# 一、关系图卷积模型

## （二）基本原理

### 1. 图数据构建

本文所分析的问题中存在多个数据表，分别记录了客户信息、订单信息和商品信息，客户表和商品表中每个样本都有一个唯一编码，订单表通过将唯一编码对应的方式将客户和商品对应起来，记录了所有客户的购买行为。如果要研究客户的交易行为，传统的分析方法一般假设样本之间是相互独立的，通过特征工程方法，将订单表和商品表的信息手动提取并合并到客户表中，这样很大程度上损失了商品表和订单表的信息。

近年来，随着图神经网络的兴起，【引用一些文献】人们倾向于关注数据之间的联系，即不再认为样本之间完全独立，而是存在各种经济、社会或物理层面的联系。Sanchez-Lengeling, Benjamin 等[1]介绍了基于拉普拉斯矩阵图卷积神经网络模型（GCN）的基本原理。大量实验表明，图神经网络模型在有关系建模的数据中具有优势。对于本文研究，我们可以将客户和商品定义为不同类型的节点，利用订单关系构建边连接，该模型为异质图，参考图 1 。

本模型的目的在于自监督学习，即链接预测任务。模型将给出一个概率，衡量商品节点和客户节点之间存在边连接的可能性。对于商品供给方来说，可以依据该模型给出的概率制定生产和销售策略，对于需求方来说，他们可以获得更加具有针对性的个性化商品推荐。

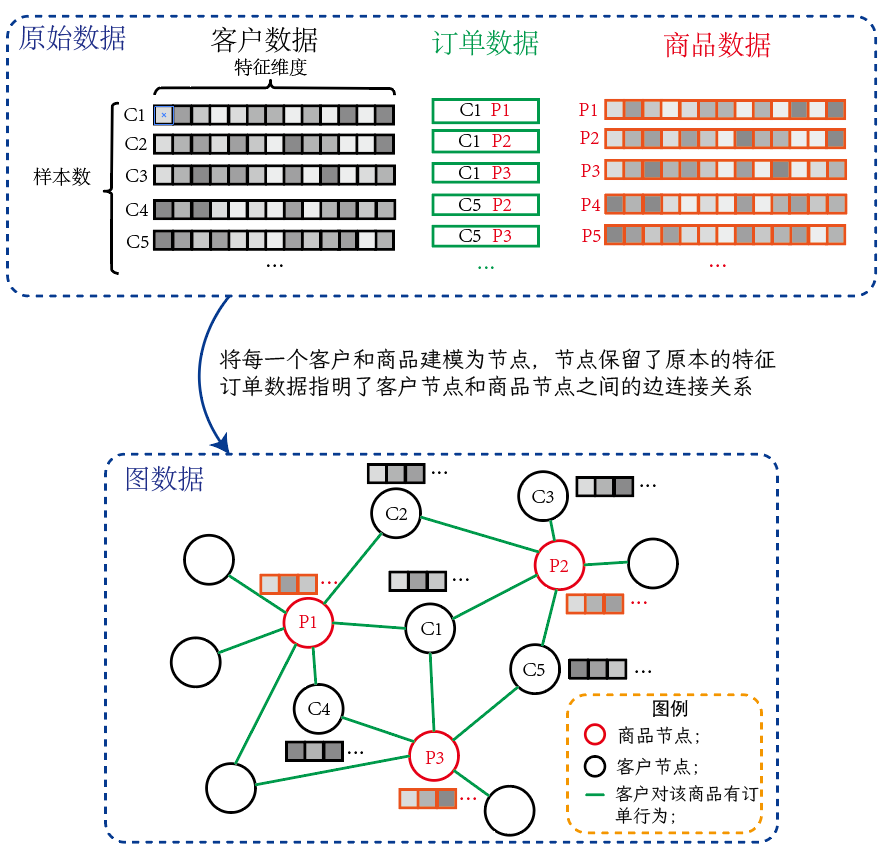


图 1 异质图构建方法

### 2. 图卷积神经网络

图卷积神经网络（GCN）的卷积是指信息聚合，其原理核操作方法与卷积神经网络（CNN）中的卷积并不一致。对于图数据，可以得到其邻接矩阵、所有节点的特征矩阵和度矩阵。我们首先求其拉普拉斯矩阵：

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1) |

拉普拉斯矩阵引入了自环和归一化操作，有利于优化信息聚合效果，聚合公式如下：

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2) |

其中是非线性函数，如sigmoid、ReLU等，是可训练权重矩阵，是信息聚合轮数。相对于传统的神经网络模型，图神经网络的主要贡献在于引入了拉普拉斯矩阵，将不同的样本关联起来，实现信息传递机制。

### 3. 关系图卷积模型

传统的GCN模型只能处理同质图模型，其中所有节点都是相同类型，例如都是客户节点，并且每个节点的特征维度一致，每个节点之间的关系也一致，这意味着公式（2）中仅需要一个矩阵即可。在本文模型中，由于存在两种不同的节点类型，因此同一条边也具有两种相反的含义，即购买和被购买两种关系，它们统一于一条边的表示中。在模型层面，由于不同节点的特征维度不一样，我们需要对不同的关系给出不同的可训练权重，该方法由Michael Schlichtkrull等人[2]于2017年提出，称为关系图卷积模型，他们首次在异质关系型数据中应用图神经网络并且取得良好效果。本文模型参考图 2 。

