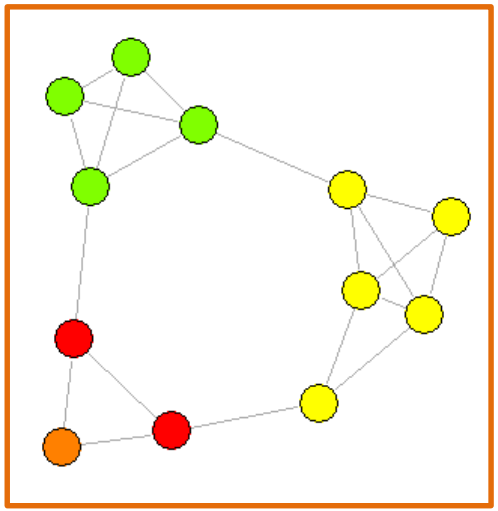


Spinglass: itérations avec valeurs du paramètre gamma différentes

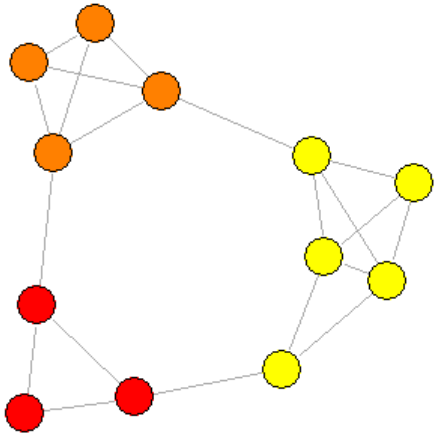
Q= 0.395 gamma= 0.1



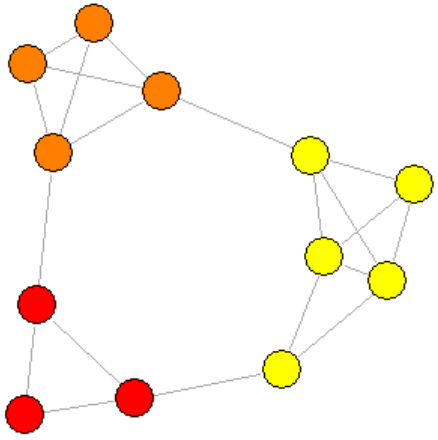
Q= 0.4 gamma= 0.4



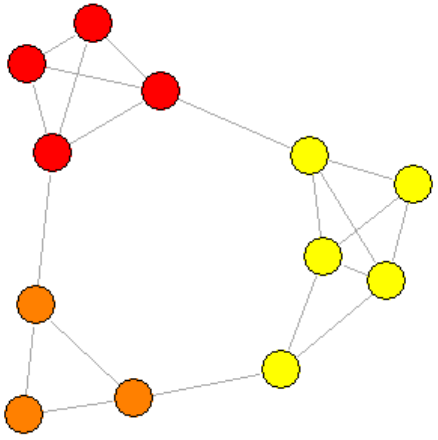
Q= 0.485 gamma= 1



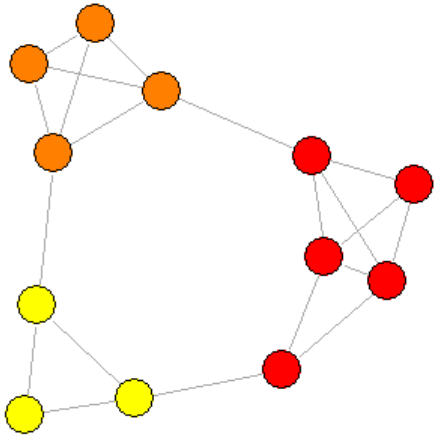
Q= 0.485 gamma= 0.2



Q= 0.485 gamma= 0.6

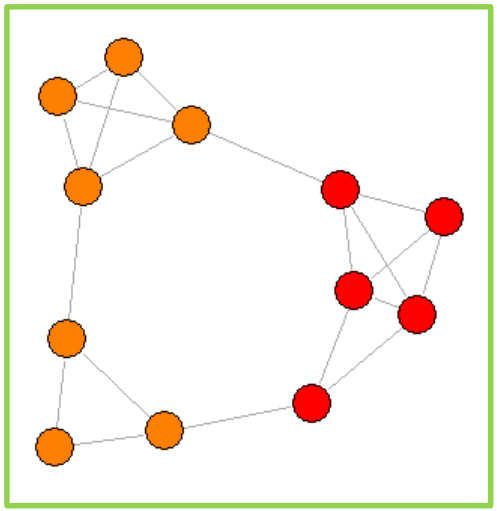


Q= 0.485 gamma= 1.2

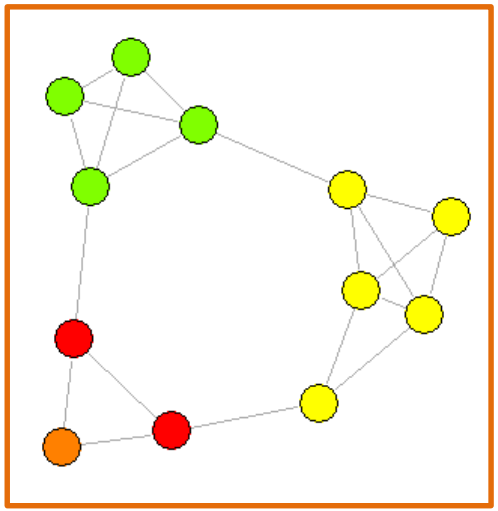


Spinglass: itérations avec valeurs du paramètre gamma différentes

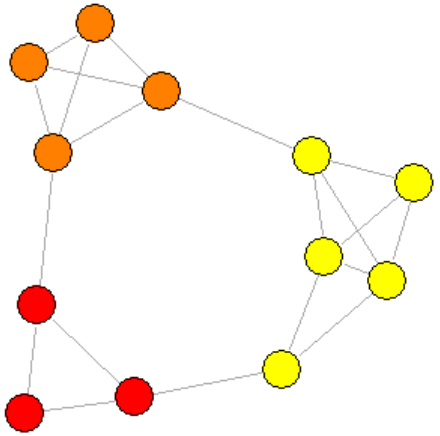
Q= 0.395 gamma= 0.1



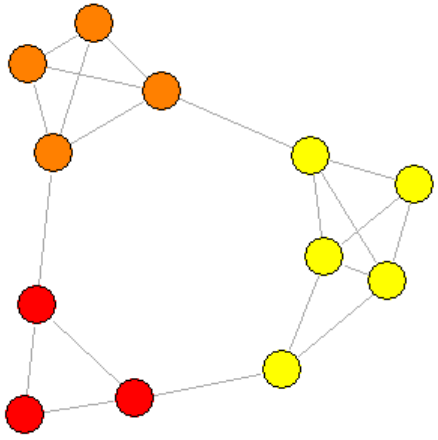
Q= 0.4 gamma= 0.4



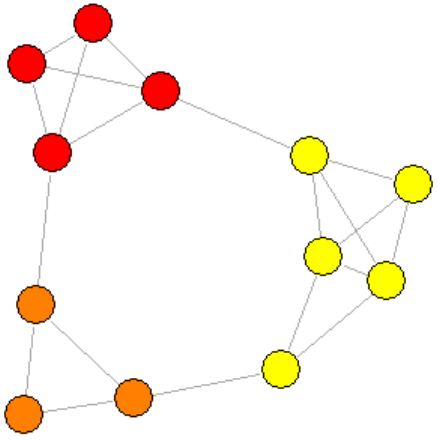
Q= 0.485 gamma= 1



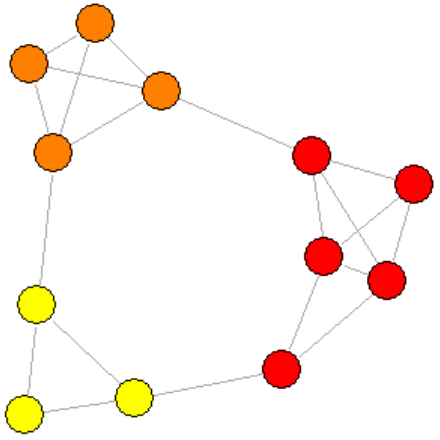
Q= 0.485 gamma= 0.2



Q= 0.485 gamma= 0.6



Q= 0.485 gamma= 1.2



Algorithme de Louvain : simple et élégant (Blondel *et al.*, 2008).

Combine l'approche hiérarchique de fastgreedy et le déplacement local des nœuds de spinglass.

L'algorithme part d'une partition singleton, dans laquelle chaque nœud se trouve dans sa propre communauté.

L'algorithme optimise la modularité en deux phases élémentaires :

1. le déplacement local des nœuds,

   les nœuds sont déplacés vers la communauté qui produit la plus grande augmentation de Q.

2. l'agrégation du réseau.

   un réseau agrégé est créé sur la base de la partition P obtenue dans la phase de déplacement local. Chaque communauté devient un nœud du réseau agrégé.

Les deux phases sont répétées jusqu'à ce que Q ne puisse plus être augmentée.

Méthodes : Louvain

Algorithme de Louvain : simple et élégant.

