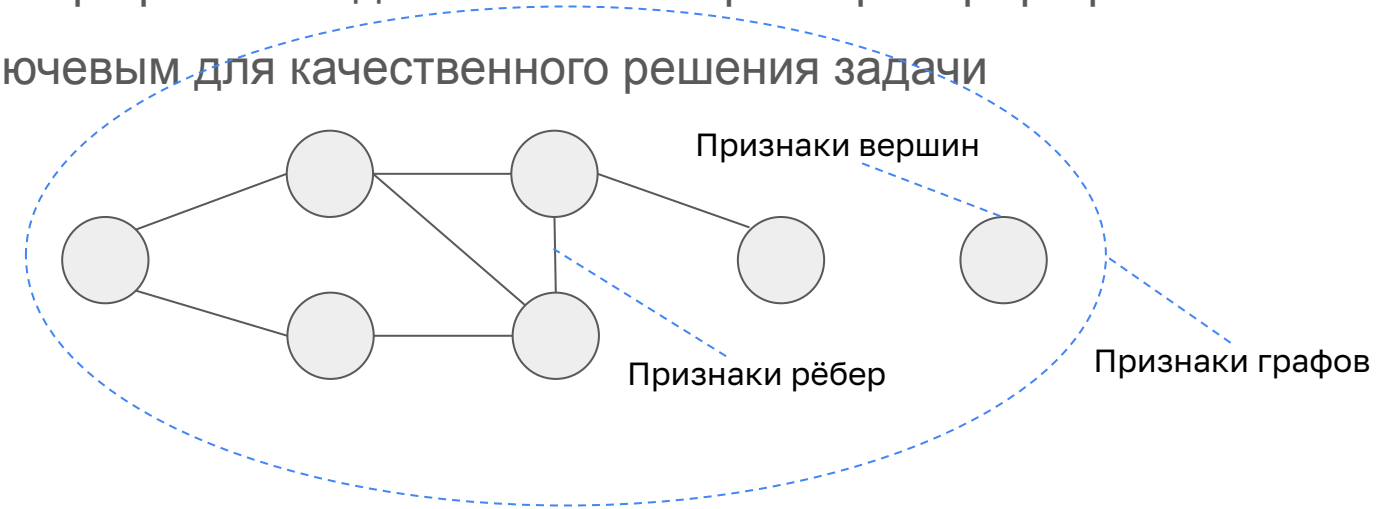
Анализ графовых данных и глубокое обучение

Азимов Рустам

В предыдущих сериях

- Разработать правила получения признаков для вершин/рёбер/графов
- Выбор признаков для описания вершин/рёбер/графов является ключевым для качественного решения задачи

