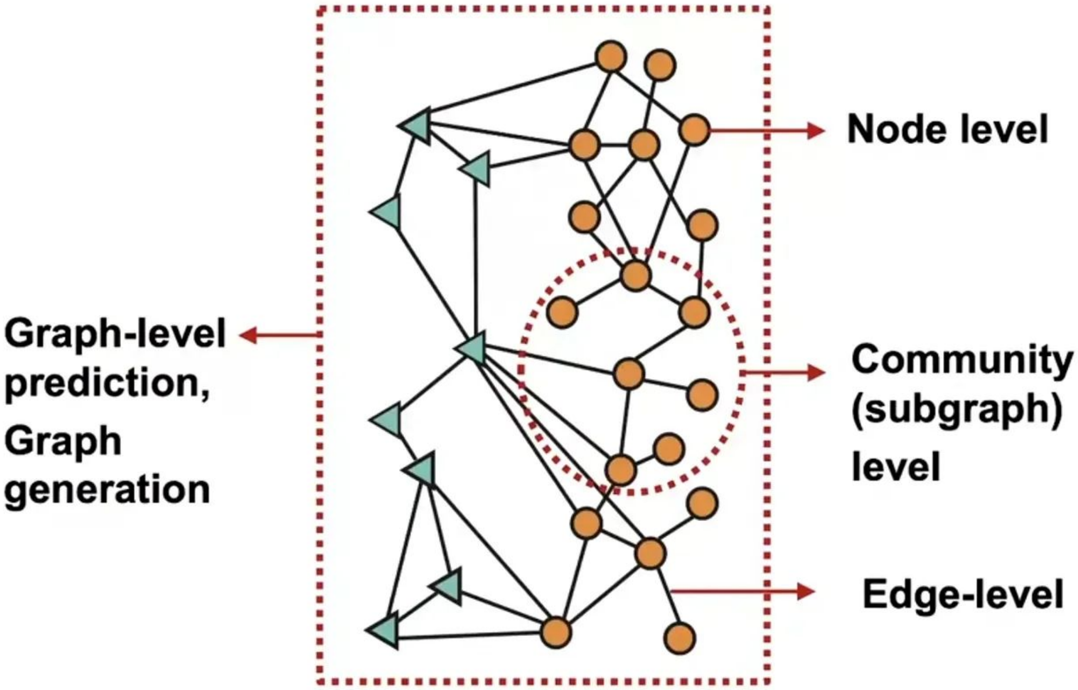
Анализ графовых данных и глубокое обучение

Азимов Рустам
Высшая школа цифровой культуры

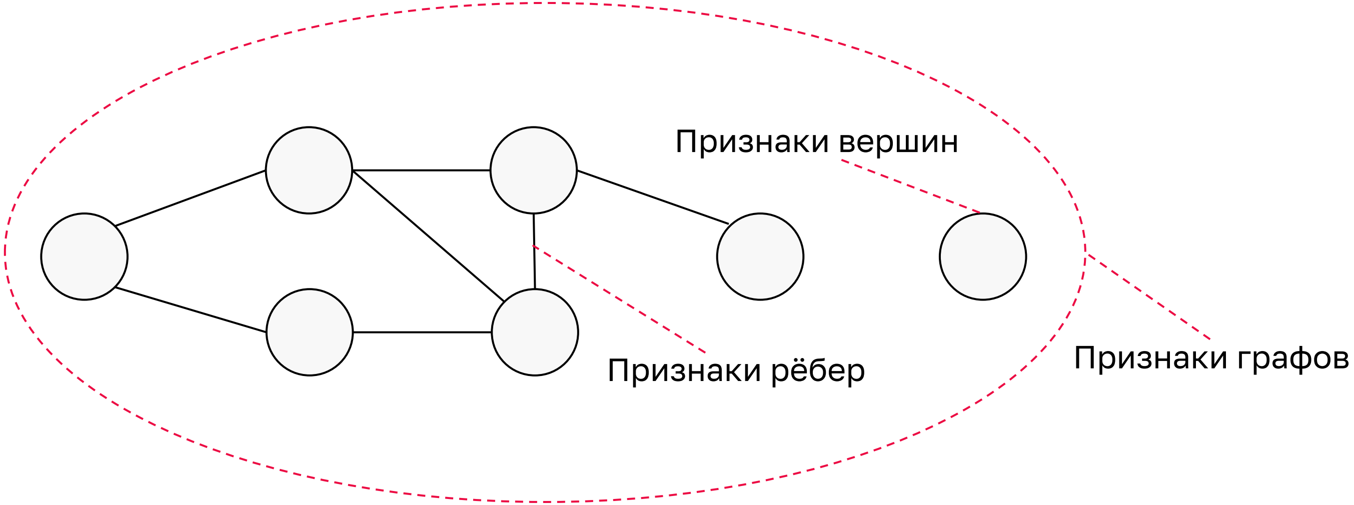
В предыдущих сериях



Классический ML для анализа графов

Классический подход

- Разработать правила получения признаков для вершин/рёбер/графов
- Заполнить данные для тренировочного набора и обучить модель