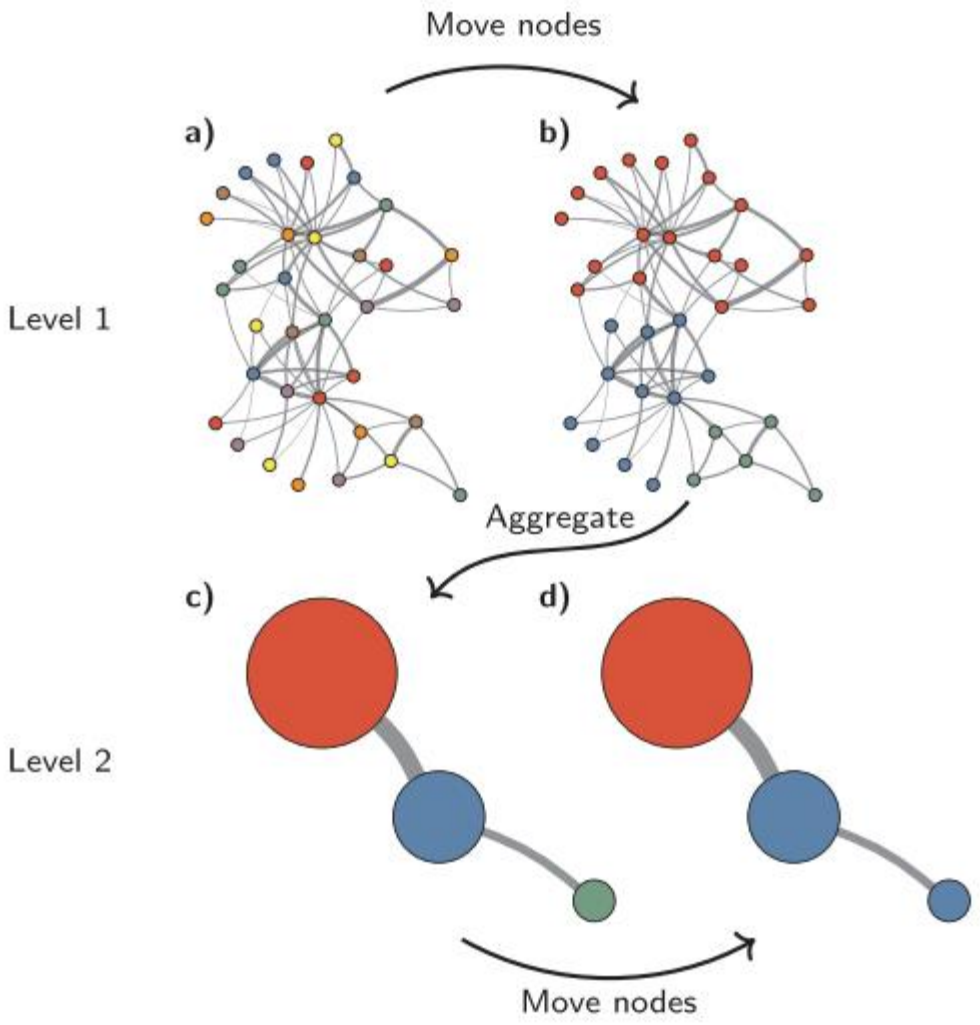
a) part d'une partition unique dans laquelle chaque nœud se trouve dans sa propre communauté,

b) déplace les nœuds individuels d'une communauté à l'autre pour trouver une partition,

c) un réseau est agrégé sur la base de cette partition,

d) déplace les nœuds individuels dans le réseau agrégé.

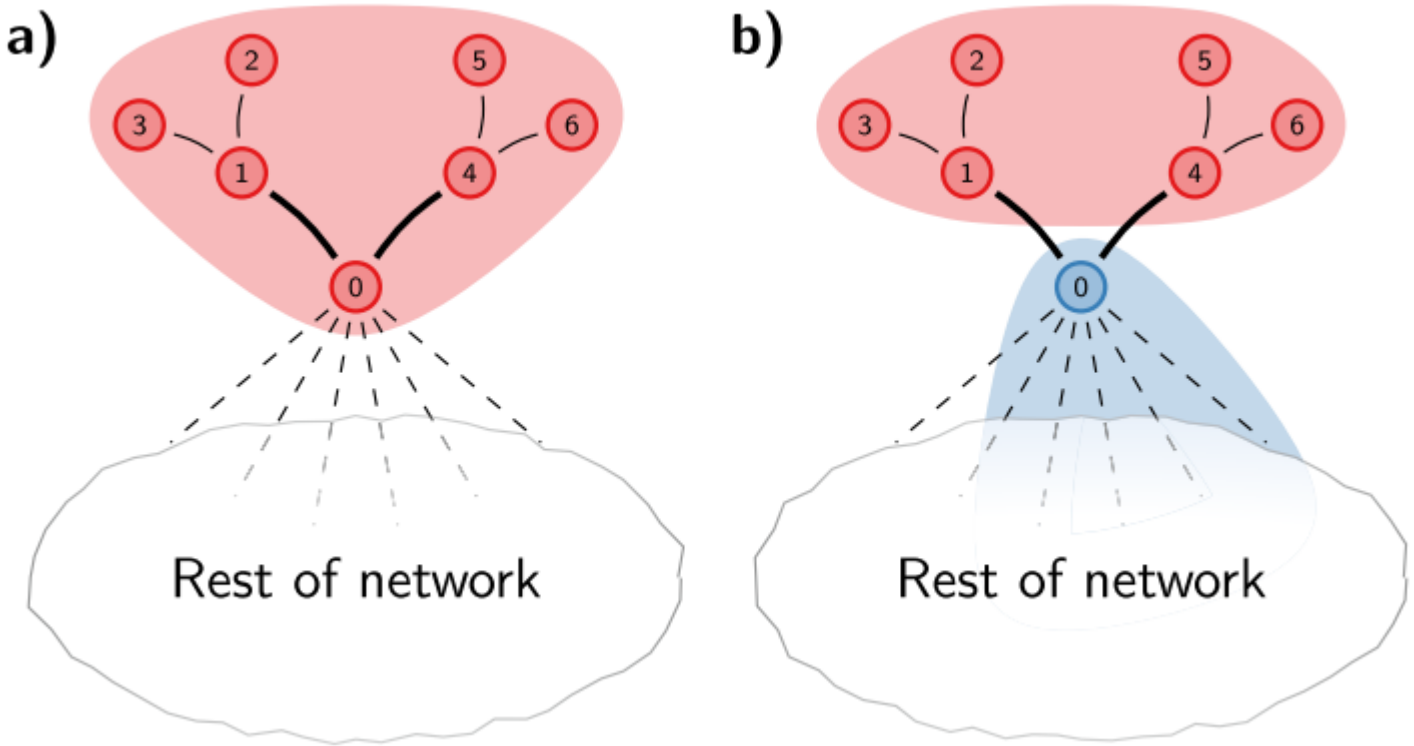
Ces étapes sont répétées jusqu'à ce que la qualité ne puisse plus être améliorée.



Algorithme de Louvain

L'algorithme est un des plus performant et des plus cité du domaine.

Cependant il a un problème majeur: il peut conduire à des fusions arbitraires et incorrectes de communautés et même à des communautés déconnectées.



Algorithme de Leiden (Traag et al., 2019)

L'algorithme de Leiden se compose de trois phases :

1. déplacement local des nœuds,
2. raffinement de la partition
3. agrégation du réseau sur la base de la partition raffinée.

L'algorithme de Leiden utilise une procédure de déplacement local rapide : seuls les nœuds dont le voisinage a changé sont visités.

Méthodes : Leiden

Algorithme de Leiden

a) part d'une partition unique,

b) déplace les nœuds individuels d'une communauté à l'autre pour trouver une partition (*P*),

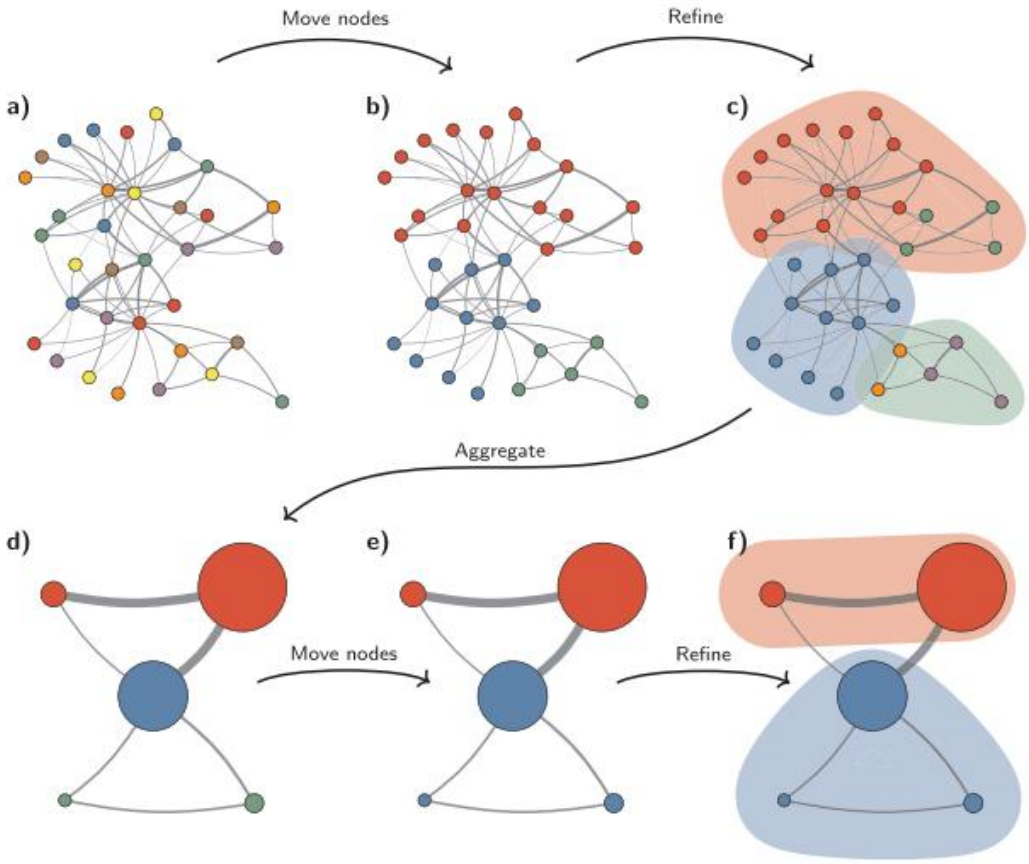
c) qui est ensuite affinée (*Pa*).

d) Un réseau agrégé est créé sur la base de *Pa*, en utilisant *P* pour créer une partition initiale pour le réseau agrégé. Par exemple, la communauté rouge dans b) est affinée en deux sous-communautés dans c), qui après agrégation deviennent deux nœuds séparés dans d), tous deux appartenant à la même communauté.

e) déplace des nœuds individuels dans le réseau agrégé.

f) Dans ce cas, le raffinement ne modifie pas la partition.