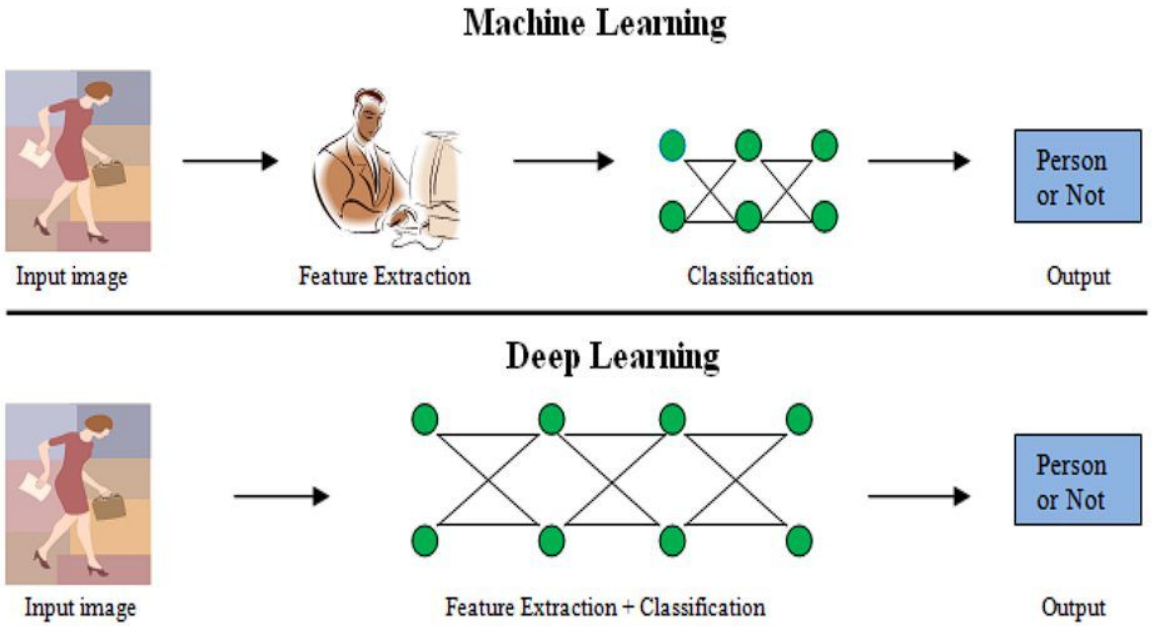


Hand-crafted features

- Признаки для вершин
  - Степень вершин
  - Показатели центральности
  - Коэффициент кластеризации
  - Графлеты
- Признаки для рёбер
  - Distance-based
  - Local neighborhood overlap
  - Global neighborhood overlap
- Признаки для графов
  - Graphlet Kernel
  - Weisfeiler-Lehman Kernel

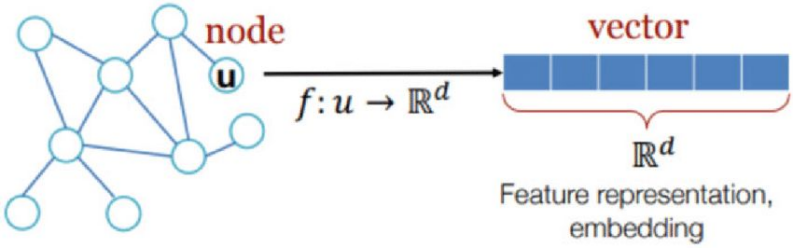
Node Embeddings

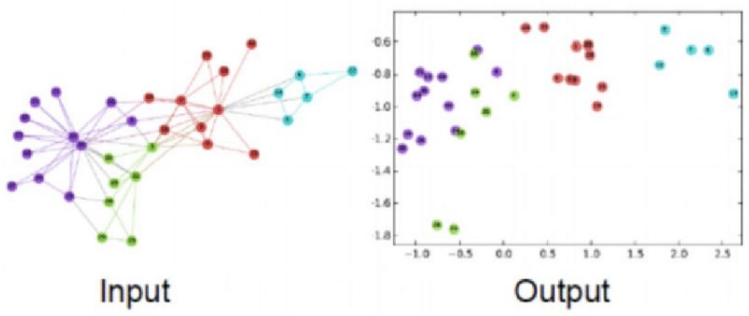
Feature Engineering vs Representation Learning