Hand-crafted features

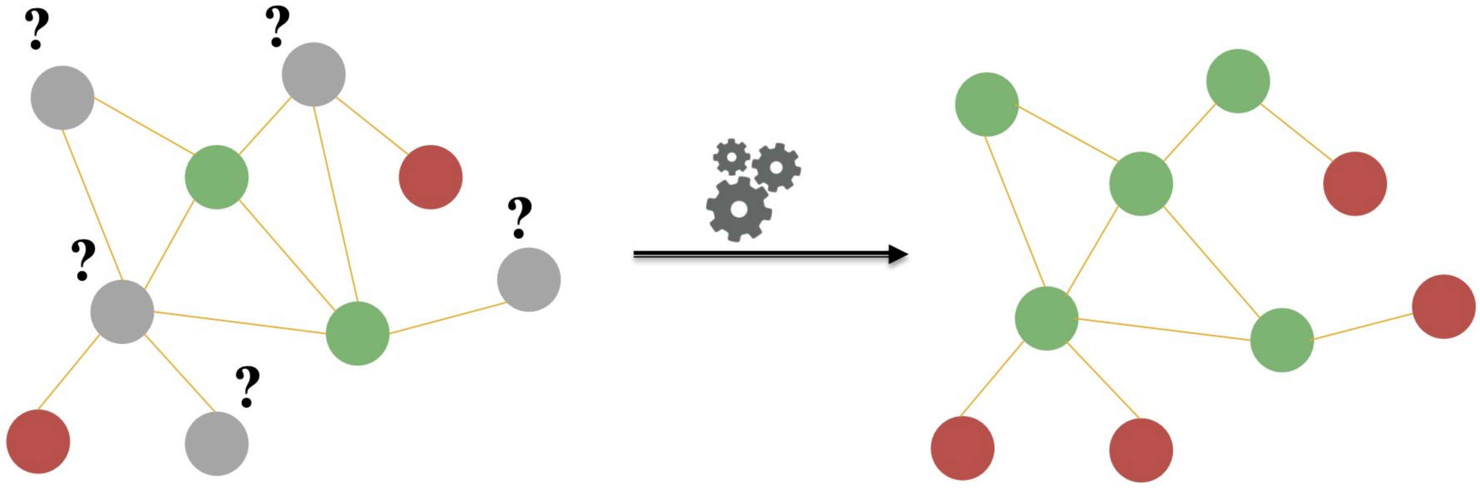
- Выбор признаков для описания вершин/рёбер/графов является ключевым для качественного решения задачи
- В этой лекции рассмотрим варианты таких признаков
- Для простоты работаем только с неориентированными графами

Постановка задачи

- **Задача**: предсказать некоторые значения на новых объектах
- **Признаки**: d-мерные вектора
- **Объекты**: вершины/рёбра/графы
- **Функция** потерь: зависит от задачи

