graph represention

Contents

1	Intro	oduction	2
2	part	1-Node Representation Learning	2
	2.1	Node Representation Methods	2
		2.1.1 LINE	2
		2.1.2 DeepWalk	4
		2.1.3 Node2vec	4
	2.2	Graph and High-dimensional Data Visualization	6
		2.2.1 t-SNE	6
		2.2.2 Visualizing Large-scale and High-dimensional Data	-
	2.3	Knowledge Graph Embedding	-
		2.3.1 relation patterns	8
		2.3.2 RotatE	(
	2.4	A High-performance Node Representation System	11
		7. 1.1.g.: portorimino 11000 100p1000 1	-
3	part	2-Graph Neural Networks	11
	3.1		11
	3.2	Graph Convolutional Networks(GCN)	12
	3.3	GraphSAGE	13
	3.4	Gated Graph Neural Networks	13
		3.4.1 Gated Graph Neural Networks 介绍	14
		3.4.2 Message-Passing Neural Networks 介绍	14
	3.5	Graph Attention Networks(GAT)	14
	3.6	Subgraph Embeddings	15
4	part	3-Deep Generative Models for Graph Generation	16
	4.1	深度生成模型	16
		4.1.1 Variational Autoencoders (VAEs)	16
		4.1.2 Generative Adversarial Networks (GANs)	17
		4.1.3 Deep Auto-regressive Models	17
	4.2	GraphVAE	18
	4.3	JTVAE	19
	4.4	MolGAN	19
	4.5	GCPN	20
5	未来	方向	22
参	≸ AA	AI2019 的 tutorial:AAAI2019《图表示学习》Tutorial, 180 页 PPT 带你从入门到精通(下载)	

ppt 下载: https://pan.baidu.com/s/1hRjm1nbMcj4_ynZ0niE2JA

1 Introduction

graph 的几大传统 ml 任务:

• Node classification: 预测给定的结点的 type • Link prediction: 预测两个结点是否有边相连

• Community detection: 发现联系紧密的 nodes 的 clusters

• Network similarity: 两个(子) 网是否相似

目前的深度学习:

cnn: 固定大小的图片/网格rnn/w2v: 文本/序列

图更加复杂:

- 复杂的拓扑结构(例如,不像网格那样有 spatial locality(空间局部性,在最近的将来将用到的信息很可能与现在正在使用的信息在空间 地址上是临近的。))
- 没有固定的结点顺序或者参考点(reference point)(例如, isomorphism (同构) 问题)
- 经常是动态的并且有 multimodal (多模态) 的 features

2 part1-Node Representation Learning

2.1 Node Representation Methods

问题定义:给定 G=(V,E,W),其中,V 是结点集合,E 是边的集合,W 是边的权重集合。所谓的 node embedding 就是对结点 i 学习一个向量 $u_i\in R^d$ 。

相关工作:

- 传统 graph embedding 算法: MDS, IsoMap, LLE, Laplacian Eigenmap, ...。缺点: hard to scale up
- Graph factorization(Ahmed et al. 2013): 只适用于无向图,并非专门为网络表示而设计
- Neural word embeddings(Bengio et al. 2003): Neural language model; word2vec (skipgram), paragraph vectors, etc.

2.1.1 LINE

WWW2015 上的LINE: Large-scale Information Network Embedding

LINE 代码 (c++): https://github.com/tangjianpku/LINE

特点:

- 任意类型的网络(有向图、无向图、有/无权重)
- 明确的目标函数(一阶和二阶相似性(first/second proximity))
- 可扩展性
 - 异步 sgd
 - 百万级的结点和十亿级别的边: 单机数小时

2.1.1.1 一阶相似度

First-order Proximity(一阶相似度):两个**顶点之间**的**自身**相似(不考虑其他顶点)。因为有些结点的 link 并没有被观测到,所以一阶相似度不足以保存网络结构。

分布: (定义在**无向**边 i-j 上)

一阶相似度的经验分布:

$$\hat{p}_1(v_i, v_j) = \frac{w_{ij}}{\sum_{(m,n) \in E} w_{mn}}$$

一阶相似度的模型分布:

$$p_1(v_i, v_j) = \frac{\exp(\vec{u_i}^T \vec{u_j})}{\sum_{(m,n) \in V \times V} \exp(\vec{u_m}^T \vec{u_n})}$$

其中, $\vec{u_i}$ 是节点 i 的 embedding,其实就是 sigmoid:

$$p_1(v_i, v_j) = \frac{1}{1 + \exp(-\vec{u_i}^T \vec{u_j})}$$

目标函数是 KL 散度:

$$O_1 = KL(\hat{p_1}, p_1)$$

干掉常量 $\sum_{(m,n)\in E} w_{mn}$,还有 $\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} \log w_{ij}$ 之后:

$$O_1 = \sum_{(i,j)\in E} w_{ij} \log w_{ij} - \sum_{(i,j)\in E} w_{ij} \log p_1(v_i, v_j) \approx -\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} \log p_1(v_i, v_j)$$

只考虑一阶相似度的情况下,改变同一条边的方向对于最终结果没有什么影响。因此一阶相似度只能用于**无向图**,不能用于有向图。

2.1.1.2 二阶相似度

Second-order Proximity(二阶相似度): 网络中一对顶点 (u,v) 之间的二阶相似度是它们**邻近网络结构**之间的相似性。 分布:(定义在**有向**边 $i \to j$ 上)

邻近网络的经验分布:

$$\hat{p_2}(v_j|v_i) = \frac{w_{ij}}{\sum_{k \in V} w_{ik}}$$

邻近网络的模型分布,其中, u_i 是 v_i 被视为顶点时的表示, u_i' 是 v_i 被视为 "context" 时的表示:

$$p_2(v_j|v_i) = \frac{\exp(\vec{u_j'}^T \vec{u_i})}{\sum_{k \in V} \exp(\vec{u_k'}^T \vec{u_i})}$$

目标函数是 KL 散度:

$$O_2 = \sum_i KL(\hat{p}_2(\cdot|v_i), p_2(\cdot|v_i)) = -\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} \log p_2(v_j|v_i)$$

2.1.1.3 优化 trick

• sgd+negative sampling: 随机 sample 一条边,以及多个 negative 的边

例如针对二阶的,对每条边(i,j)来说,它的目标函数就是:

$$\log \sigma(\vec{u_{j}}^{T} \vec{u_{i}}) + \sum_{i=1}^{K} E_{v_{n} \sim P_{n}(v)} [\log \sigma(-\vec{u_{n}}^{T} \vec{u_{i}})]$$