Ces étapes sont répétées jusqu'à ce qu'aucune autre amélioration ne puisse être apportée.



Un troisième type d'approche est d'essayer d'estimer la similarité (distance) entre les sommets pour les regrouper en communautés.

- Utiliser la **marche aléatoire** pour trouver des communautés vient de l'observation qu'un « marcheur » va passer plus de temps dans une communauté où le nombre de d'arêtes est plus grand qu'entre communautés (Pons et Latapy, 2005).

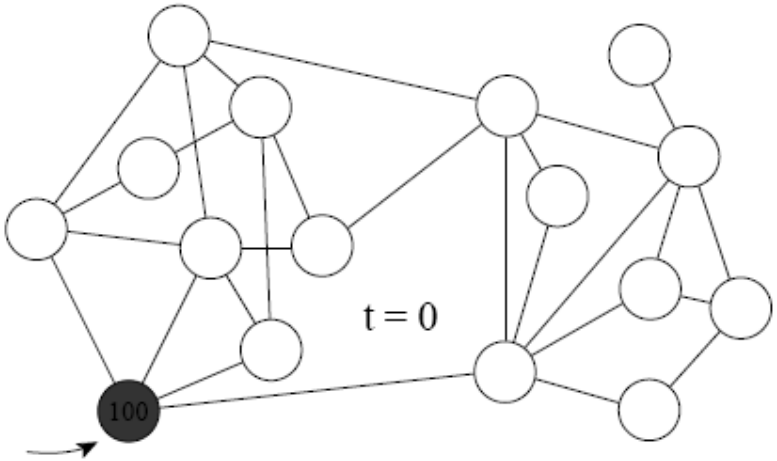
- Marche aléatoire similaire à un **processus de diffusion**.
- Sur le graphe, à chaque pas le marcheur est sur un sommet et va passer au sommet suivant choisi au hasard parmi les sommets voisins accessibles.

- La séquence des sommets visités est une **chaine de Markov** dont les sommets sont les états de la chaine de Markov.
- A chaque pas, le marcheur a une probabilité de $1/d(i)$ d'aller vers l'un des voisins du sommet *i*.

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{d(i)}$$

- où A_{ij} est la matrice d'adjacence de *G*,
- $d(i)$ est le degré de *i*,

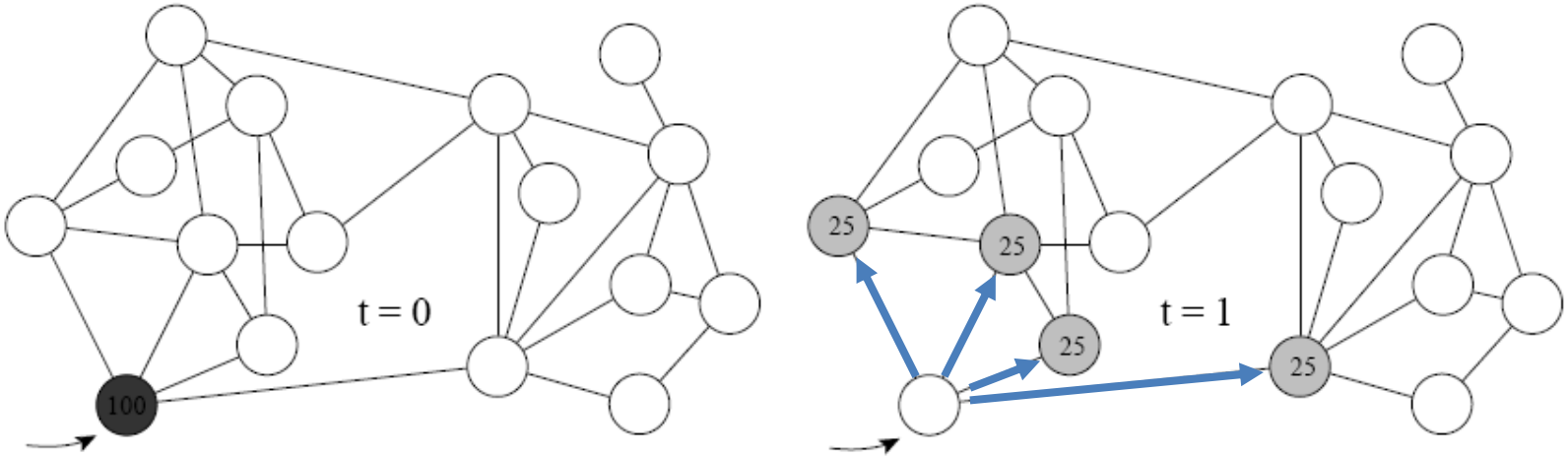
Exemple de marche aléatoire



Exemple de dynamique d'une marche aléatoire sur un graphe non-pondéré. Le marcheur part du sommet indiqué par la flèche.

(Thèse de P. Pons 2007).

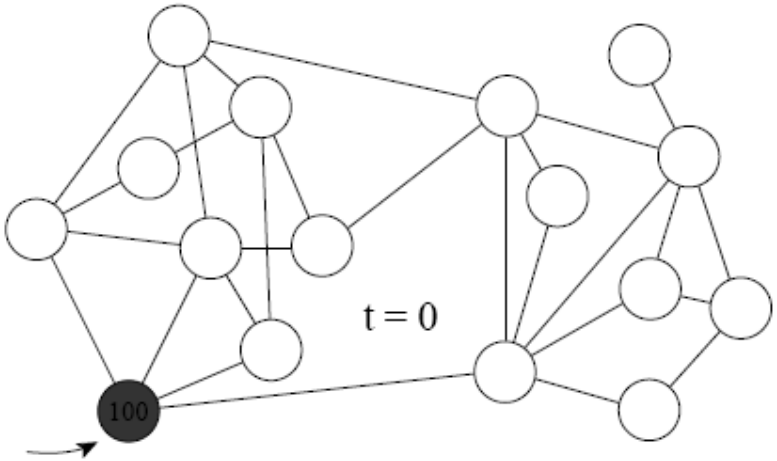
Exemple de marche aléatoire

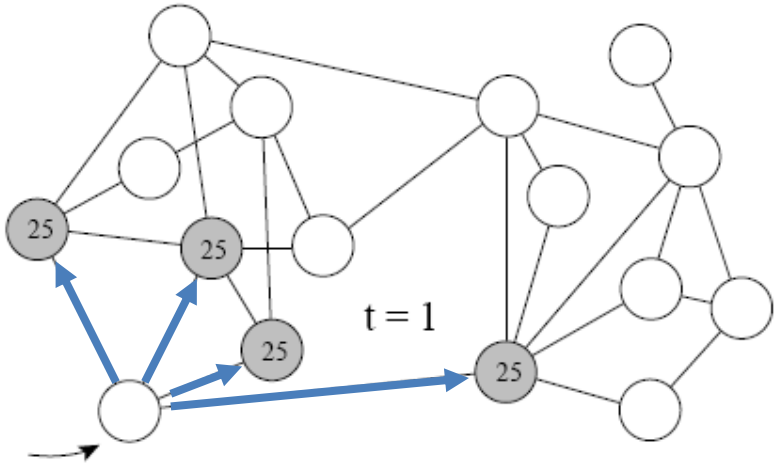


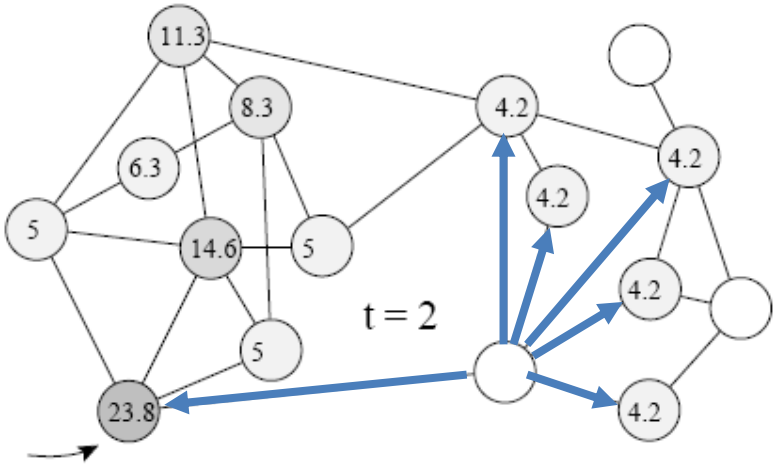
Exemple de dynamique d'une marche aléatoire sur un graphe non-pondéré. Le marcheur part du sommet indiqué par la flèche. Les probabilités de postions aux temps t sont indiquées en pourcentage sur chaque sommet

(Thèse de P. Pons 2007).