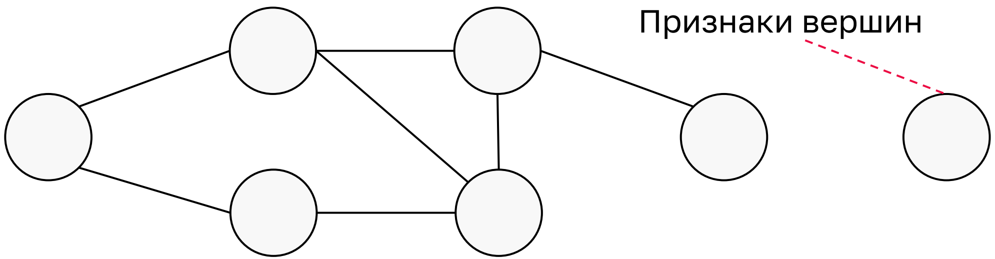
Node-level tasks

Node classification



Признаки для вершин

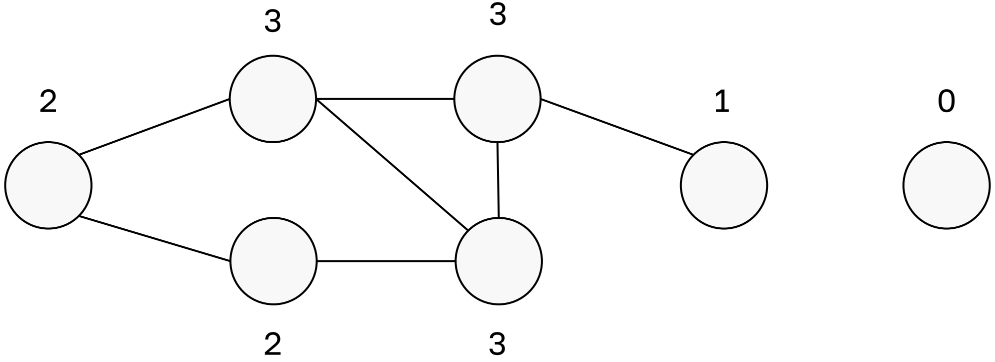
- Степень вершины
- Показатель центральности
- Коэффициент кластеризации
- Графлеты



Степень вершины

- Пусть A - матрица смежности графа, тогда **степень** вершины u

$$d_u = \sum_{v \in V} A[u, v]$$



Центральность

- Степень вершин не учитывает важность соседей
- Это можно сделать, например, с помощью показателя **центральности**
  - Eigenvector centrality
  - Betweenness centrality
  - Closeness centrality

Eigenvector centrality

- Важность вершины v зависит от важности соседей $N(v)$

$$c_v = \frac{1}{\lambda} \sum_{u \in N(v)} c_u$$

- В матричной форме $\lambda c = Ac$
- Для центральности используется c_{max}, который соответствует наибольшему собственному значению λ_{max}

Betweenness centrality

- Важность вершины зависит от количества кратчайших путей, которые проходят через неё

$$c_v = \sum_{s \neq v \neq t} \frac{\text{number of shortest paths between s and t that contain v}}{\text{number of shortest paths between s and t}}$$

Closeness centrality

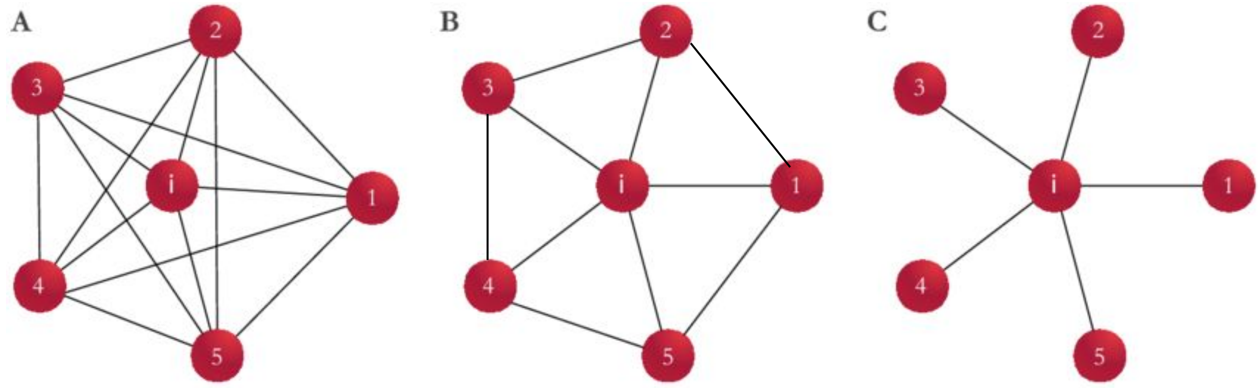
- Вершина важна, если от неё можно быстро добраться до других

$$c_v = \frac{1}{\sum_{u \neq v} \text{length of the shortest path between u and v}}$$