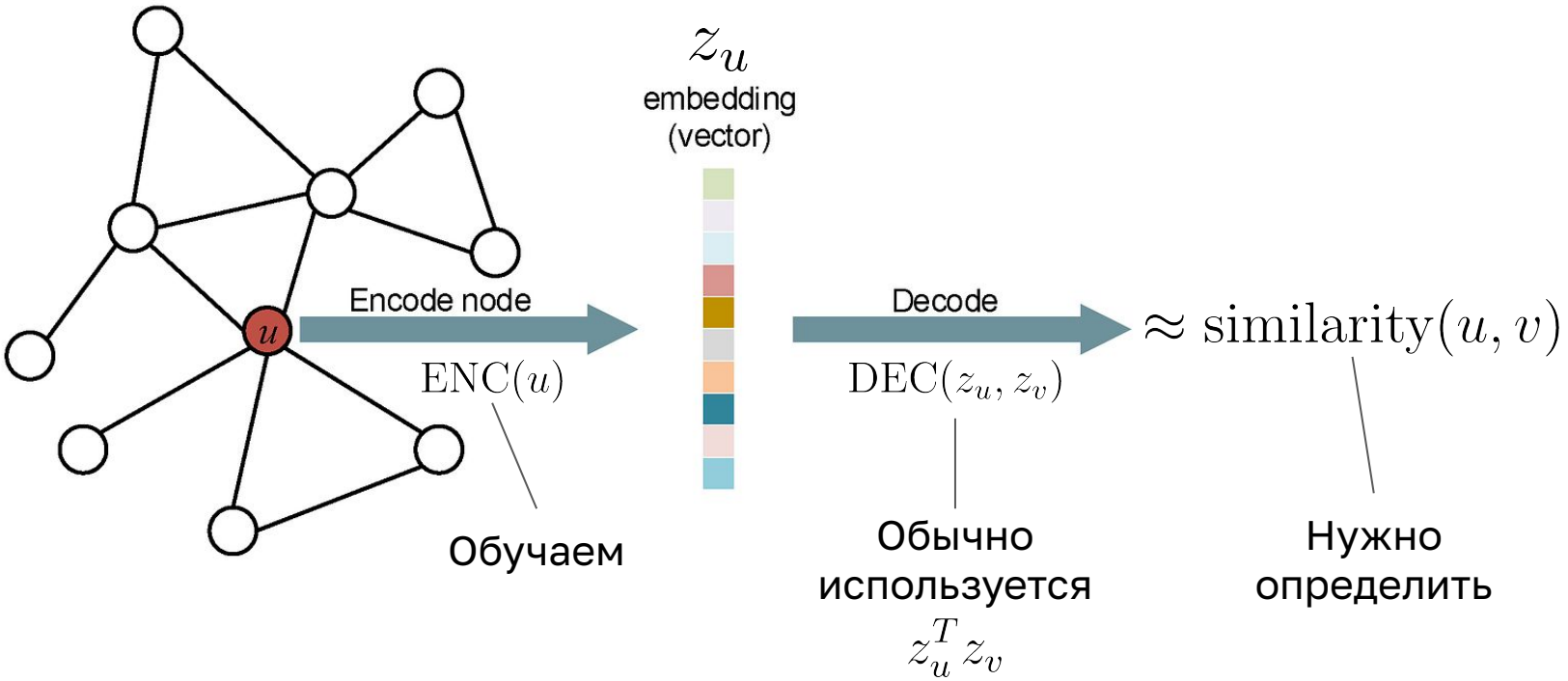
Graph Representation Learning

- Хочется научиться получать признаки автоматически и чтобы работало для разных задач
- Эмбеддинги должны описывать граф и быть не большой размерности
- Схожие вершины в графе должны иметь близкие эмбеддинги





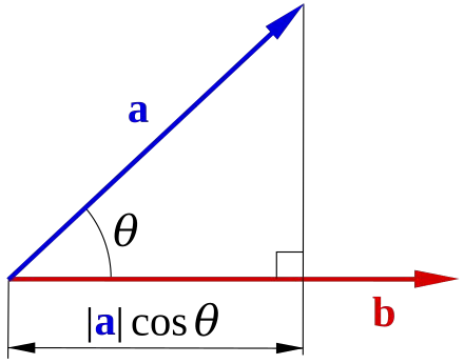
Encoder + Decoder



Обучение

- Обучение: оптимизация параметров $\mathrm{ENC}(u)$
- Максимизируем $z_u^T z_v$ для схожих вершин u и v
- У близких векторов больше скалярное произведение

$$z_u^T z_v = |z_u||z_v| \cos\Theta$$



Матрица эмбеддингов

- Как и в случае с некоторыми ядровыми методами параметрами являются сами эмбеддинги для каждой вершины

$$Z = \begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \cdots & Z_{1n} \\ Z_{21} & Z_{22} & \cdots & Z_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{n1} & Z_{n2} & \cdots & Z_{nn} \end{bmatrix}$$

Схожесть вершин

- Как и при выборе hand-crafted признаков ключевым является выбор: какие вершины считаем схожими?
  - Соседи?
  - Имеющие общих соседей?
  - Имеющие схожее локальное окружение?
- Рассмотрим новую идею, основанную на случайных блужданиях

Node Embeddings by Random Walks

Случайные блуждания

- Начинаем с некоторой вершины и случайно перемещаемся по рёбрам графа
- Решаем, что схожесть двух вершин в графе $\mathrm{similarity}(u, v)$ — вероятность того, что вершины u и v обе попадаются в таком случайном блуждании
- Фиксируем некоторую стратегию блуждания R и для каждой пары вершин подсчитываем оценки вероятности посетить v, если начали с вершины u — $P_R(v|u)$