Exemple de marche aléatoire

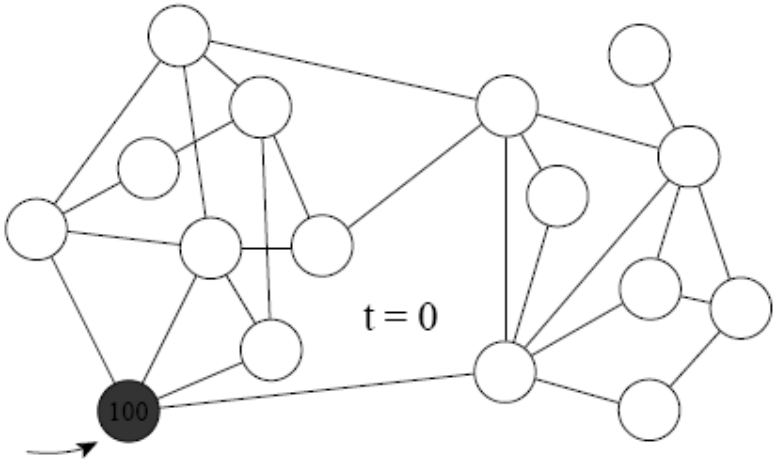


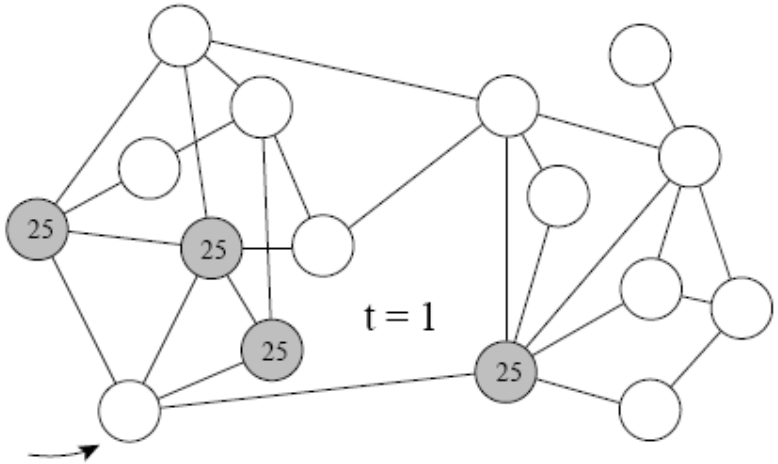


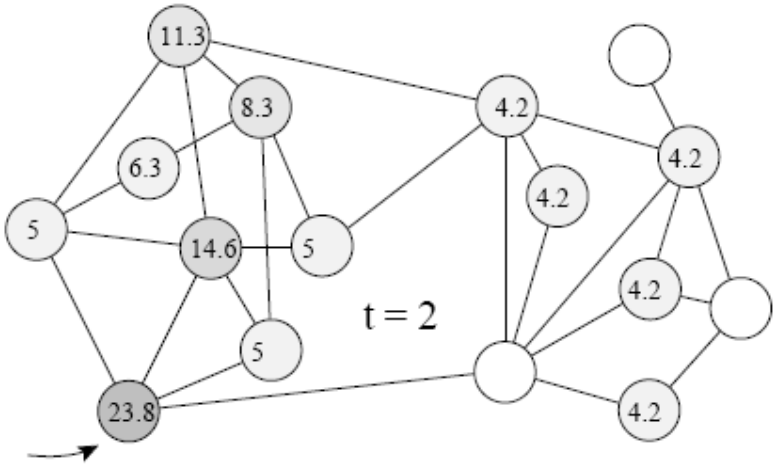


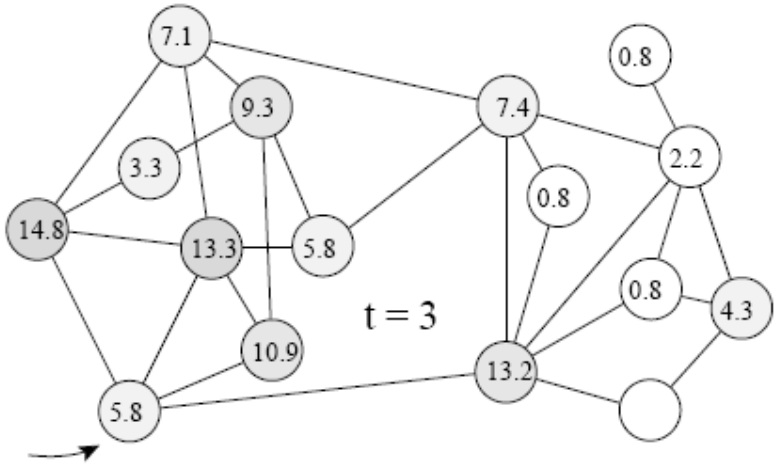
25/6 ~4.2

Exemple de marche aléatoire









La probabilité d'aller de *i* à *j* dans une marche de longueur *t* est :

$$P_{ij}^{t}$$

La probabilité d'aller de *i* à *j* dans une marche de longueur *t* est

$$P_{ij}^{t}$$

Lien avec la structure en communautés: calculer une distance entre les sommets (*i*,*j*).

- La distance sera
  - **grande** si les sommets appartiennent à des communautés différentes,
  - **petite** s'ils sont dans la même communauté.

La probabilité d'aller de *i* à *j* dans une marche de longueur *t* est

$$P_{ij}^{t}$$

Lien avec la structure en communautés: calculer une distance entre les sommets *(i,j)*.

- La distance sera
  - **grande** si les sommets appartiennent à des communautés différentes,
  - **petite** s'ils sont dans la même communauté.

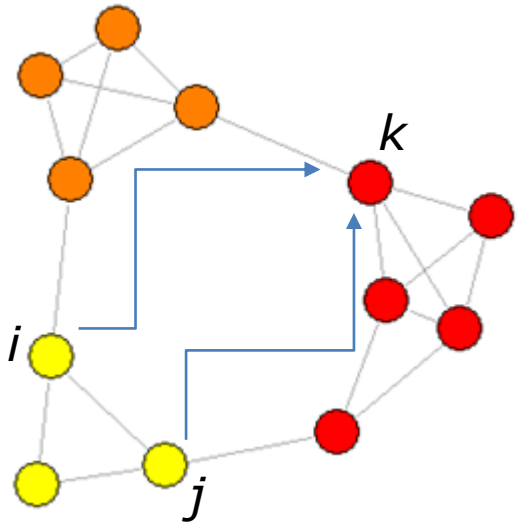
Observations:

- Si *i* et *j* sont dans la même communauté, la probabilité P_{ij}^{t} sera élevée.
  - Mais une probabilité élevée n'implique pas que *i* et *j* soient dans le même communauté.
- P_{ij}^{t} dépend degré de *j* $d(j)$, car le marcheur a plus de chance d'aller vers un sommet de fort degré.

Idée « originale »

- Deux sommets de la même communauté ont tendance à « voire » les autres sommets de la même façon (s'ils sont éloignés).
- Ainsi, si *i* et *j* sont dans le même communauté :

$$\forall k, P_{ik}^{t} \approx P_{jk}^{t}$$



- Définition d'une distance entre sommets *i* et *j*
- avec *d*(*k*) le degré de *k*

$$r_{ij}^{t} = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} \frac{\left(P_{ik}^{t} - P_{jk}^{t}\right)^{2}}{d(k)}}$$

- et entre communautés C_1 et C_2:

$$r_{C_1C_2}^{t} = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} \frac{\left(P_{C_1k}^{t} - P_{C_2k}^{t}\right)^{2}}{d(k)}}$$

  - Avec

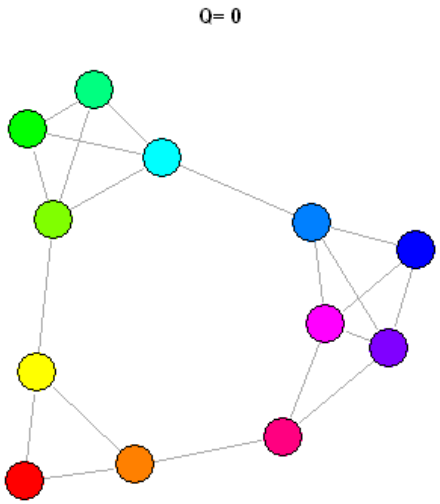
$$P_{C_{1k}}^{t} = \frac{1}{|C|} \sum_{i \in C} P_{ik}^{t}$$

Marche aléatoire: classification ascendante

Le problème de trouver des communautés revient à un problème de **classification hiérarchique ascendante**.

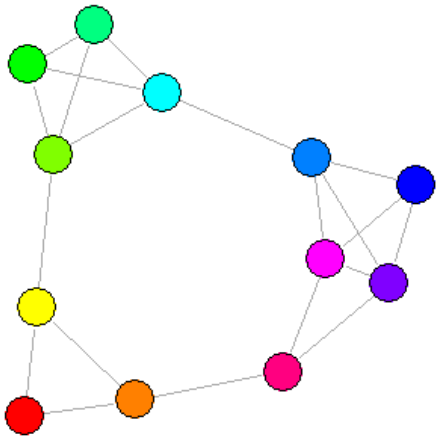
- Initialisation : partition P_1 en n communautés (nombre de sommets),
- Calculer les distances entre tous les sommets (adjacents).
- Répéter, à chaque pas k:
  - Choisir C_1 et C_2 dans P_k qui ont au moins une arête entre elles et qui minimise la moyenne des distances entre chaque sommets et sa communauté (méthode de Ward)
  - Union de C_1 et C_2 ($C_3 = C_1 \cup C_2$) et créer une nouvelle partition P_k+1
  - Mise à jour de distances entre communautés.
  - L'algorithme s'arrête après n-1 pas, $P_n = \{V\}$.