Clustering coefficient

- Измеряет степень связности соседей вершины v

$$e_v = \frac{\text{number of edges among the neighbours of v}}{C^2_{|N(v)|}}$$

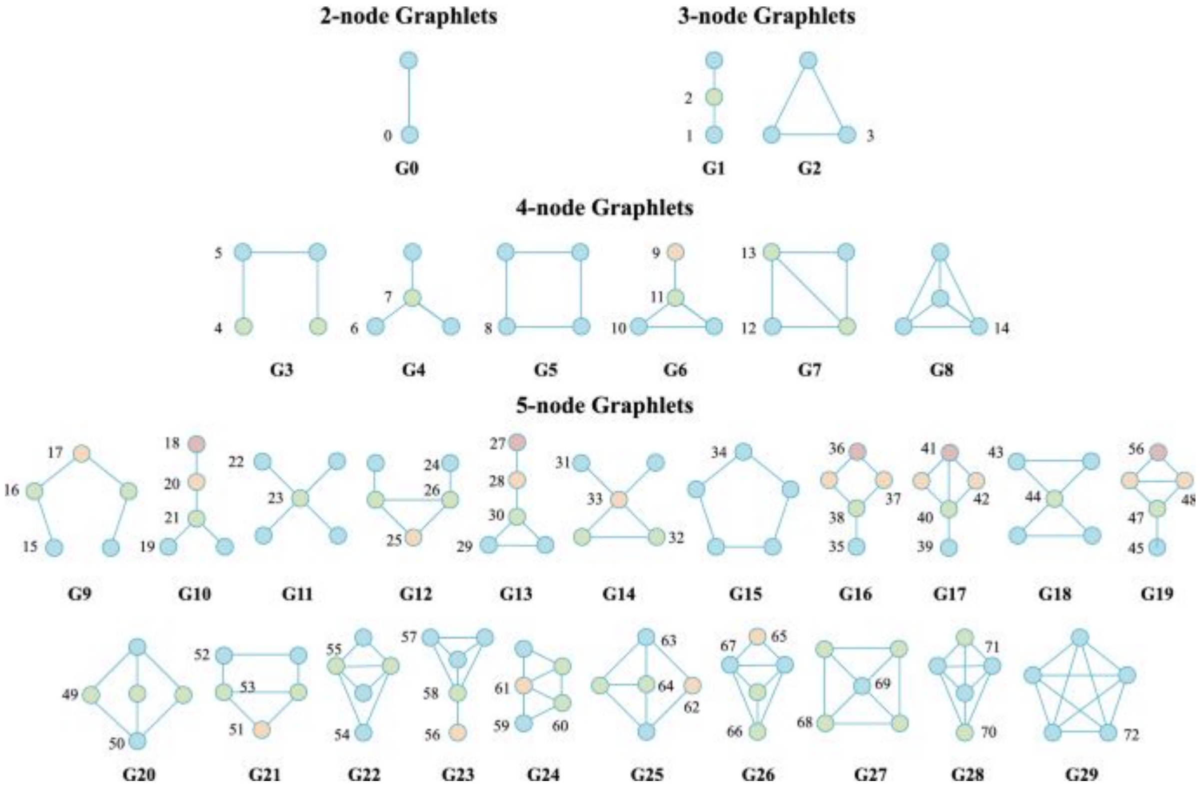


$e_i = 1$ $e_i = 0.5$ $e_i = 0$

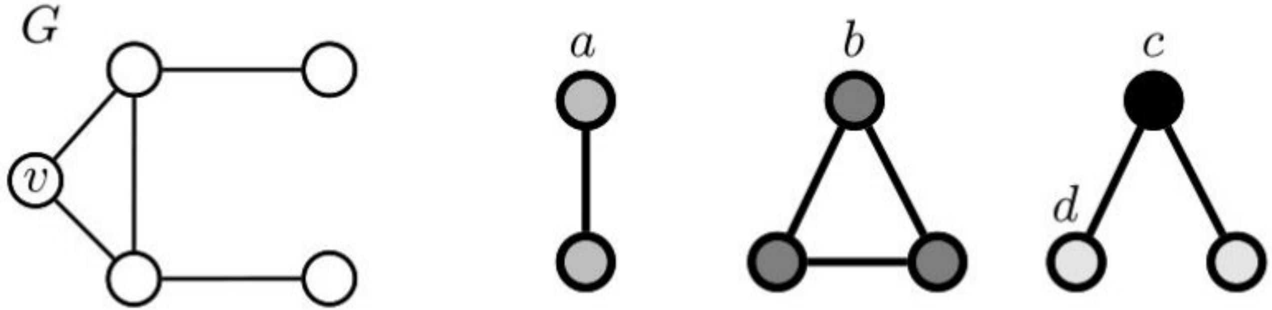
Graphlets

- **Графлеты** - небольшие подграфы для описания структуры соседей вершины
- **Graphlet Degree Vector (GDV)** - вектор из подсчитанного количества графлетов для конкретной вершины
  - Для графлетов размера от 2 до 5, GDV - вектор размера 73
- GDV может использоваться в качестве hand-crafted признака вершины и описывает локальную топологию
- Сравнение GDV двух вершин более детально чем сравнение степеней вершин или коэффициента кластеризации