其中 $\sigma(x) = 1/(1 + \exp(-x))$,设置 $P_n(v) \propto d_v^{3/4}$,其中 d_v 是节点的出度(即 $d_i = \sum_{k \in N(i)} w_{ik}$,其中 N(i) 是 v_i 的为起点的邻居的集合)。

针对一阶的,把上面式子里的第一项里的 $ec{u_j'}^T$ 换成 $ec{u_j'}^T$ 就行啦 \sim

• 边 (i,j) 的 embedding 的梯度:

$$\frac{\partial O_2}{\partial \vec{u_i}} = w_{ij} \frac{\partial \log \hat{p_2}(v_j|v_i)}{\partial \vec{u_i}}$$

- ullet 当边的权重方差很大的时候,从上式可知,目标函数的梯度是 p_2 的梯度再乘以边权重,所以目标函数的梯度的方差也会很大,这样会有问 $ar{m}$ 。
- 解决方法: **edge sampling**: 根据边的权重来采样边,然后把采样到的边当成 binary 的,也就是把每条边的权重看成一样的! (例如一个 边的权重是 w, 那么拆成 w 条 binary 的边)
- 复杂度: $O(d \times K \times |E|)$: d 是 embedding 的维数, K 是负样本的个数, |E| 是边的总数

2.1.1.4 讨论

- 对只有少量邻居的节点 (low degree vertices) 进行 embed:
 - 通过增加高阶邻居来扩展邻居
 - BFS(breadth-first search),使用广度优先搜索策略扩展每个顶点的邻域,即递归地添加邻居的邻居
 - 在大部分场景下,只增加二阶邻居就足够了
- 对新节点进行 emb(如果新节点和已有节点有边相连,可以如下方式来搞;否则,future work...):
 - 保持现有节点的 embedding 不变
 - 根据新节点的 embedding 求经验分布和模型分布,从而优化目标函数 w.r.t. 新 node 的 embedding

所以,对于新节点i,直接最小化如下目标函数:

$$-\sum_{j\in N(i)} w_{ji} \log p_1(v_j, v_i)$$

或者

$$-\sum_{j\in N(i)} w_{ji} \log p_2(v_j|v_i)$$

2.1.1.5 实验

LINE(1st) 只适用于无向图, LINE(2nd) 适用于各种图。

LINE (1st+2nd): 同时考虑一阶相似度和二阶相似度。将由LINE (1st) 和LINE (2nd) 学习得到的两个向量表示,**连接成一个更长的向**量。在连接之后,对维度**重新加权以平衡两个表示**。因为在无监督的任务中,设定权重很困难,所以**只应用于监督学习**的场景。

更适合的方法是共同训练一阶相似度和二阶相似度的目标函数,比较复杂,文章中没有实现。

2.1.2 DeepWalk

KDD14 上的DeepWalk: Online Learning of Social Representations

使用学习 word representation 的方法来学习 node representation(例如 skip gram)

将网络上的随机游走视为句子。

分成两步:

- 通过随机游走生成结点的 context
- 预测周围的节点:

$$p(v_{j}|v_{i}) = \frac{\exp(\vec{u_{i}'}^{T}\vec{u_{j}})}{\sum_{k \in V} \exp(\vec{u_{k}'}^{T}\vec{u_{i}})}$$

2.1.3 Node2vec

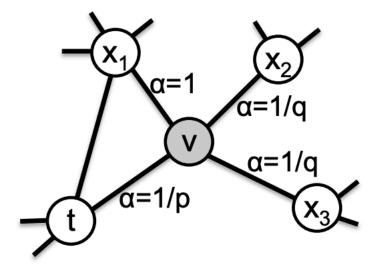
KDD16 上的node2vec: Scalable Feature Learning for Networks

通过如下混合策略去寻找一个 node 的 context:

- Breadth-firstSampling(BFS): homophily (同质性)
- Depth-firstSampling(DFS): structuralequivalence (结构等价)

使用带有参数 p 和 q 的 **Biased Random Walk** 来进行 context 的扩展,在 BFS 和 DFS 中达到一个平衡,同时考虑到微观局部 (BFS) 和宏观全局 (DFS) 的信息,并且具有很高的适应性:

- p: Return parameter,控制在 walk 的过程中,revisit 一个节点的概率,对应 BFS
- q: In-out parameter, 控制探索 "outward" 节点的概率, 对应 DFS
- 在有标签的数据上,用 ${f cross\ validation}$ 来寻找最优的 p 和 q



刚从 $\operatorname{edge}(t,v)$ 过来,现在在节点 v 上,要决定下一步 (v,x) 怎么走:

$$\alpha_{pq}(t,x) = \begin{cases} \frac{1}{p} & if \ d_{tx} = 0\\ 1 & if \ d_{tx} = 1\\ \frac{1}{q} & if \ d_{tx} = 2 \end{cases}$$

其中的 d_{tx} 表示节点 t 到节点 x 间的最短路径:

- 为0表示回到节点t本身
- 为 1 表示节点 t 和节点 x 直接相连,但上一步却选择了节点 v
- 为 2 表示节点 t 和 x 不直接相连,但节点 v 和节点 x 直接相连

最简单的给 random walk 加上 bias 的方法就是转移概率 $\pi_{vx}=w_{vx}$,而我们的方法就是 $\pi_{vx}=\alpha_{pq}(t,x)w_{vx}$,相当于还考虑了跳到 v 之前的节点 t。

优化目标和 LINE 的一阶相似度类似

LINE、DeepWalk、Node2vec 的对比:

Algorithm	Neighbor Expansion	Proximity	Optimization	Validation Data	
LINE	BFS	1 st or 2 nd	Negative Sampling	No	
DeepWalk	Random	2 nd	Hierarchical Softmax	No	
Deepwan	Nanaom	_	Theraremean sortmax		
Node2Vec	BFS + DFS	1 st	Negative Sampling	Yes	

node representation 的应用:

- Node classification (Perozzi et al. 2014, Tang et al. 2015a, Grover et al. 2015)
- Node visualization (Tang et al. 2015a)
- Link prediction (Grover et al. 2015)
- Recommendation (Zhao et al. 2016)
- Text representation (Tang et al. 2015a, Tang et al. 2015b)

node representation 的扩展:

- Leverage global structural information (Cao et al. 2015)
- Non-linear methods based on autoencoders (Wang et al. 2016)
 Matrix-factorization based approaches (Qiu et al. 2018)
- Directed network embedding (Ou et al. 2016)
- Signed network embedding (Wang et al. 2017)
- Multi-view networks (Qu and Tang et al. 2017)
- Networks with **node attributes** (Yang et al. 2015)
- Heterogeneous(异构) networks (Chang et al. 2015)
- Task-specific network embedding (Chen et al. 2017)

2.2 Graph and High-dimensional Data Visualization

2.2.1 t-SNE

高维数据可视化的一个 state-of-the-art 的方法, tensorboard 就用的这个。

缺点:

- K-NNG(K-Nearest Neighbor Graph) construction: 复杂度是 O(NlogN), 假设图中有 N 个数据点
- Graph layout: 复杂度是 O(NlogN)
- 对参数非常敏感(Very sensitive parameters)

2.2.2 Visualizing Large-scale and High-dimensional Data

www16 的 best paper 提名Visualizing Large-scale and High-dimensional Data

largevis 代码 (c++&python): https://github.com/lferry007/LargeVis

特点:

- K-NNG construction 的高效近似:
 - 比 t-SNE 的速度快 30 倍 (300w 的数据点)
 - 更好的 time-accuracy tradeoff
- graph layout 的高效的 probabilistic model
 - 从 O(NlogN) 到 O(N)
 - 比 t-SNE 快 7 倍 (300w 的数据点)
 - 更好的 visualization layouts
 - 在不同数据集间有更 stable 的参数

2.2.2.1 Learning the Layout of KNN Graph

- 保持 2D/3D 空间的节点的相似度
 - 对每个节点使用一个 2D/3D 的向量来表示
 - 保持相似的数据距离近而不相似的距离远
- 观测节点 (i,j) 间的一条 **binary** 的边的概率:

$$p(e_{ij} = 1) = \frac{1}{1 + \|\vec{y_i} - \vec{y_j}\|^2}$$

• 观测节点 (i,j) 间的一条**有权重**的边的 likelihood:

$$p(e_{ij} = w_{ij}) = p(e_{ij} = 1)^{w_{ij}}$$

2.2.2.2 A Probabilistic Model for Graph Layout

目标函数:

$$O = \prod_{(i,j)\in E} p(e_{ij} = w_{ij}) \prod_{(i,j)\in \bar{E}} (1 - p(e_{ij} = w_{ij})^{\gamma})$$

其中 γ 是给 negative edge 赋值的 unified weight

- 随机 sample 一些 negative edges
- 使用异步 sgd 来优化
- 时间复杂度:与数据点数是线性关系

2.3 Knowledge Graph Embedding

知识图谱是异构图,有多种类型的 relations

用 (head entity, relation, tail entity) 的三元组来表示 facts 的集合。

related works:

- 将 entities 用 embeddings 来表示
- 将 relations 用 embeddings 或者 matrices 来表示

Model	Score Function	
SE (Bordes et al., 2011)	$-\left\ \boldsymbol{W}_{r,1}\mathbf{h}-\boldsymbol{W}_{r,2}\mathbf{t}\right\ $	$\mathbf{h},\mathbf{t}\in\mathbb{R}^{k},oldsymbol{W}_{r,\cdot}\in\mathbb{R}^{k imes k}$
TransE (Bordes et al., 2013)	$-\ \mathbf{h}+\mathbf{r}-\mathbf{t}\ $	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$
TransX	$-\ g_{r,1}(\mathbf{h}) + \mathbf{r} - g_{r,2}(\mathbf{t})\ $	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t}\in\mathbb{R}^k$
DistMult (Yang et al., 2014)	$\langle {f r}, {f h}, {f t} angle$	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t}\in\mathbb{R}^k$
ComplEx (Trouillon et al., 2016)	$\operatorname{Re}(\langle \mathbf{r}, \mathbf{h}, \overline{\mathbf{t}} \rangle)$	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t}\in\mathbb{C}^k$
HolE (Nickel et al., 2016)	$\langle {f r}, {f h} \otimes {f t} angle$	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t}\in\mathbb{R}^k$
ConvE (Dettmers et al., 2017)	$\langle \sigma(\operatorname{vec}(\sigma([\overline{\mathbf{r}},\overline{\mathbf{h}}]*\mathbf{\Omega}))oldsymbol{W}),\mathbf{t} angle$	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t}\in\mathbb{R}^k$
RotatE	$- \ \mathbf{h} \circ \mathbf{r} - \mathbf{t}\ ^1$	$\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t} \in \mathbb{C}^k, r_i = 1$

kg 的核心任务: 预测 missing links

kg 的核心 idea: 根据观测到的 knowledge facts, 对 kg 中的 relation patterns 进行建模和 infer。也就是学习 relations 的 relations。

2.3.1 relation patterns

- 对称和反对称:
 - 对称 (Symmetric): 例如, marriage
 - 反对称 (Antisymmetric): 例如, Filiation(父子关系)

形式化定义:

$$r \ is \ Symmetric \qquad r(x,y) \Rightarrow r(y,x) \ if \ \forall x,y$$
 $r \ is \ Antisymmetric \qquad r(x,y) \Rightarrow \neg r(y,x) \ if \ \forall x,y$

- Inverse relations:
 - Hypernym(上位词) and hyponym(下位词): 花是鲜花的上位词,鲜花是花的下位词
 - 丈夫和妻子

形式化定义:

$$r_1$$
 is inverse to relation r_2 : $r_2(x,y) \Rightarrow r_1(y,x)$ if $\forall x,y$

- Composition Relations
 - My mother's husband is my father

形式化定义:

$$r_1$$
 is a composition of relation r_2 and relation r_3 : $r_2(x,y) \wedge r_3(y,z) \Rightarrow r_1(x,z)$ if $\forall x,y,z$

目前的方法没有一种能同时 infer 上面这所有 3 种 relation patterns, 只有 RotatE 可以!!