Marche aléatoire: déroulement pas à pas

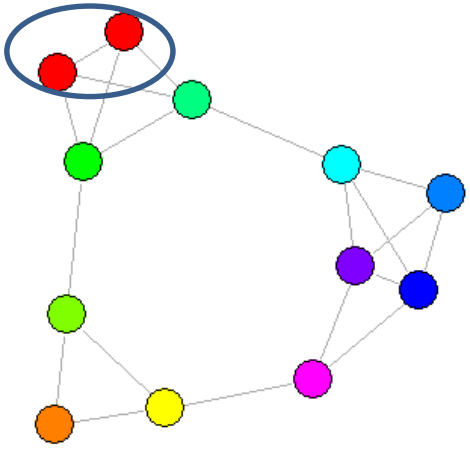


Marche aléatoire: déroulement pas à pas

Q= 0

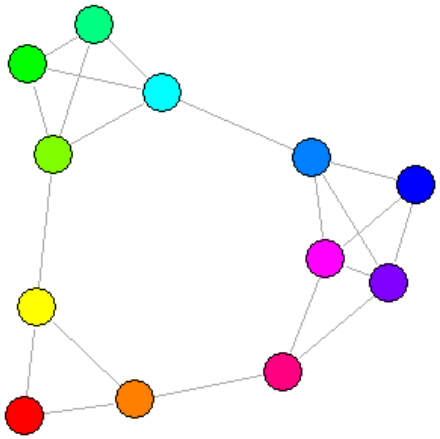


Q= -0.048

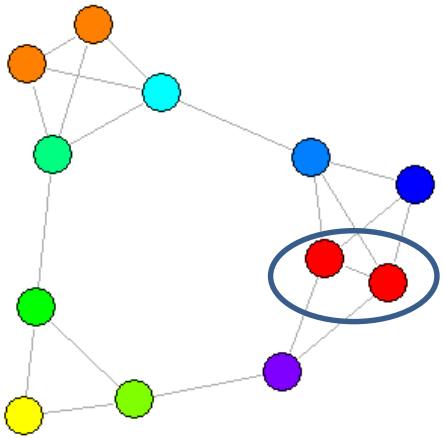


Marche aléatoire: déroulement pas à pas

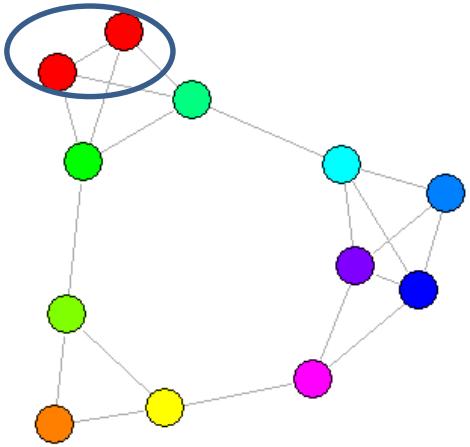
Q= 0



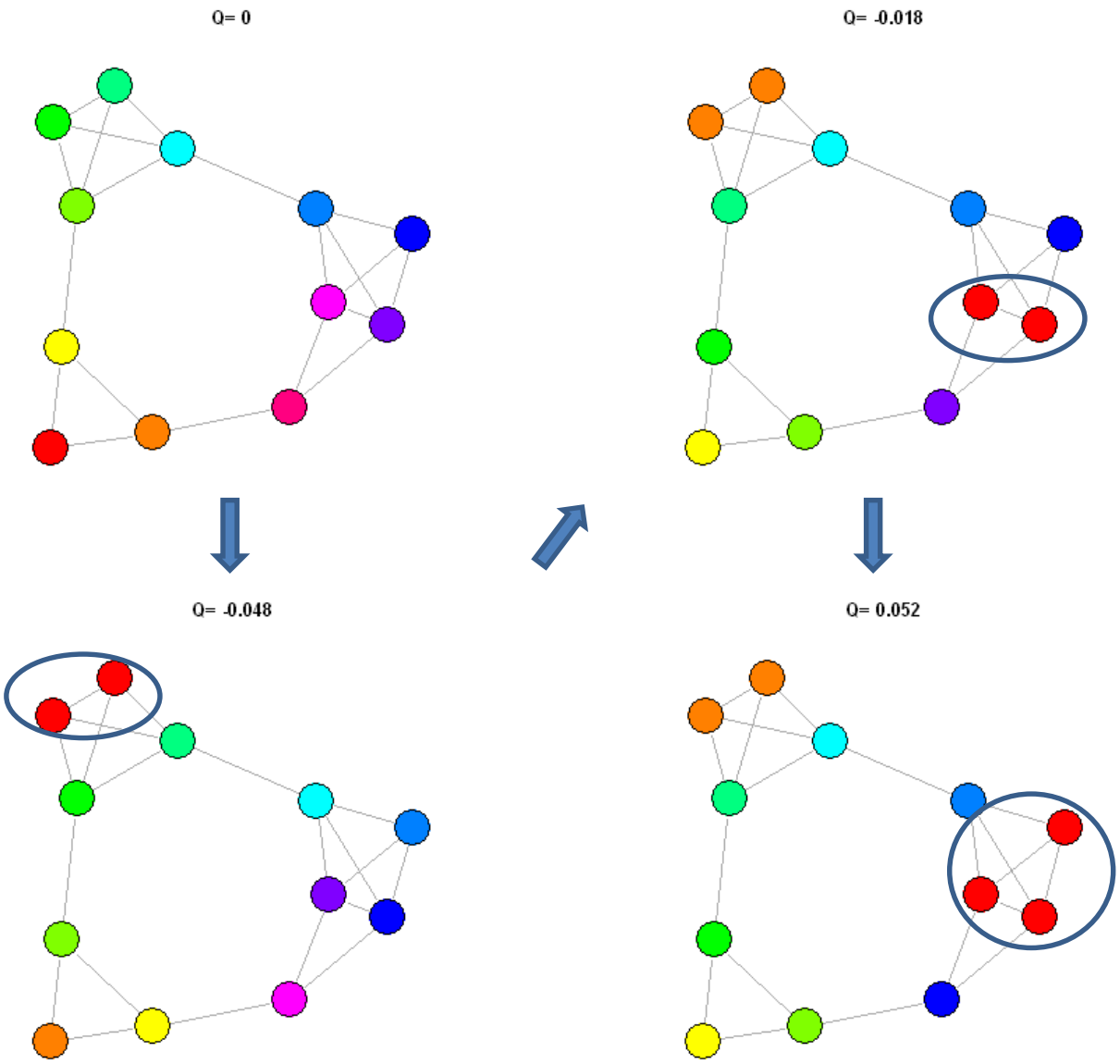
Q= -0.018



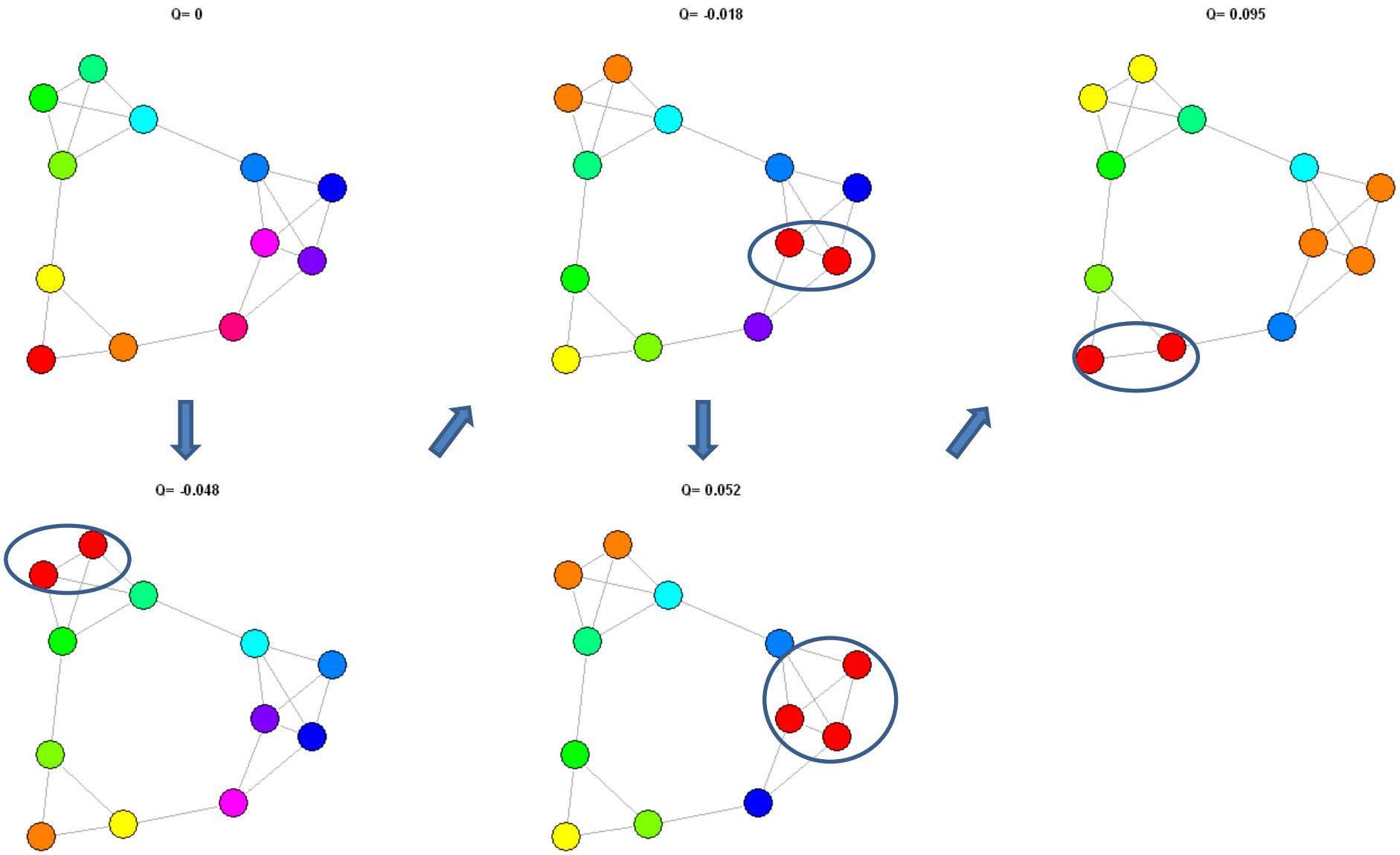
Q= -0.048



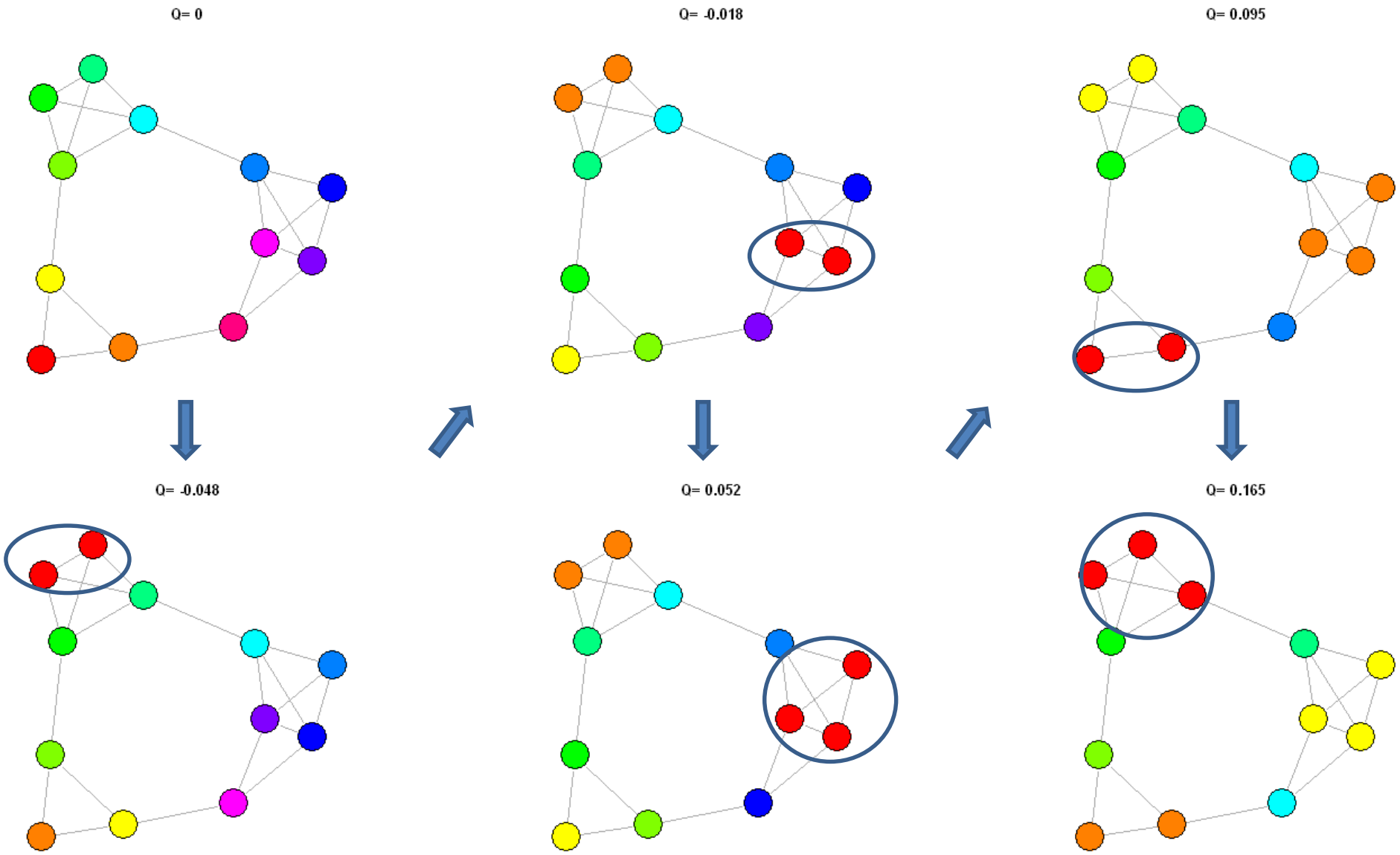
Marche aléatoire: déroulement pas à pas



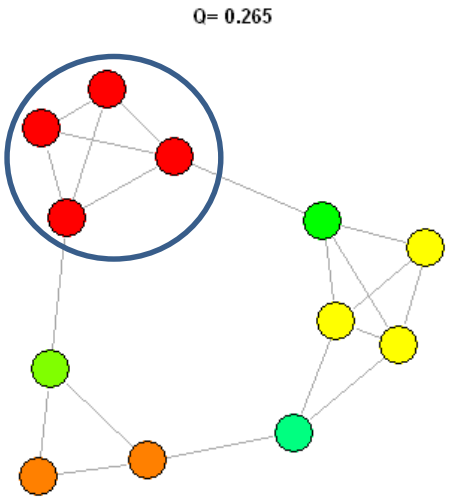