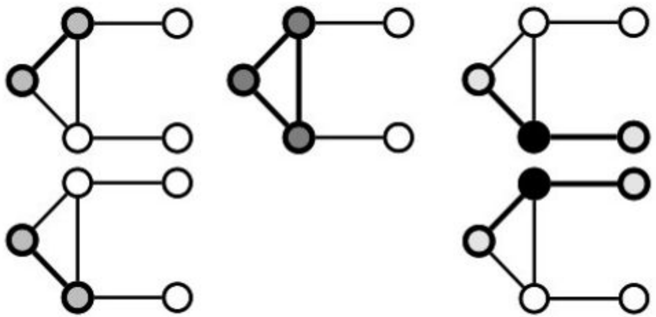
Graphlets


2-node Graphlets
3-node Graphlets
G0
G1
G2
4-node Graphlets
G3
G4
G5
G6
G7
G8
5-node Graphlets
G9
G10
G11
G12
G13
G14
G15
G16
G17
G18
G19
G20
G21
G22
G23
G24
G25
G26
G27
G28
G29

Пример



orbit	a	b	c	d
$GDV(v)$	2	1	0	2



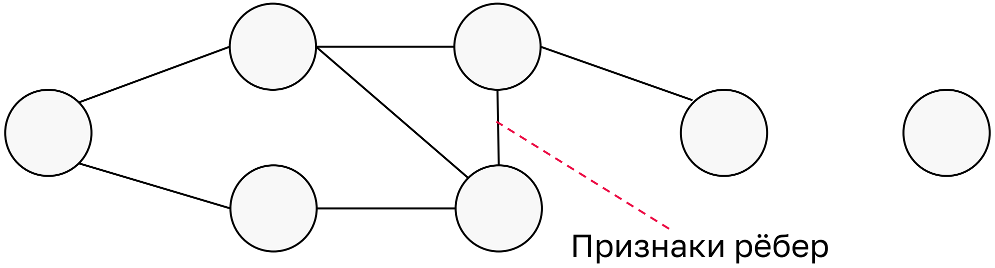
Edge-level tasks

Предсказание связей

- Удалить случайные рёбра в графе и попытаться их предсказать
- Или граф меняется с течением времени, предсказать какие рёбра появятся
    - Для каждой пары вершин считаем score
    - Отранжировать предсказания и сравнить с реально появившимися рёбрами

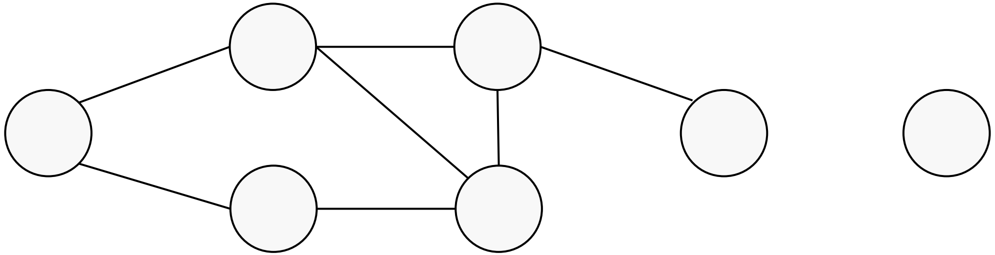
Признаки рёбер

- Distance-based
- Local neighborhood overlap
- Global neighborhood overlap



Distance-based

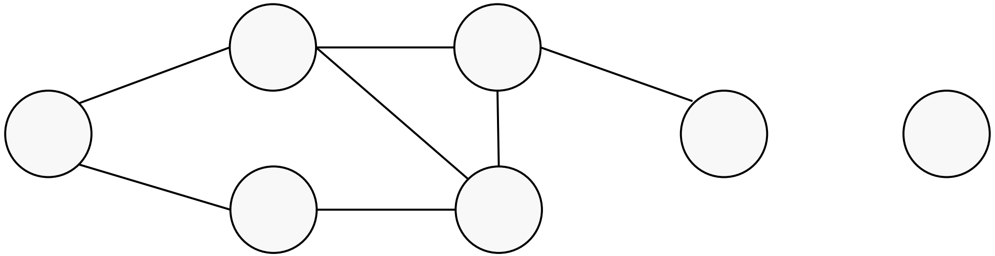
- Длина кратчайшего пути
- Не различает окружения вершин, например есть ли общие соседи
- Может быть несколько кратчайших путей