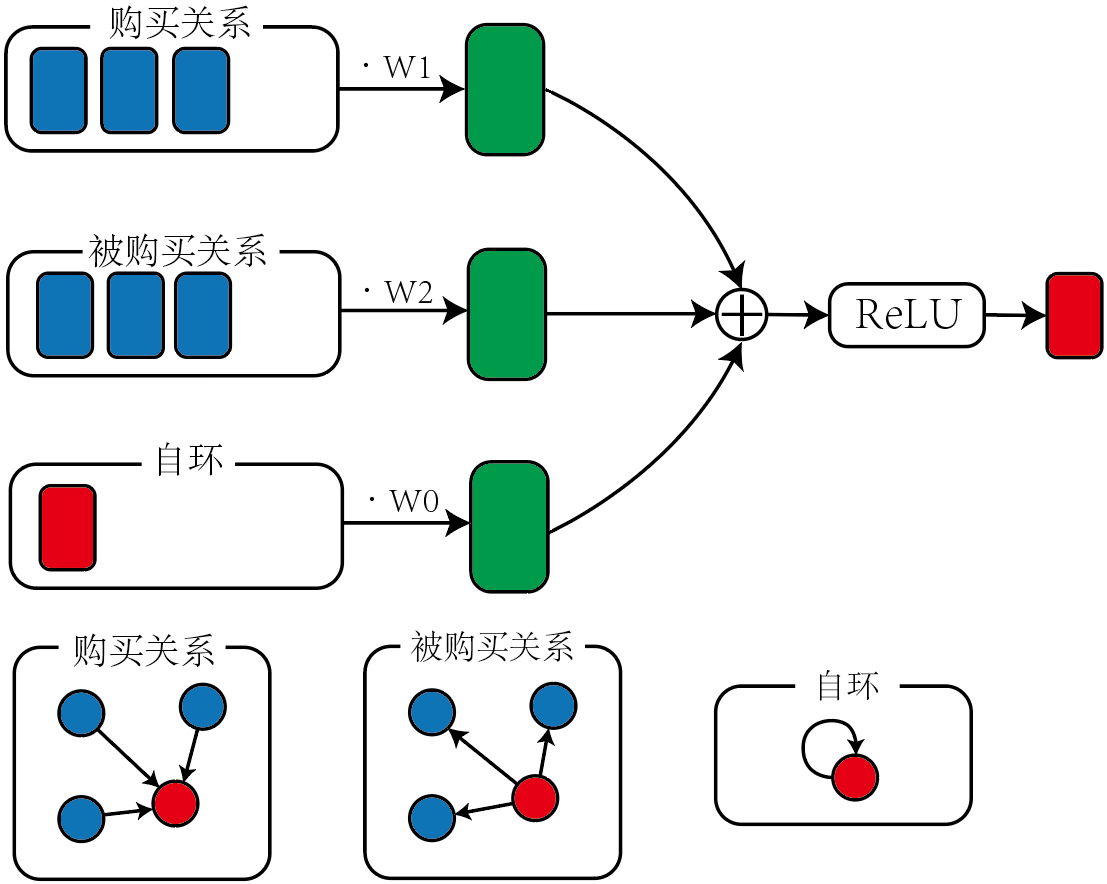


图 2 本文关系图卷积模型

其中是对应自环运算的可训练权重，是对应购买关系的可训练权重，是对应被购买关系的可训练权重。我们可以指定一个输出维度，使得各个关系通过线性变化后维度一致，对应元素加和并且通过ReLU激活输出。信息聚合公式如下：

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3) |

其中是可训练权重，表示所有关系类型的集合，是指在关系下节点的邻居集合，表示节点的特征矩阵，是节点的特征矩阵，最外层是非线性激活函数，上标中表示信息聚合的轮数，的取值可以根据任务具体情况而定，一般可以令其等于。

信息聚合可以看作是编码过程，目的是将相似节点的信息尽可能聚合到一起，突出该类别的特征便于聚类。然而，编码后无法立即给出边连接的预测概率，因此需要再构建一个解码器。Michael Schlichtkrull等在其研究中采用DistMult[3]作为解码方案，表现为将相互连接的两个节点的向量做点积，得到一个单值作为两者之间边存在与否的概率值。

本文在实验中发现DistMult方法效果在所研究的数据条件下并非最优，因此定义新解码器模型，即将相连接的两个节点的特征向量相互拼接代表两个节点之间边的特征，将该特征矩阵经过一个线性层输出，最后经过sigmoid函数输出得到边存在与否的概率值，其结构如下：

【解码模型示意图】

### 4. 损失函数

# 参考文献

[1] SanchezLengeling, Reif B A, Pearce E A, et. al. A Gentle Introduction to Graph Neural Networks[J]. Distill, 2021.

[2] Schlichtkrull M, Kipf T N, Bloem P, et. al. Modeling Relational Data with Graph Convolutional Networks[J]. arXiv, 2017.

[3] Yang B, Yih W, He X, et al. Embedding Entities and Relations for Learning and Inference in Knowledge[C]. //Yoshua Bengio, Yann LeCun.3rd International Conference on Learning Representations (ICLR), 2015.