Случайные блуждания

- Для процесса обучения — подбор таких эмбеддингов вершин, чтобы их скалярное произведение отражало описанное свойство схожести

$$z_u^T z_v \approx \text{similarity}(u, v)$$

- Такой подход учитывает как локальное окружение вершин, так и более длинные пути

DeepWalk

- Из каждой вершины u графа запускаем серию случайных блужданий фиксированной длины
- Подсчитываем $N_R(u)$ — мультимножество посещённых вершин
- Из метода максимального правдоподобия получаем оптимизационную задачу

$$\arg\max_z \sum_{u \in V} \log P(N_R(u)|z_u)$$

DeepWalk

- Переходим к negative log-likelihood и параметризуем вероятность с использованием softmax

$$\arg\min_z \mathcal{L} = \sum_{u \in V} \sum_{v \in N_R(u)} -\log\left(\frac{e^{z_u^T z_v}}{\sum_{t \in V} e^{z_u^T z_t}}\right)$$

$O(|V|^2)$

softmax

- Оптимизируем эмбеддинги z с помощью, например, SGD (Stochastic Gradient Descent)

DeepWalk: Negative sampling

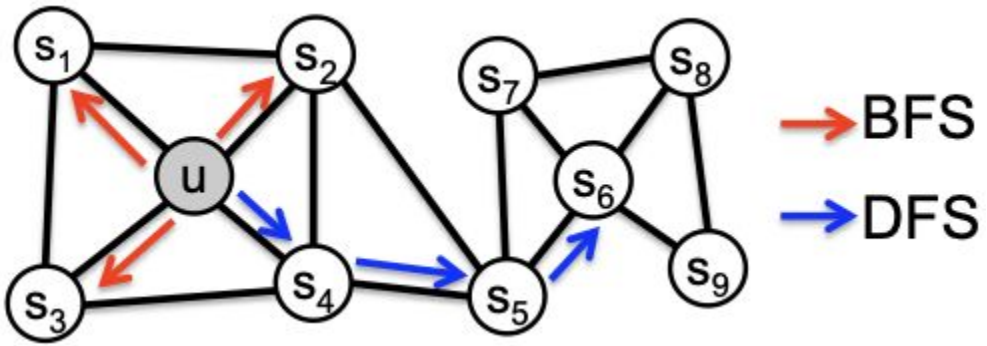
- Для снижения сложности вычислений нормируем не по всем вершинам, а только по небольшому числу вершин t_i не из случайных блужданий (negative nodes or negative samples)

$$-\log\left(\frac{e^{z_u^T z_v}}{\sum_{t\in V} e^{z_u^T z_t}}\right) \approx \log(\sigma(z_u^T z_v)) + \sum_{i=1}^{k} \log(\sigma(-z_u^T z_{t_i}))$$

- Обычно берут k от 5 до 20 (чем выше k, тем точнее, но дольше)
- t_i выбираем случайно, но с вероятностью пропорциональной степеням вершин
- Для эффективности можно брать любые вершины, а не только negative nodes

node2vec

- Хотим обобщить идею случайных блужданий для более гибкого определения соседей $N_R(u)$ где настраиваются доли локальной и глобальной информации о графе