Local neighborhood overlap

- Смотрит на общих соседей у двух вершин v_1 и v_2
  - Общие соседи $|N(v_1) \cap N(v_2)|$
  - Jaccard's coefficient $\frac{|N(v_1) \cap N(v_2)|}{|N(v_1) \cup N(v_2)|}$
  - Adamic-Adar index

$$\sum_{u \in N(v_1) \cap N(v_2)} \frac{1}{\log(k_u)}$$



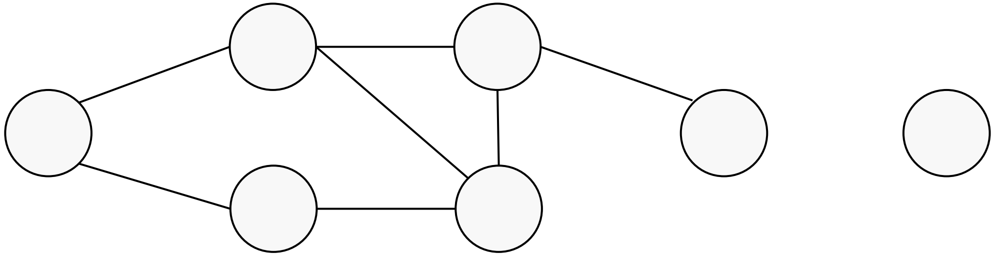
Local neighborhood overlap

- Если вершины не имеют общих соседей, то все эти показатели равны нулю, хотя в будущем вероятность появления ребра имеется
- Нужно рассмотреть граф целиком

Global neighborhood overlap

- **Katz index** - количество путей между парой вершин
- Можно подсчитать с помощью возведения в степень матрицы смежности над стандартным полукольцом

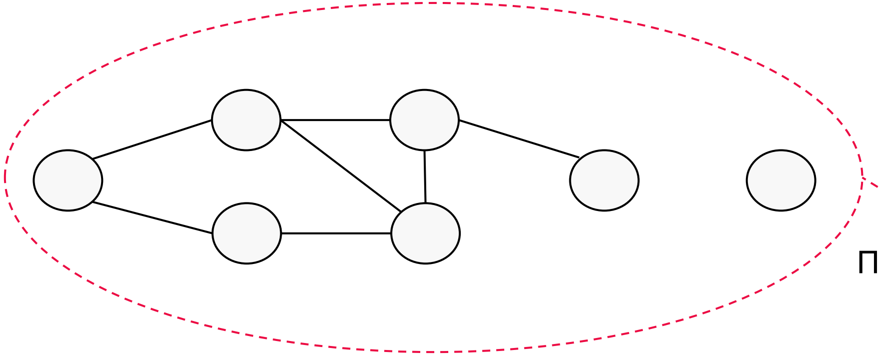
$$S[v_1, v_2] = \sum_{l=1}^{\infty} \beta^l A^l [v_1, v_2]$$



Graph-level tasks

Признаки графов

- Хотим характеризовать граф целиком
- Из простого - можно агрегировать признаки вершин и рёбер
- **Graph Kernels** $K(G, G')$ оценивают схожесть графов и можно перейти к SVM
    - Graphlet Kernel
    - Weisfeiler-Lehman Kernel



Признаки графов

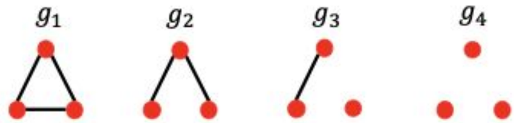
Graph Kernel

- Основная идея - использовать для описания графа вектор наподобие Bag-of-Words
- “Bag of nodes”
- “Bag of node degrees”

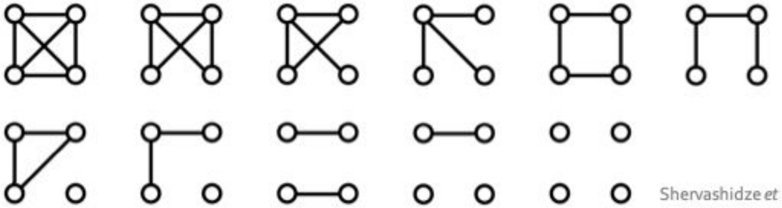
Graphlet Features

- “Bag of graphlets”: есть отличия от GDV для вершин
  - Не все вершины графлета обязаны быть связанными
  - Нет выделенной вершины (корня)

- For $k = 3$, there are 4 graphlets.