Model	Score Function	Symmetry	Antisymmetry	Inversion	Composition
SE	$-\left\ \boldsymbol{W}_{r,1}\mathbf{h}-\boldsymbol{W}_{r,2}\mathbf{t}\right\ $	X	Х	Х	Х
TransE	$-\ \mathbf{h}+\mathbf{r}-\mathbf{t}\ $	X	✓	✓	✓
TransX	$\ -\ g_{r,1}(\mathbf{h})+\mathbf{r}-g_{r,2}(\mathbf{t})\ $	✓	✓	X	X
DistMult	$\langle \mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t} angle$	✓	Х	X	Х
ComplEx	$\mathrm{Re}(\langle \mathbf{h}, \mathbf{r}, \overline{\mathbf{t}} \rangle)$	✓	✓	✓	Х
RotatE	$-\left\ \mathbf{h}\circ\mathbf{r}-\mathbf{t}\right\ $	✓	✓	✓	✓

2.3.2 RotatE

ICLR19 RotatE: Knowledge Graph Embedding by Relational Rotation in Complex Space.

RotatE 代码 (pytorch): https://github.com/DeepGraphLearning/KnowledgeGraphEmbedding

每一个 relation 可以看成是从 source entity 到 target entity 在 complex(复数) 向量空间上的 elementwise rotation

RotatE 可以同时建模和 infer 上面这所有 3 种 relation patterns

优化 RotatE 可以用高效的 negative sampling

在 kg 的 link prediction 的 benchmarks 中能达到 state-of-the-art 的效果

2.3.2.1 Relation as Elementwise Rotation in Complex Space

head entity: $h \in \mathbb{C}^k$; tail entity: $t \in \mathbb{C}^k$

relation r: 是一个从 h 到 t 的 elementwise rotation:

$$t = h \circ r$$
, where $|r_i| = 1$

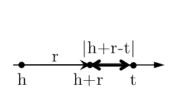
其中, \circ 是 element-wise product,所以 $t_i=h_ir_i$,其中

$$r_i = e^{\mathbf{i}\theta_{r,i}}$$

里面的 $\theta_{r,i}$ 是 r 的第 i 维的 phase angle, e 的 $\mathbf{i}\theta_{r,i}$ 的第一个 \mathbf{i} 是虚数单位,第二个 i 是第 \mathbf{i} 维。 定义 distance function:

$$d_r(h,t) = ||h \circ r - t||$$

- 如左图,transE 建模的是 h+r 和 t 的距离,也就是在xy **直线**上以 translation 的方式建模 r;
- 如右图,RotatE 建模的是 $h \circ r$ 和 t 的距离,也就是在**复平面**上以 **rotation** 的方式建模 r。



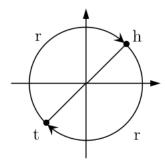
h r hr

(a) TransE models r as translation in real line.

(b) RotatE models r as rotation in complex plane.

先科普一下,在复变函数中,自变量 z 可以写成 $z=r imes(\cos\theta+\mathbf{i}\sin\theta)$,r 是 z 的模,即 r=|z|; θ 是 z 的辐角,记作 Arg(z)。在 $-\pi$ 到 π 间的辐角称为辐角主值,记作 arg(z)。指数形式 $z=r(\cos\theta+i\sin\theta)=re^{\mathbf{i}\theta}$ 。

• relation r 是对称的,当且仅当, $r_i=\pm 1$,也就是 $heta_{r,i}=0~or~\pi$,例如下图, $r_i=-1$ 也就是 $heta_{r,i}=\pi$



(c) RotatE: an example of modeling symmetric relations **r** with $r_i = -1$

• relation r 是反对称的,当且仅当, $r\circ r \neq 1$

• relation r_1 和 r_2 是 inverse,当且仅当, $r_2=r_1^{-1}$,也就是 $\theta_{2,i}=-\theta_{1,i}$ • relation $r_3=e^{\mathbf{i}\theta_3}$ 是两个 relation $r_1=e^{\mathbf{i}\theta_1}$ 和 $r_2=e^{\mathbf{i}\theta_2}$ 的 composition,当且仅当, $r_3=r_1\circ r_2$,也就是 $\theta_3=\theta_1+\theta_2$

2.3.2.2 RoteE 的优化

Negative sampling loss 如下:

$$L = -\log \sigma(\gamma - d_r(h, t)) - \sum_{i=1}^{k} \frac{1}{k} \log \sigma(d_r(h'_i, t'_i) - \gamma)$$

其中的 γ 是一个 fixed margin, σ 是 sigmoid, (h_i', r, t_i') 是第 i 个 negative 三元组。

然后我们要变成 self-adversarial negative sampling:

- 传统地, 负样本通过 uniform 的方式(均匀分布, 即等概率)来采样
 - 随着训练的继续,因为很多样本是 obviously false 了,所以这种采样是 inefficient 的
 - 没有提供有用的信息
- self-adversarial negative sampling:
 - 根据当前的 embedding model 来进行 negative 三元组的采样
 - 从更简单的 samples 开始,逐步变难
 - Curriculum Learning (递进学习, 课程学习, 可以参考https://blog.csdn.net/qq 25011449/article/details/82914803), 从如下分布中进行采样:

$$p(h'_{j}, r, t'_{j} | \{(h_{i}, r_{i}, t_{i})\}) = \frac{\exp \alpha f_{r}(h'_{j}, t'_{j})}{\sum_{i} \exp \alpha f_{r}(h'_{i}, t'_{i})}$$

其中, α 是 sampling 的 temperature, $f_r(h_i',t_j')$ 衡量三元组的 salience(突出程度)

但在实际应用中,从上面这个分布去 sample 的代价是很大的,所以我们把这个概率直接作为负样本的权重,所以最终的 loss 如下:

$$L = -\log \sigma(\gamma - d_r(h, t)) - \sum_{i=1}^{k} p(h'_i, r, t'_i) \log \sigma(d_r(h'_i, t'_i) - \gamma)$$

2.4 A High-performance Node Representation System

A High-Performance CPU-GPU Hybrid System for Node Embedding, 投稿 www19

algorithm and system co-design 的一个 node embeddings 的系统

- CPUs: online random walk generation
- GPUs: training node embeddings
- Efficient and effective collaboration strategies between CPUs and GPUs

比现有的系统快 50 倍,一个有 100w 节点的网络只要 1min

3 part2-Graph Neural Networks

3.1 基础知识

通过一个 encoder 函数 ENC,把原始网络的结点 u 和结点 v 映射到 embedding space 的 d 维向量 z_u 和 z_v ,然后希望原空间的相似度和 embedding space的相似度(例如内积)接近:

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

之前的 encoder 是 shallow 的,也就是一个 Z 矩阵,使用 embedding lookup,矩阵大小是 node_num * emb_dim。缺点如下:

- 需要 O(|V|) 的参数: 每个 node 有自己的 unique 的 embedding vector, 没有参数共享!!
- Inherently "transductive": 固有的『直推式』。也就是说,对于训练中没有见过的结点,不可能生成一个 embedding
- 没有包含节点 feature: 很多图有一些我们必须要考虑和利用好的 feature。

因此需要使用 deeper 的 encoder, 而这些更复杂的 encoder 也自带了 similarity 函数。

参考 2017 年的综述Representation Learning on Graphs: Methods and Applications

还有 2005 年的The Graph Neural Network Model

定义:

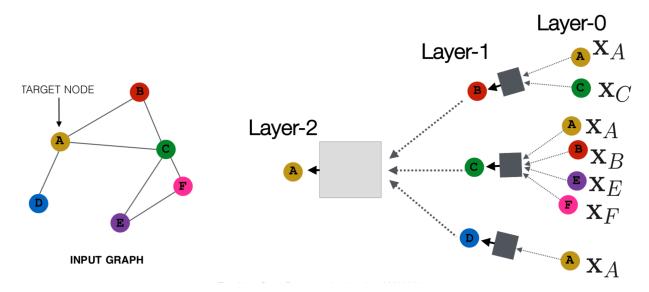
- G: 图
- V: 节点集合
- A: 邻接矩阵 (假设是 binary 的)
- $X \in R^{m \times |\hat{V}|}$: 节点 features 的矩阵
 - 类别型的特征、文本、图像数据等
 - 节点度数、clustering coefficients(聚集系数,参考https://blog.csdn.net/pennyliang/article/details/6838956)等
 - Indicator vectors(例如,每个节点的 one-hot vector)

3.1.0.1 Neighborhood Aggregation

核心思想:使用 nn 对节点的邻居的信息进行汇聚,生成这个节点的 embedding

如下图:

- node 在每一层都有 embedding
- 模型的 depth 可以任意
- 节点 u 在第 0 层的 embedding 是它的 input-feature x_u



neighborhood aggregateion 其实数学上和 spectral graph convolutions(参考Geometric deep learning: going beyond Euclidean data) 很像,可以看成是一种 center-surround filter。

关键在于上图的 layer1 和 layer2 用什么样的网络结构,一种 basic 的方法就是,layer2 先 average,然后再接一个神经网络:

$$\begin{split} h_v^0 &= x_v \\ h_v^k &= \sigma(W_k \sum_{u \in N(v)} \frac{h_u^{k-1}}{|N(v)|} + B_k h_v^{k-1}), \forall k > 0 \\ z_v &= h_v^K \end{split}$$

- h_v^0 : 第 0 层的 embedding 就是 node 的特征 h_v^k : 第 k 层的 embedding,包括的两项分别是邻居节点的前一层的 emb 的平均,还有当前节点的前一层的 emb
- σ : 非线性,可以是 relu/tanh 等
- W_k 和 B_k 是两个待训练的矩阵
- z_v : 最终的输出结果,也就是第 K 层的输出

训练可以使用无监督的方法, loss 可以是前面讲到的任意的 node embedding 的方法:

- Random walks (node2vec, DeepWalk)
- · Graph factorization
- 或者直接训练保证相似的 node 有相似的 embedding

也可以直接用监督学习的方法来训(例如是一个 node 的分类问题),其中的 heta 是 classification weights:

$$L = \sum_{v \in V} y_v \log(\sigma(z_v^T \theta) + (1 - y_v) \log(1 - \sigma(z_v^T \theta)))$$

归纳能力 (inductive capability):

- 所有节点共享相同的 aggregation parameters
- 模型参数是 |V| 的 $\mathrm{sublinear}$,而且可以对没见过的 node 生成 embed

3.2 **Graph Convolutional Networks(GCN)**

参考 ICLR17 的Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks

在 neighborhood aggregation 上有一些小改动:

$$h_v^k = \sigma(W_k \sum_{u \in N(v) \cup v} \frac{h_u^{k-1}}{\sqrt{|N(u)||N(v)|}})$$

和普通 gnn 的区别:

- self 和 neighbor 的 embedding 共用同一个权重 W_k ,而普通的 gnn 是两个权重 B_k 和 W_k ,好处就是有**更多的参数共享**
- 每一个 neighbor 都有 normalization(即 $\sqrt{|N(u)||N(v)|}$), 好处就是可以**减小度数多的邻居的权重**

3.3 GraphSAGE

参考 NIPS17 的Inductive Representation Learning on Large Graphs

出发点: 把上面在 aggregate 之后使用的神经网络换成任意一个可以把一堆 vectors 映射成一个单独的 vector 的可微函数(也就是下面的 $AGG(\{h_u^{k-1}, \forall u \in N(v)\})$):

$$h_{v}^{k} = \sigma([A_{k} \cdot AGG(\{h_{v}^{k-1}, \forall u \in N(v)\}), B_{k}h_{v}^{k-1}])$$

上面的 $[A_k \cdot AGG(\{h_u^{k-1}, \forall u \in N(v)\}), B_k h_v^{k-1}]$ 是把这 self embedding 和 neighbor embedding 这两个向量 **concate** 到一起。

AGG 的变种:

• mean:

$$AGG = \sum_{u \in N(v)} \frac{h_u^{k-1}}{|N(v)|}$$

• pool: 对 neighbor vectors 进行转换(例如下面的 Q),并进行 symmetric vector 函数变换(例如下面的 γ 就是 element-wise mean/max)

$$AGG = \gamma(\{Qh_u^{k-1}, \forall u \in N(v)\})$$

• lstm: 对 neighbor 的一个随机排列 (random permutation) 使用 lstm

$$AGG = LSTM([h_u^{k-1}, \forall u \in \pi(N(v))])$$

3.4 Gated Graph Neural Networks

参考 ICLR16 的Gated Graph Sequence Neural Networks

参考 ICML17 的Neural Message Passing for Quantum Chemistry

GCNs 和 GraphSAGE 大部分情况下只有 2-3 层深,层数加深有如下挑战:

- 参数太多导致过拟合
- bp 的过程中出现梯度消失/爆炸

思路:

- 层间参数共享
- Recurrent state update: 各层的神经网络使用 RNN。

3.4.1 Gated Graph Neural Networks 介绍

Recurrent state update 这种方法分成两步:

• 在 step k 从 neighbors 获取 "message", 这个聚合函数与 k 无关:

$$m_v^k = W \sum_{u \in N(v)} h_u^{k-1}$$

• 通过 gru 来更新节点的 "state"。新节点的 state 依赖 old state 以及 neighbors 的 "message":

$$h_v^k = GRU(h_v^{k-1}, m_v^k)$$

优点:

- 可以处理 20+ 的层数
- 绝大部分真实世界的网络有比较小的 diameters (直径, 放大倍率), 大部分小于等于 7
- 能够将 global 的图结构的复杂信息传播给所有结点
- 对复杂网络的表示很有用(例如 Logical formulas,或者程序)

3.4.2 Message-Passing Neural Networks 介绍

从以下两个方面来对 gated graph neural networks 进行泛化:

• 在 step k 从 neighbors 获取 "message":

其中的 M 可以是一个一般 (generic) 的 "message" 函数,例如 sum 或者 MLP 。 $e_{u,v}$ 把**边的信息**考虑进来了!

$$m_v^k = \sum_{u \in N(v)} M(h_u^{k-1}, h_v^{k-1}, e_{u,v})$$

• 更新 node 的 "state":

其中的 U 可以是一个一般 (generic) 的 "update" 函数,例如 LSTM 或者 GRU

$$h_v^k = U(h_v^{k-1}, m_v^k)$$

所以,其实这是一个通用的 conceptual (概念性的) framework, 可以归纳大部分 GNNs。

Graph Attention Networks(GAT)

参考 ICLR18 的Graph Attention Networks

key idea: 某些 neighbor 更重要, 所以可以使用 attention 机制来搞

$$h_v^k = \sigma(\sum_{u \in N(v) \cup \{v\}} \alpha_{v,u} W^k h_u^{k-1})$$

其中:

- $\sum_{u\in N(v)\cup\{v\}}$ 意味着把所有 neighbor(包括节点自己!!) 都加起来 $lpha_{v,u}$ 是学习到的 attention 权重

各种 attention 都是可以的, 原始 GAT 用的是如下 attention 权重:

$$\alpha_{v,u} = \frac{\exp(LeakyReLU(a^T[Qh_v,Qh_u]))}{\sum_{u' \in N(v) \cup \{v\}} \exp(LeakyReLU(a^T[Qh_v,Qh_{u'}]))}$$

对照上面讲到的通用的 conceptual (概念性的) framework, 其实就是把 attention 加到获取 "message" 那步里去。

其他新的东西:

- Generalizations based on spectral convolutions:
 - Geometric Deep Learning (Bronstein et al., 2017, Geometric deep learning: going beyond Euclidean data)
 - Mixture Model CNNs (Monti et al., 2017, Geometric deep learning on graphs and manifolds using mixture model CNNs)
- Speed improvements via subsampling:
 - FastGCNs (Chen et al., 2018, FastGCN: Fast Learning with Graph Convolutional Networks via Importance Sampling)
 - Stochastic GCNs (Chen et al., 2017, Stochastic Training of Graph Convolutional Networks with Variance Reduction)

还可以参考专栏|深入理解图注意力机制

3.6 Subgraph Embeddings

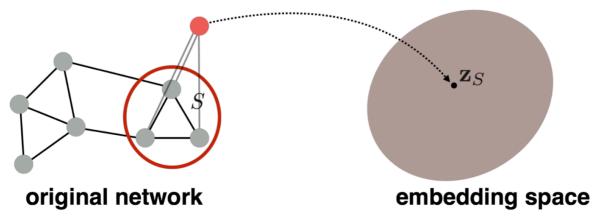
• 方法一: 直接把子图中的 node 的 emb 进行 sum 或者 avg

$$z_S = \sum_{v \in S} z_v$$

见 2016 年的Convolutional Networks on Graphs for Learning Molecular Fingerprints

• 方法二:引入"virtual node"来表示子图,并走一个完整的 gnn

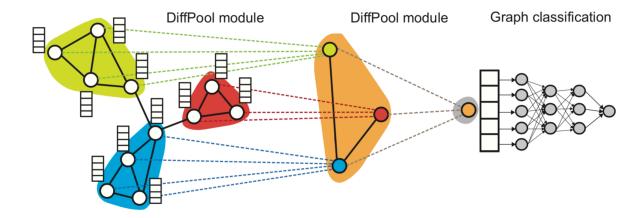
如下图



见 2016 年的Gated Graph Sequence Neural Networks

• 方法三: 对节点进行层次聚类

见 2018 年的Hierarchical Graph Representation Learning with Differentiable Pooling



大致流程如下:

- 1. 在图上跑 GNN, 得到 node 的 embeddings
- 2. 对 node embeddings 进行聚类,得到一个 "coarsened" graph (粗糙的)
- 3. 在 "coarsened" graph 上跑 GNN
- 4. 重复

学习 clustering 的不同方式:

- 使用 softmax weight 的 soft clustering (2018 年的Hierarchical Graph Representation Learning with Differentiable Pooling)
- 使用 hard clustering (2018 年的Towards Sparse Hierarchical Graph Classifiers和 2018 年的GRAPH U-NET)

4 part3-Deep Generative Models for Graph Generation

4.1 深度生成模型

深度生成模型的目标:为数据分布 p(x) 隐式或者显式地建模,x 是一个高维随机变量

4.1.1 Variational Autoencoders (VAEs)

原始论文: 2014 年 Kingma et al. 的Auto-Encoding Variational Bayes

Latent variable model:

- $-\uparrow$ encoder $q_{\phi}(z|x)$
- $-\uparrow$ decoder $q_{\theta}(x|z)$

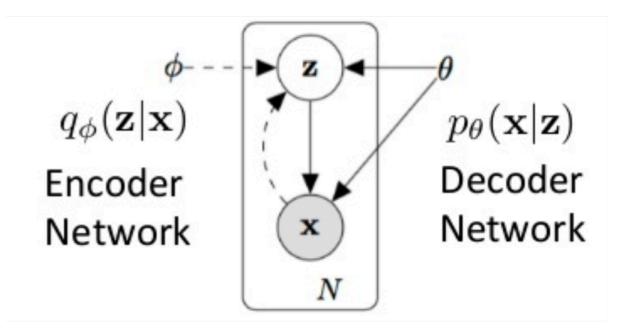
最大化 \log likelihood $\log p(x)$: inference 是 intractable (棘手) 的,因为 z 是连续的

最大化 variational 的下界 $L(\phi, \theta; x)$

通过 reparametrization trick 来 jointly 优化 encoder 和 decoder:

$$L(\phi, \theta; x) = E_{q_{\phi}(z|x)} \log p_{\theta}(x|z) - KL[q_{\phi}(z|x)||p(z)]$$