Marche aléatoire: déroulement pas à pas



Marche aléatoire: déroulement pas à pas

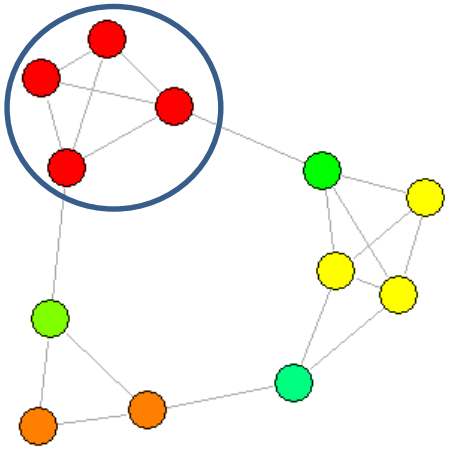


Marche aléatoire: déroulement pas à pas

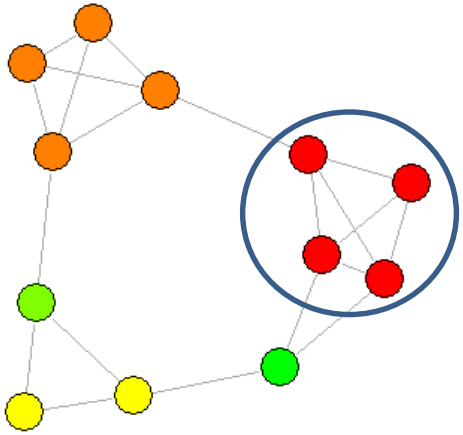


Marche aléatoire: déroulement pas à pas

Q= 0.265

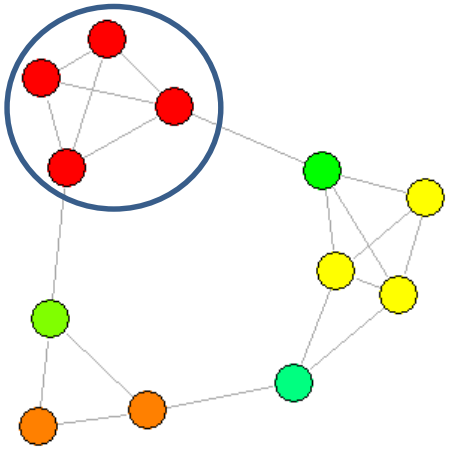


Q= 0.36

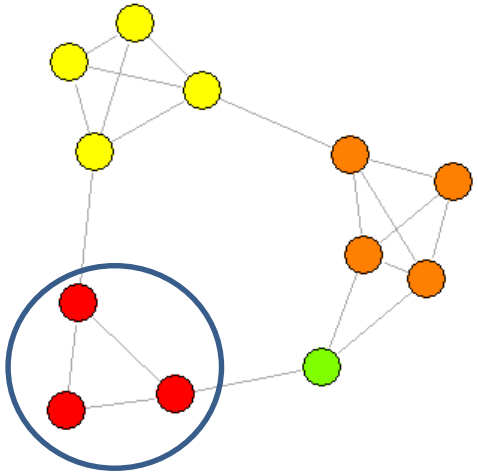


Marche aléatoire: déroulement pas à pas

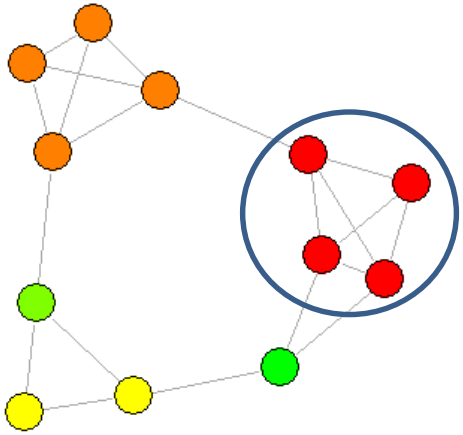
Q= 0.265



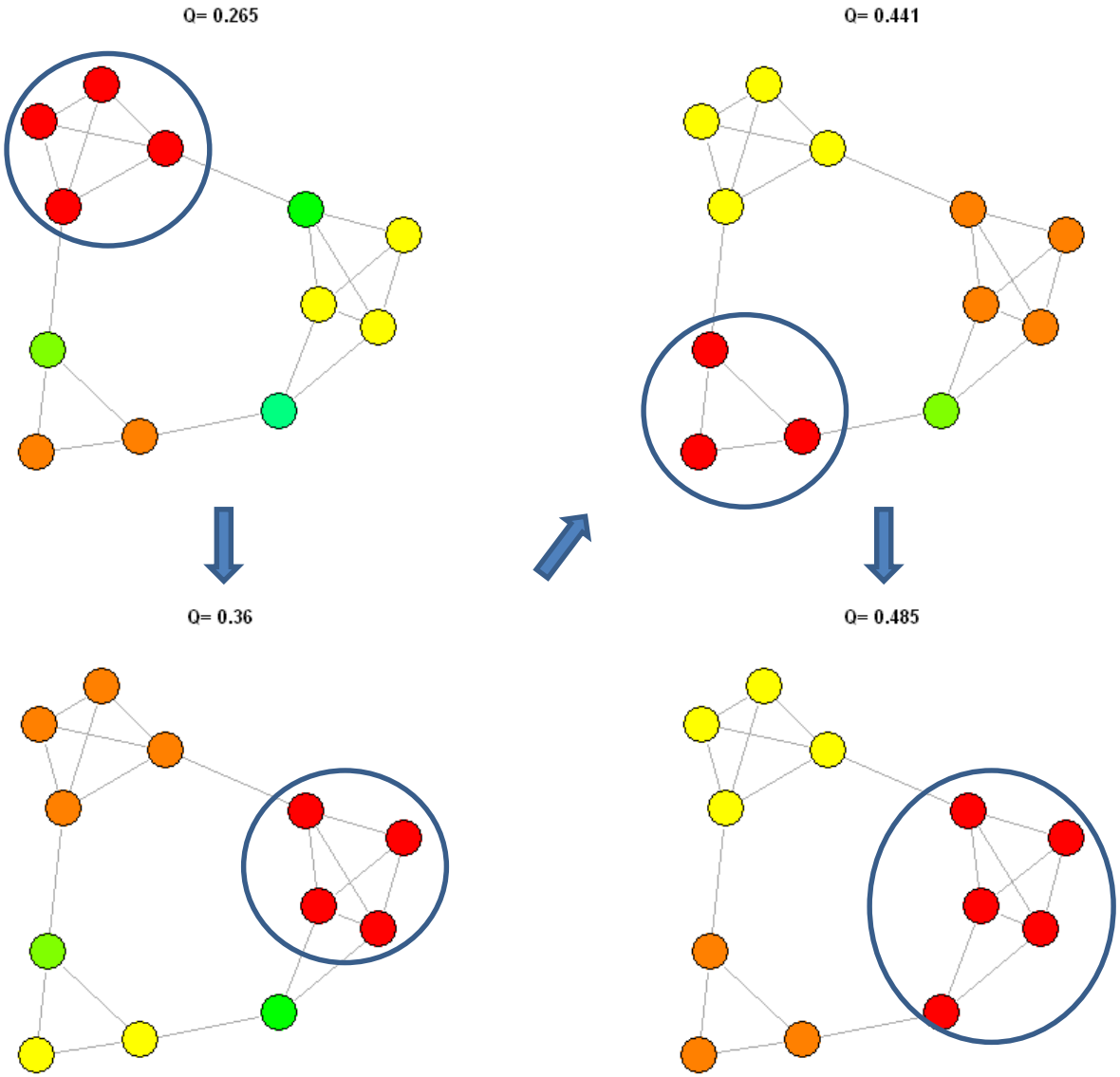
Q= 0.441



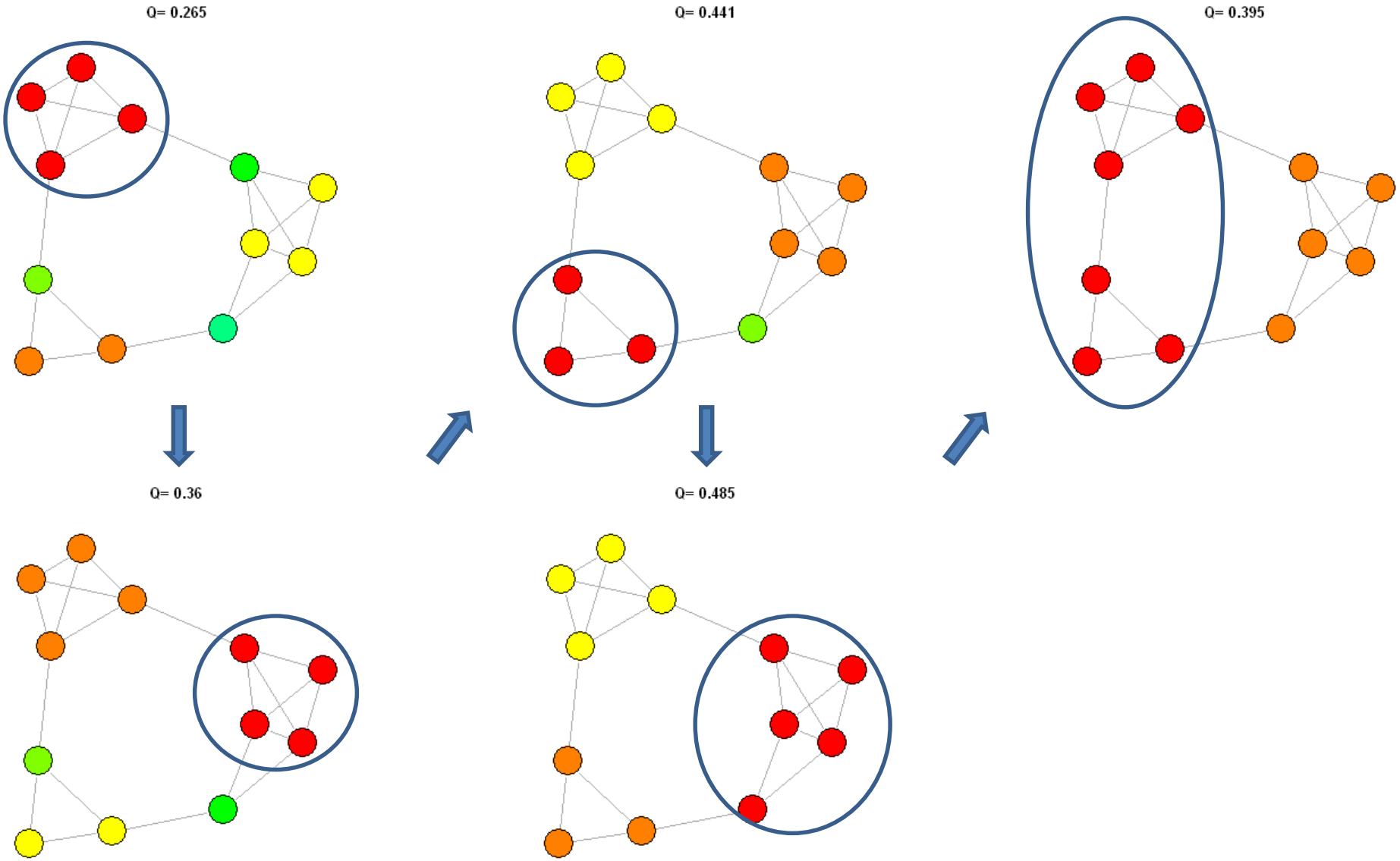
Q= 0.36



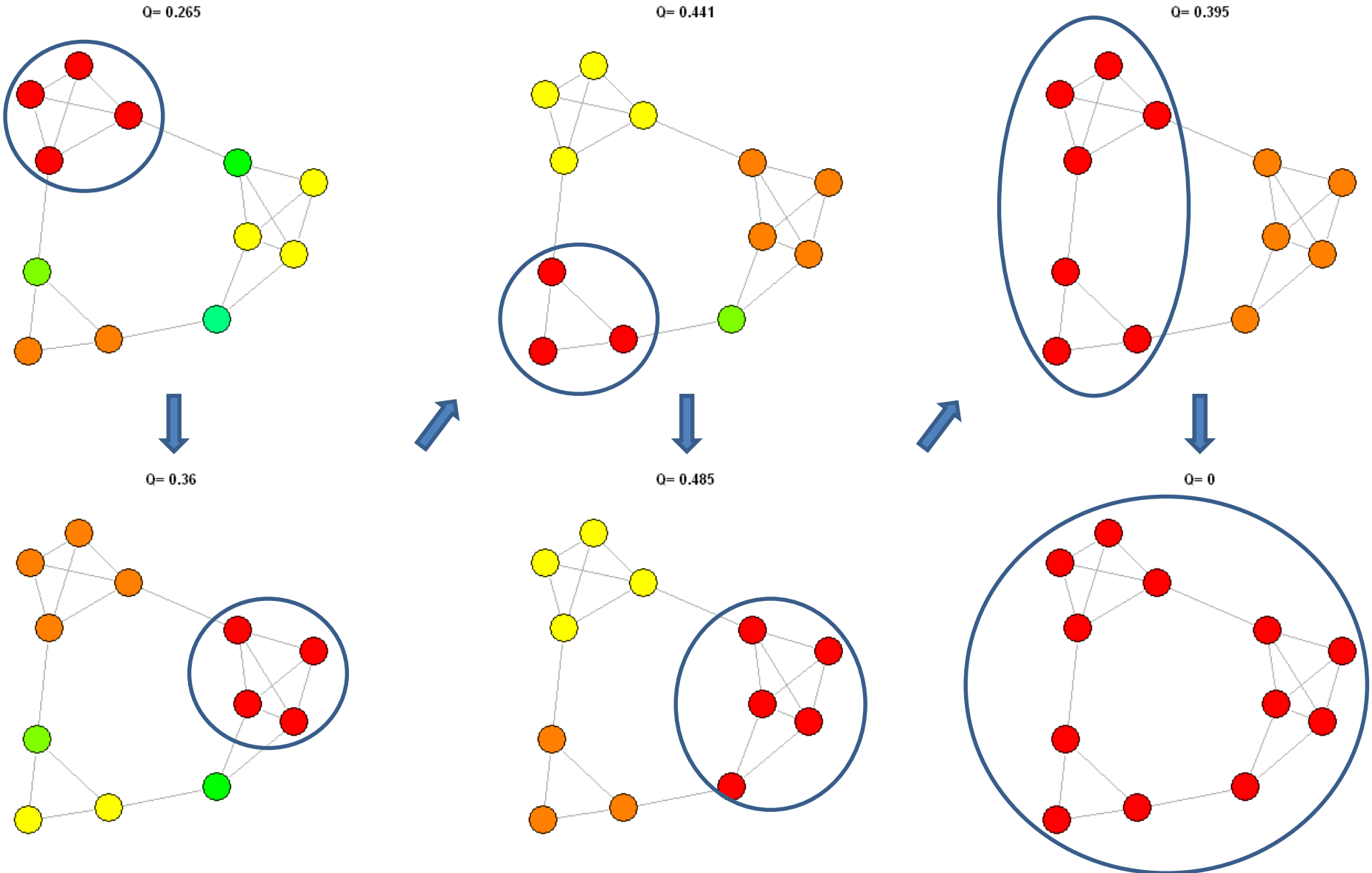
Marche aléatoire: déroulement pas à pas



Marche aléatoire: déroulement pas à pas



Marche aléatoire: déroulement pas à pas



Méthodes : Markov Cluster Algorithm (MCL)

- Markov Cluster Algorithm (van Dongen, 2000)
- Méthode la plus populaire en bioinformatique!
- Simulation d'un processus de diffusion de flux dans un graphe.

- Initialisation: matrice stochastique *S* du graphe = matrice d'adjacence A_{ij} où chaque élément *i* est divisé par son degré *d(i)*.
- L'élément s_{ij} de la matrice est la probabilité d'une marche aléatoire de *i* à *j*.