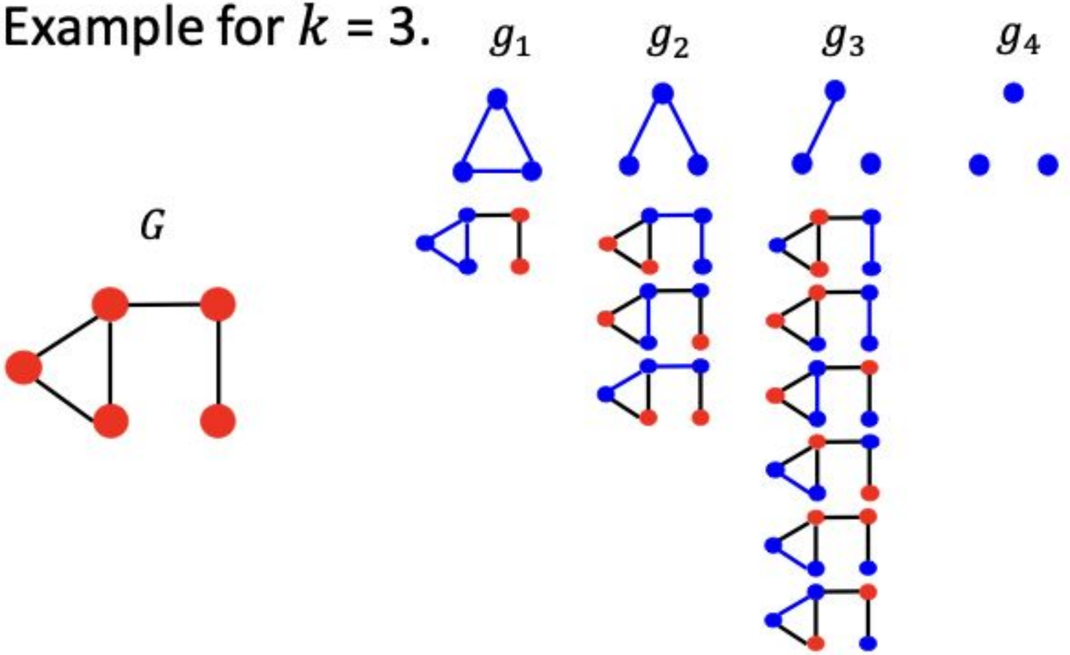
- For $k = 4$, there are 11 graphlets.



Shervashidze *et al.*, AISTATS 2011

Graphlet Features

- Example for $k = 3$.



$$f_G = (1, \quad 3, \quad 6, \quad 0)^T$$

Graph Kernel

$$K(G, G') = \langle f_G, f_{G'} \rangle = f_G^T f_{G'}$$

- Графы могут быть существенно разных размеров, так что лучше нормализовать каждый вектор (поделить на сумму значений в нём)
- Дорого для вычисления на больших графах

WL-Kernel

- Хотим ядровую функцию, которую можно вычислить быстрее
- Обобщаем идею “Bag of node degrees”
- Итеративно раскрашиваем граф и рассматриваем всё более далеких соседей

$$c^{(k+1)}(v) = \mathrm{HASH}\left(\left\{c^{(k)}(v), \left\{c^{(k)}(u)\right\}_{u \in N(v)}\right\}\right)$$

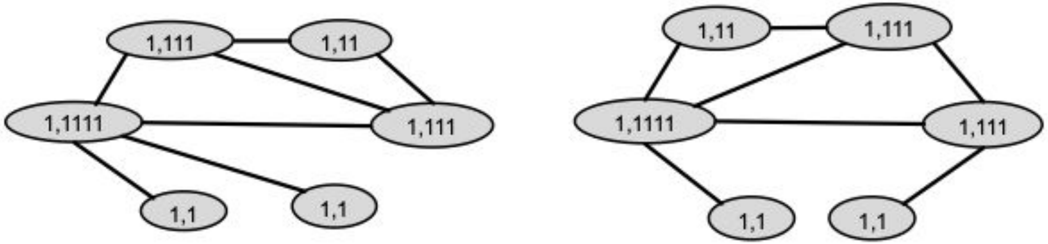
- Через K итераций получим информацию о K-hop соседстве в графе