其中的 $E_{q_\phi(z|x)}\log p_\theta(x|z)$ 是 reconstruction, $KL[q_\phi(z|x)||p(z)]$ 是 regularization



小结一下,encoder 是 q_{ϕ} ,decoder 是 p_{θ} ,encoder 根据 x 生成 z,decoder 根据 z 生成 x。

可以参考https://blog.csdn.net/antkillerfarm/article/details/80648805

重构的过程是希望没噪声的,而 KL loss 则希望有高斯噪声的,两者是对立的。所以,VAE 跟 GAN 一样,内部其实是包含了一个对抗的过程,只不过它们两者是混合起来,共同进化的。

公式推导可以看https://blog.csdn.net/weixin 40955254/article/details/82315909

4.1.2 Generative Adversarial Networks (GANs)

原始论文: 2014 年 Goodfellow et al. 的Generative Adversarial Networks

一个两个玩家的 Minimax 游戏:

- Generator $G: z \to x$ 。 目标是迷惑 discriminator
- Discriminator $D: x \to \{0,1\}$ 。目标是区分真实数据和生成的数据

$$\min_{G} \max_{D} V(D, G) = E_{x \sim p_{data}(x)}[\log D(x)] + E_{z \sim p_{z}(z)}[\log(1 - D(G(z)))]$$

直观地理解,这个式子包括两部分,一部分是判别真实数据是正例的概率,另一部分是判别生成的数据是负例的的概率,对于 G 来讲,期望这个式子 \min ,而对于 D 来讲,期望这个式子 \max

4.1.3 Deep Auto-regressive Models

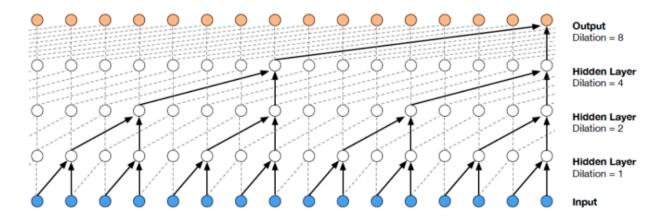
深度自回归模型: 例如 RNN

例如, PixelRNN (2016年 Oort et al. 的Pixel Recurrent Neural Networks) 和 PixelCNN (2016年也是 Oort et al. 的Conditional Image Generation with PixelCNN Decoders):

- 一个 pixel 一个 pixel 地生成图像
- 通过一个神经网络来对条件概率分布建模

WaveNet (2017 年 Oort et al. 的WaveNet: A Generative Model for Raw Audio)

$$p(x) = \prod_{i=1}^{n^2} p(x_i|x_1, ..., x_{i-1})$$



但如果要用在图上,有以下几个挑战:

- 图的 structures 和 size 是不一样的
- node 之间并没有顺序
- 离散

4.2 GraphVAE

2018 年 Simonovsky 和 Komodakis 的GraphVAE: Towards Generation of Small Graphs Using Variational Autoencoders 提出了生成图的 VAE 的框架:

- 输入 graph
- encoder: gnn+gated pooling=>graph representation, 参考 Li et al. 在 2015 的
- decoder: 输出一个预先定义好 max size 的 probalistic fully-connected graph
 - 对节点、边、节点和边的属性的存在性单独建模
 - graph matching 是必须的

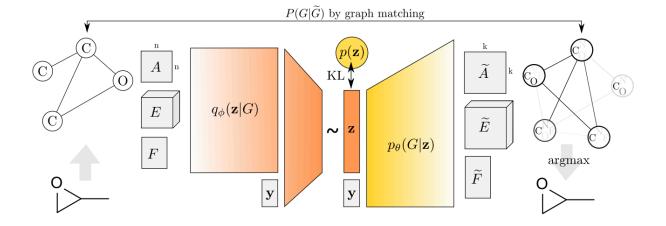


Figure 1. Illustration of the proposed variational graph autoencoder. Starting from a discrete attributed graph G = (A, E, F) on n nodes (e.g. a representation of propylene oxide), stochastic graph encoder $q_{\phi}(\mathbf{z}|G)$ embeds the graph into continuous representation \mathbf{z} . Given a point in the latent space, our novel graph decoder $p_{\theta}(G|\mathbf{z})$ outputs a probabilistic fully-connected graph $\widetilde{G}=(\widetilde{A},\widetilde{E},\widetilde{F})$ on predefined $k \ge n$ nodes, from which discrete samples may be drawn. The process can be conditioned on label y for controlled sampling at test time. Reconstruction ability of the autoencoder is facilitated by approximate graph matching for aligning G with \widetilde{G} .

输入的 graph 是 G=(A,E,F): A 是邻接矩阵; E 是边的属性的 tensor; F 是节点的属性的矩阵

decoder 的输出:

- 限制 domain 在最多 max k 个节点的所有 graphs 的集合中(k 一般是 10 左右)
- 一次輸出一个 k 个节点的 probalistic fully-connected graph $\tilde{G}=(\tilde{A},\tilde{E},\tilde{F})$
 - 以 bernoulli variables 建模 nodes 和 edges 的 existence
 - 以 multinomial variables 建模 nodes 和 edges 的 attributes
 - $-\tilde{A} \in [0,1]^{k imes k}$: 同时包括 node probabilities \tilde{A}_{aa} 和 edge probabilities \tilde{A}_{ab} , 其中 $a \neq b$ $-\tilde{E} \in [0,1]^{k imes k imes de}$: 表示 edge attributes 的 probabilities $-\tilde{F} \in [0,1]^{k imes de}$: 表示 node attributes 的 probabilities
- inference: $\stackrel{\cdot}{t}$ $\stackrel{\cdot}{L}$, $\stackrel{\cdot}{E}$, $\stackrel{\cdot}{F}$ 中使用 edge-wise 和 node-wise 的 argmax
- 计算 reconstruction loss 的时候,需要使用 graph matching

缺点:

- graph 的 max size 必须是预先定义好的
- graph matching 是必须的

4.3 JTVAE

Junction Tree Variational Autoencoder for Molecular Graph Generation

- 利用了化学领域的知识
 - 每个 molecule(分子) 可以表示为化学 substructures(如环、键 (bond)) 的树状的 scaffold(骨架、支架)
- 生成一个树状结构的 object
 - 用来表示 subgraph components 的 scaffold
- 将 substructure 组装成一个 coherent(连贯的) molecular graph