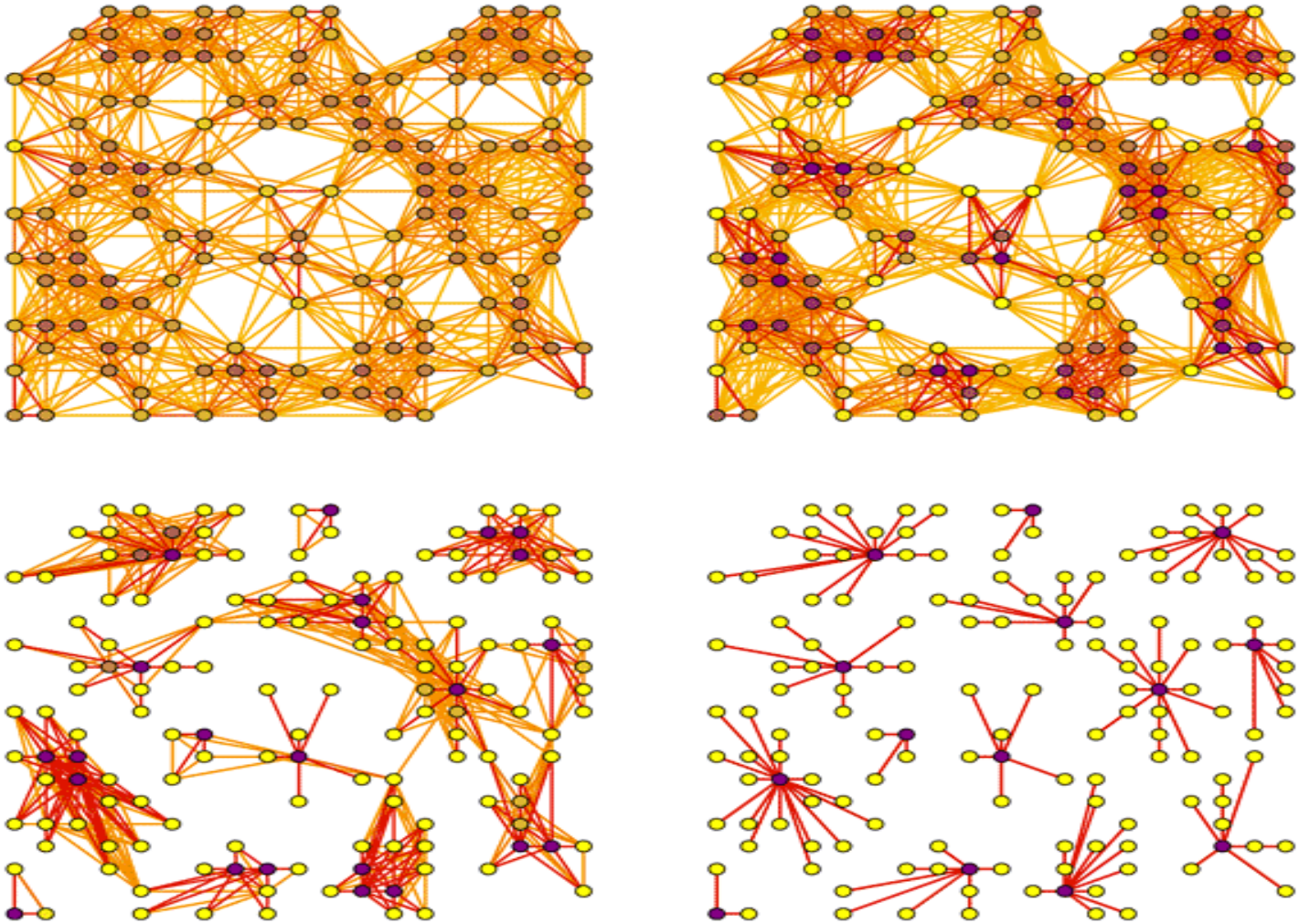
$$S_{ij} = \frac{A_{ij}}{d(i)}$$

  - => La somme des éléments de chaque colonne de *S* = 1 (normalisation).

Méthodes : Markov Cluster Algorithm (MCL)

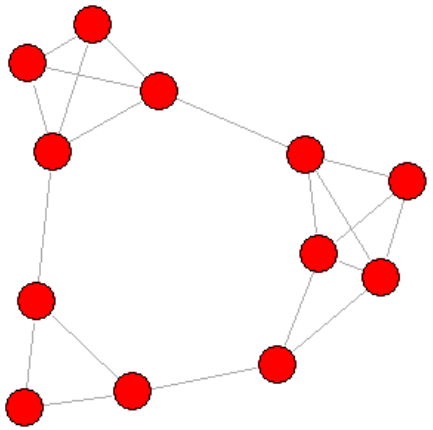
- A chaque itération, l'algorithme réalise deux étapes:
  1. **Expansion** (flux de diffusion): S est élevée à la puissance p (un entier) = matrice M. La valeur m_{ij} est alors la probabilité d'une marche aléatoire de i à j en p pas.
  2. **Inflation** (gonflement): élever chaque entrée m_{ij} de M à la puissance α (un réel).
  - Le but est d'augmenter le poids des paires de sommets qui ont des m_{ij} élevées et qui ont donc de fortes chances d'appartenir à la même communauté.
  - Les éléments de chaque ligne sont divisés par leur somme marginale (normalisation). Une nouvelle matrice S est reconstituée.
- Après plusieurs itérations, le processus converge vers une matrice possédant des propriétés remarquables.
  - Ses éléments sont 0 ou 1 et le graphe correspondant est déconnecté.
  - Ses **composantes connexes** sont les communautés du graphe original.
- Avantage : simple à implémenter et très rapide.
- Inconvénient: la partition dépend du choix de α, une valeur faible de α donnera peu de communautés alors qu'un α élevé donnera un grand nombre de communautés (granularité élevée).

Méthodes : Markov Cluster Algorithm (MCL)

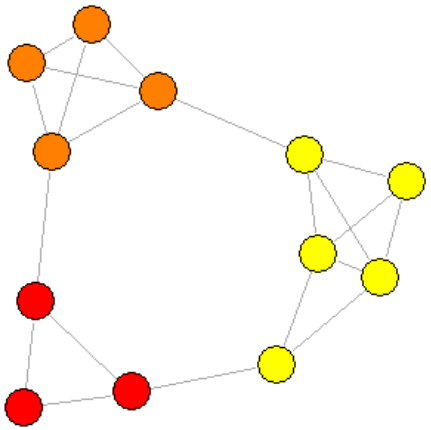


MCL pour différentes valeurs de α (inflate factor)

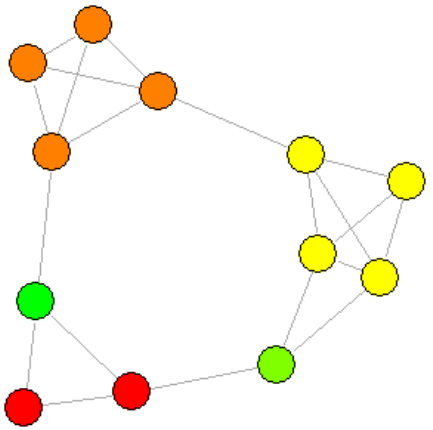
Q= 0 I= 1.1..1.3



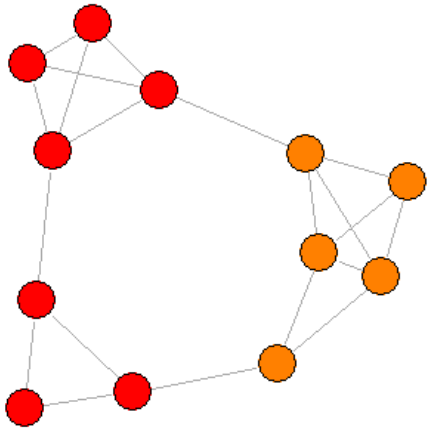
Q= 0.485 I= 1.5..3.5



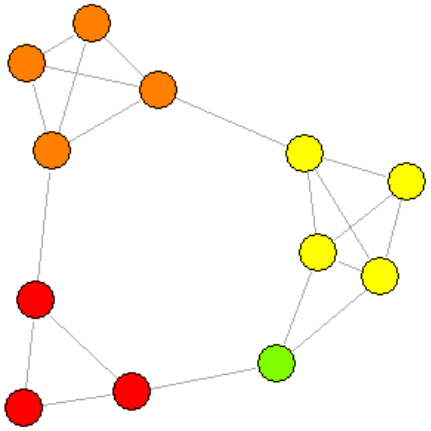
Q= 0.36 I= 4.2..4.7



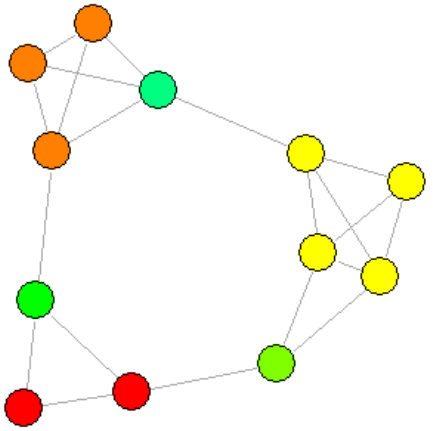
Q= 0.395 I= 1.4



Q= 0.441 I= 3.6..4.2



Q= 0.26 I= 4.8



Community structure: A comparative evaluation of community detection methods

Vinh-Loc Dao, Cécile Bothorel, Philippe Lenca

https://arxiv.org/abs/1812.06598v4, last revised 4 Nov 2019

Discovering community structure in complex networks is a mature field since a tremendous number of **community detection methods** have been introduced in the literature. Nevertheless, it is still very challenging for practioners to determine which method would be suitable to get insights into the structural information of the networks they study. Many recent efforts have been devoted to investigating various **quality scores** of the community structure, but the problem of distinguishing between different types of communities is still open. In this paper, we propose a comparative, extensive and empirical study to investigate what types of communities many state-of-the-art and well-known community detection methods are producing. Specifically, we provide comprehensive analyses on computation time, community size distribution, a comparative evaluation of methods according to their optimisation schemes as well as a comparison of their partioning strategy through validation metrics. We process our analyses on a very large corpus of hundreds of networks from five different network categories and propose ways to classify community detection methods, helping a potential user to navigate the complex landscape of community detection.