WL-Kernel

Example of color refinement given two graphs

- Assign initial colors

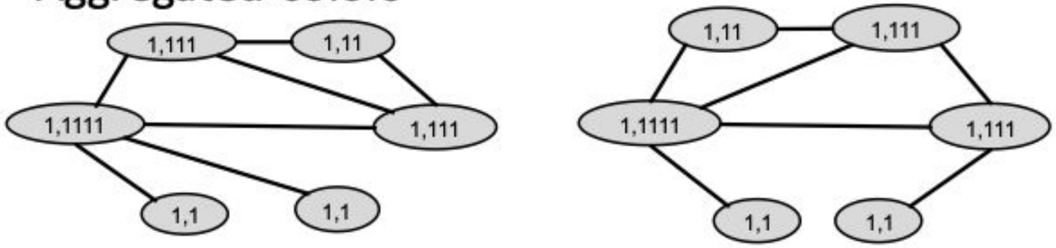
- Aggregate neighboring colors



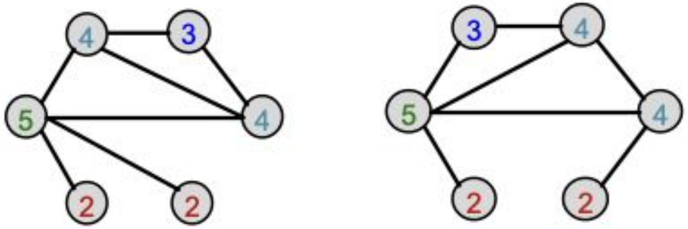
WL-Kernel

Example of color refinement given two graphs

- Aggregated colors



- Hash aggregated colors



Hash table

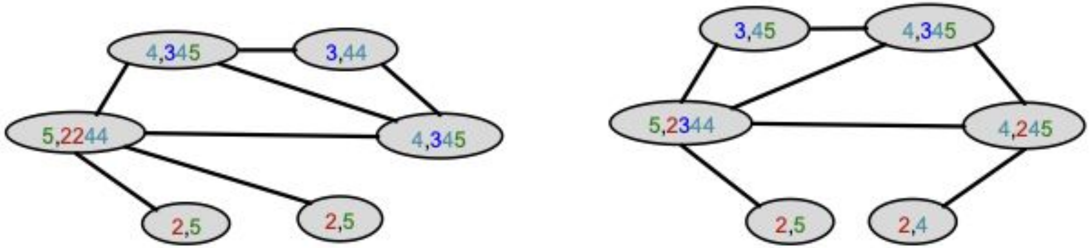
1,1	-->	2
1,11	-->	3
1,111	-->	4
1,1111	-->	5

WL-Kernel

Example of color refinement given two graphs

- Aggregated colors

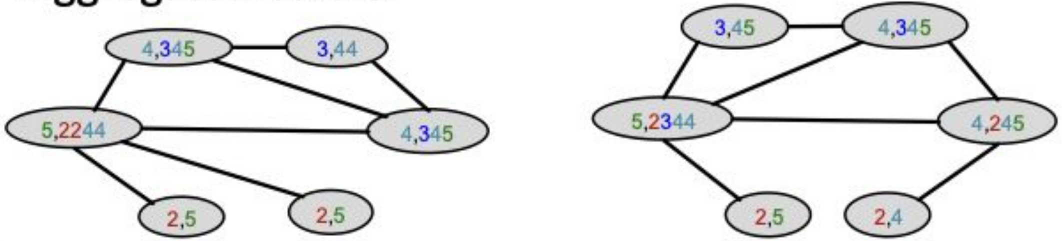
- Hash aggregated colors



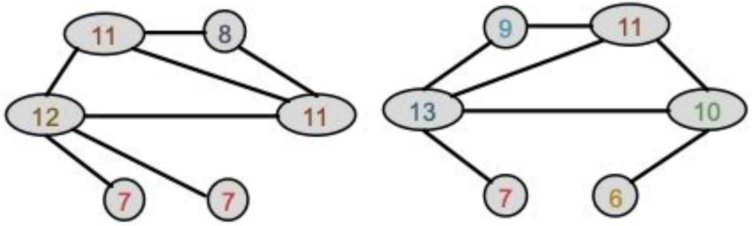
WL-Kernel

Example of color refinement given two graphs

- Aggregated colors



- Hash aggregated colors



Hash table

2,4	-->	6
2,5	-->	7
3,44	-->	8
3,45	-->	9
4,245	-->	10
4,345	-->	11
5,2244	-->	12
5,2344	-->	13

Graph Kernel

- После раскраски вычисляется вектор, содержащий информацию сколько вершин каждого цвета
- Ядровая функция опять же скалярное произведение векторов двух графов
- Линейная сложность по количеству рёбер в графах

Заключение