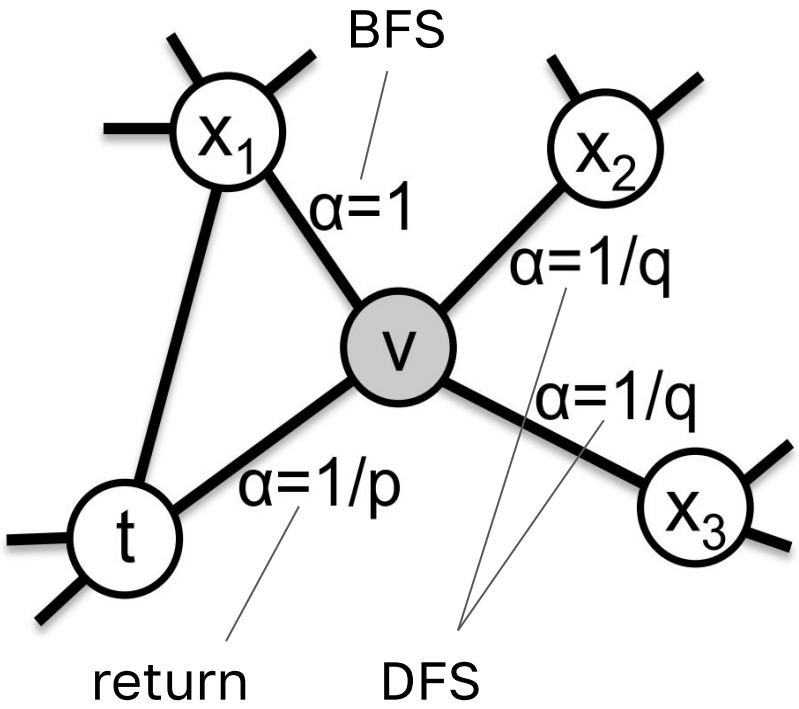


node2vec

- Для вычисления $N_R(u)$ настраиваем два параметра смещенного случайного блуждания 2го порядка
- Параметр p — настраивает частоту возвращения к предыдущей вершине
- Параметр q — настраивает соотношение BFS vs DFS стратегий обходов

node2vec: Смещенное блуждание

- Пусть прошлый шаг был из t в v
- Для следующего шага вычисляются числа пропорциональные вероятностям перехода
- Зависят от параметров p и q
- Затем они нормируются и получаем вероятности



node2vec

- Заранее подсчитаем такие вероятности для всех (t, v)
- Для вычисления $N_R(u)$ симулируем r случайных блужданий длины l, начиная из каждой вершины u
- Оптимизируем тот же функционал для нахождения эмбеддингов
- p < 1 — локальная информация о графе, p > 1 — глобальная
- Маленький q — чаще BFS, большой q — чаще DFS
- Линейная сложность, легко использовать параллельные вычисления

Node Embeddings

- Есть и другие алгоритмы, для конкретной задачи нужно подобрать наиболее подходящий
- Например, node2vec, хорошо себя показывает на классификации вершин
- Алгоритмы, основанные на случайных блужданиях, довольно эффективные

Graph Embeddings

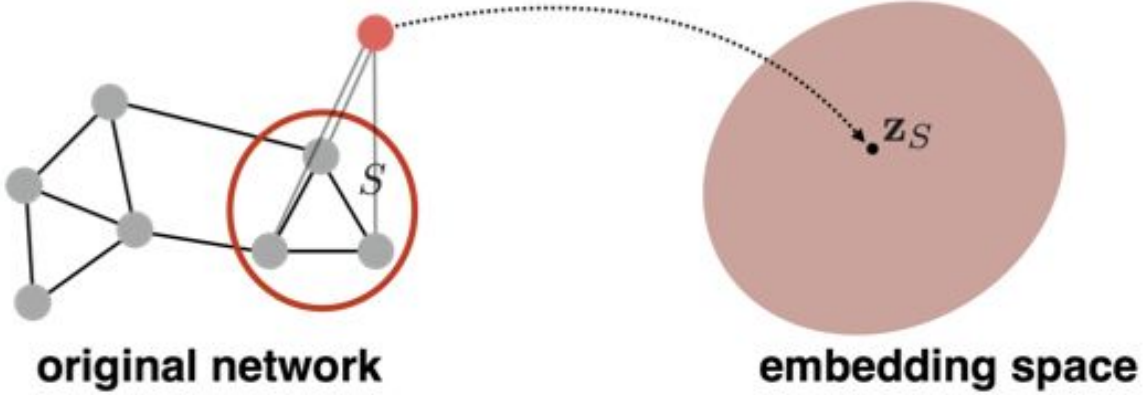
Эмбеддинги для графов

- Хотим закодировать информацию о всем графе
- Например, решать задачу классификации графов
    - Токсичность или нетоксичность веществ
    - Наличие нужного свойства лекарства
- Простое решение — суммировать или агрегировать эмбеддинги вершин