MolGAN 4.4

MolGAN: An implicit generative model for small molecular graphs

• 一个 implicit, likelihood-free 的生成模型: 用于分子生成

- 结合了强化学习来 encourage 生成的带有化学属性的分子
- Generator: 从先验分布中生成分子
- Discriminator: 区分生成的 sample 和真实的 sample
- · Reward network:
 - 学习给每个分子赋值一个 reward, 这个 reward 要和 external software 提供的 score 进行 match
 - invalid 的分子通常得到的 reward 是 0

整体架构图如下:

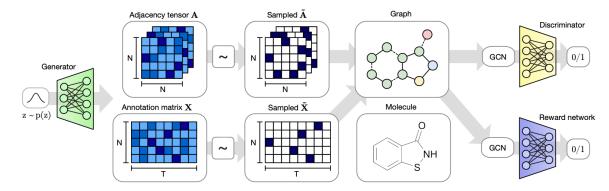


Figure 2. Outline of MolGAN. From left: the generator takes a sample from a prior distribution and generates a dense adjacency tensor A and an annotation matrix X. Subsequently, sparse and discrete \tilde{A} and \tilde{X} are obtained from A and X respectively via categorical sampling. The combination of \vec{A} and \vec{X} represents an annotated molecular graph which corresponds to a specific chemical compound. Finally, the graph is processed by both the discriminator and reward networks that are invariant to node order permutations and based on Relational-GCN (Schlichtkrull et al., 2017) layers.

Generator:

- 生成一个 probabilistic fully-connected graph:

 - $-X \in R^{N \times T} : \text{ atom types}$ $-A \in R^{N \times N \times Y} : \text{ bond types}$
- 目标函数:

$$L(\theta) = \lambda L_{WGAN} + (1 - \lambda)L_R L$$

Discriminator & Reward network:

- 通过 neural message passing algorithm 的一个变种-Relational-GCN, Schlichtkrull et al. 2017 的Modeling relational data with graph convolutional networks来学习分子/graph 的表示
- discriminator 和 reward network 用相同的网络结构(但参数不共享)
- reward network 用来近似 external software 的打分 (使用真实的 samples 和生成的 samples 进行训练)

优缺点:

- 不需要 graph matching
- graphs/分子的 max size 仍然需要预先定义

4.5 GCPN

You et al. 在 2018 的Graph Convolutional Policy Network for Goal-Directed Molecular Graph Generation

- 将分子的生成看成序列决策问题
 - 增加节点和边
 - 一个马尔可夫决策过程
- 目标: 发现分子式,能优化融入了 chemical rules 的特定的 properties
- GCPN: 一个结合了 RL 的面向目标 (goal-directed) 的通用的 model

- 使用 policy gradients 来优化 adversarial loss 和 domain-specific rewards
- 能够在一个融入了 domain-specific rules 的 environment 中生效

整体架构图如下:

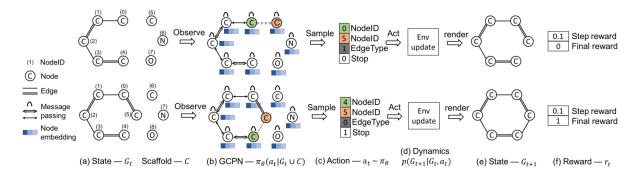


Figure 1: An overview of the proposed iterative graph generation method. Each row corresponds to one step in the generation process. (a) The state is defined as the intermediate graph G_t , and the set of scaffold subgraphs defined as C is appended for GCPN calculation. (b) GCPN conducts message passing to encode the state as node embeddings then produce a policy π_{θ} . (c) An action a_t with 4 components is sampled from the policy. (d) The environment performs a chemical valency check on the intermediate state, and then returns (e) the next state G_{t+1} and (f) the associated reward r_t .

- $M = (S, A, P, R, \gamma)$:
 - states $S=\{s_i\}$: 包括所有 intermediat 和 final graphs
 - actions $A=\{a_i\}$: 每一个 step 对当前 graph 进行的修改
 - 状态转移概率 P
 - reward 函数 R
 - discount factor γ
- 状态空间:
 - $-\ s_t$ 是中间生成的图 G_t
 - $-G_0$ 包括一个 single node,表示一个 carbon atom(碳原子)
- 动作空间:
 - 每个 step 将要添加的一个 atoms 的集合: $C = \bigcup_{i=1}^{S} C_i$
 - 具体的 actions:
 - * 把一个新的 $\operatorname{atom} C_i$ 连接到现有的 G_t 中的一个节点上去
 - * 连接 G_t 内退出 (exiting) 的节点
- state transition dynamics:
 - 在 state transition dynamics 中融入了 domain-specific rules, 只执行遵守规则的 actions
 - policy network 产生的 infeasible(不可实行的) 动作会被 rejected, 而 state 保持不变
- Reward 设计
 - final rewards: domain-specific rewards 之和 (例如,最终的 property scores,对不真实的分子的惩罚,adversirial rewards)
 - intermediate rewards: step-wise validity(有效性) rewards 和 adversirial rewards
- GCPN
 - 使用 neural message passing 算法计算节点的 embeddings
 - 预测 action:
 - * 挑选两个节点
 - * 预测边的类型
 - * 预测是否结束(termination)

整体公式如下:

$$a_t = CONCAT(a_{first}, a_{second}, a_{edge}, a_{stop})$$

其中

$$\begin{split} f_{first}(s_t) &= SOFTMAX(m_f(X)), & a_{first} \sim f_{first}(s_t) \in \{0,1\}^n \\ f_{second}(s_t) &= SOFTMAX(m_s(X_{a_{first}}, X)), & a_{second} \sim f_{second}(s_t) \in \{0,1\}^n \\ f_{edge}(s_t) &= SOFTMAX(m_e(X_{a_{first}}, X_{a_{second}})), & a_{edge} \sim f_{edge}(s_t) \in \{0,1\}^b \\ f_{stop}(s_t) &= SOFTMAX(m_t(AGG(X))), & a_{stop} \sim f_{stop}(s_t) \in \{0,1\} \end{split}$$

5 未来方向

参考https://zhuanlan.zhihu.com/p/38142339

主要想法:将 relational 的关系转化成 attention,利用 attention 来代表两个 entity 的关系。隐式地将 relational 引入 NN 结构中 Zambaldi et al. 在 2018的Relational deep reinforcement learning