$$z_G = \sum_{v \in G} z_v$$

Эмбеддинги для графов

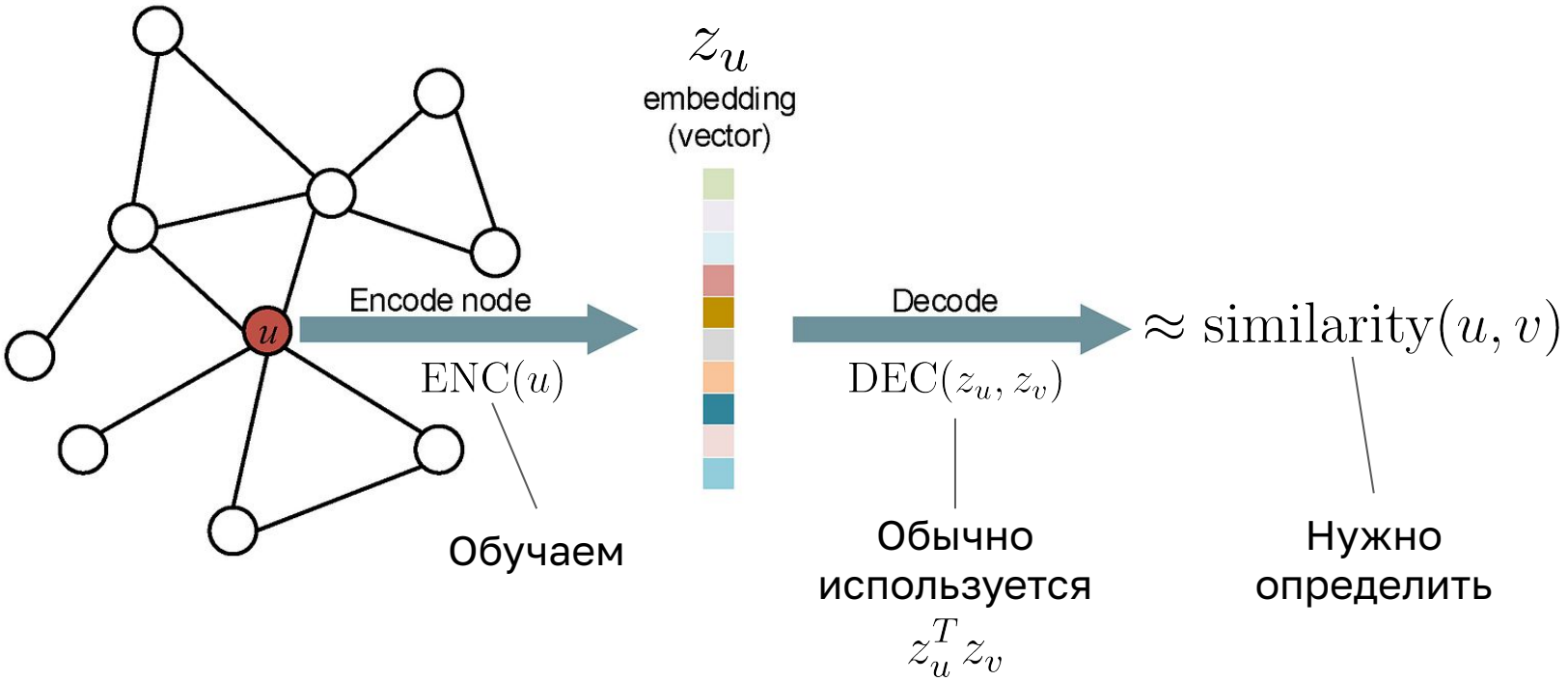
- Другая идея — добавить новую вершину и связать ее со всем графом или подграфом, для которого хотим получить эмбеддинг
- Затем использовать просто эмбеддинг этой новой вершины



Ограничения

- Рассмотренные сегодня методы для получения эмбеддингов вершин/графов не позволяют работать с новыми вершинами/графами (не из тренировочного набора)
    - Добавление нового пользователя соцсети
    - Придется пересчитывать все эмбеддинги
- Если вершины слишком далеко, то даже идентичная локальная структура не поможет найти сходство с помощью случайных блужданий
- Не используют признаки вершин, рёбер, графов

Заключение


z_u
embedding
(vector)
u
Encode node
$\mathrm{ENC}(u)$
Обучаем
Decode
$\mathrm{DEC}(z_u, z_v)$
Обычно
используется
$z_u^T z_v$
$\approx \mathrm{similarity}(u, v)$
Нужно
определить