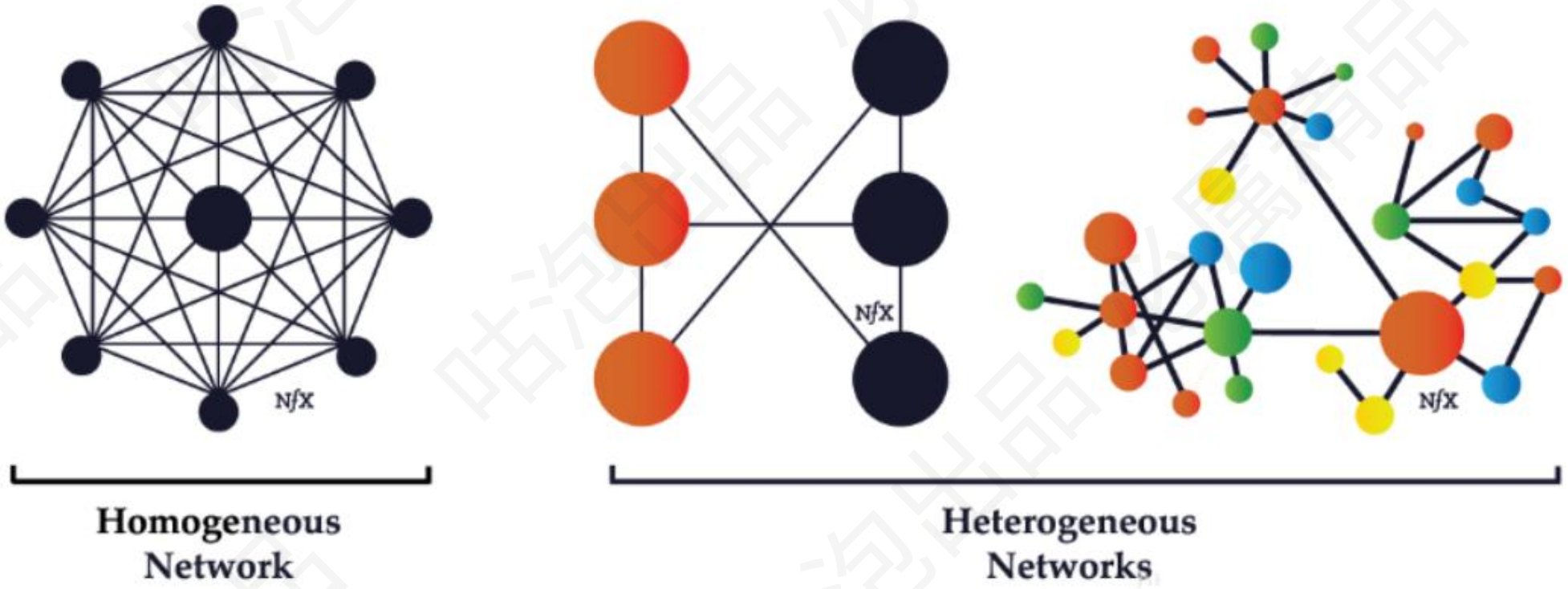
异构图

- 不是同构图的就是异构图了

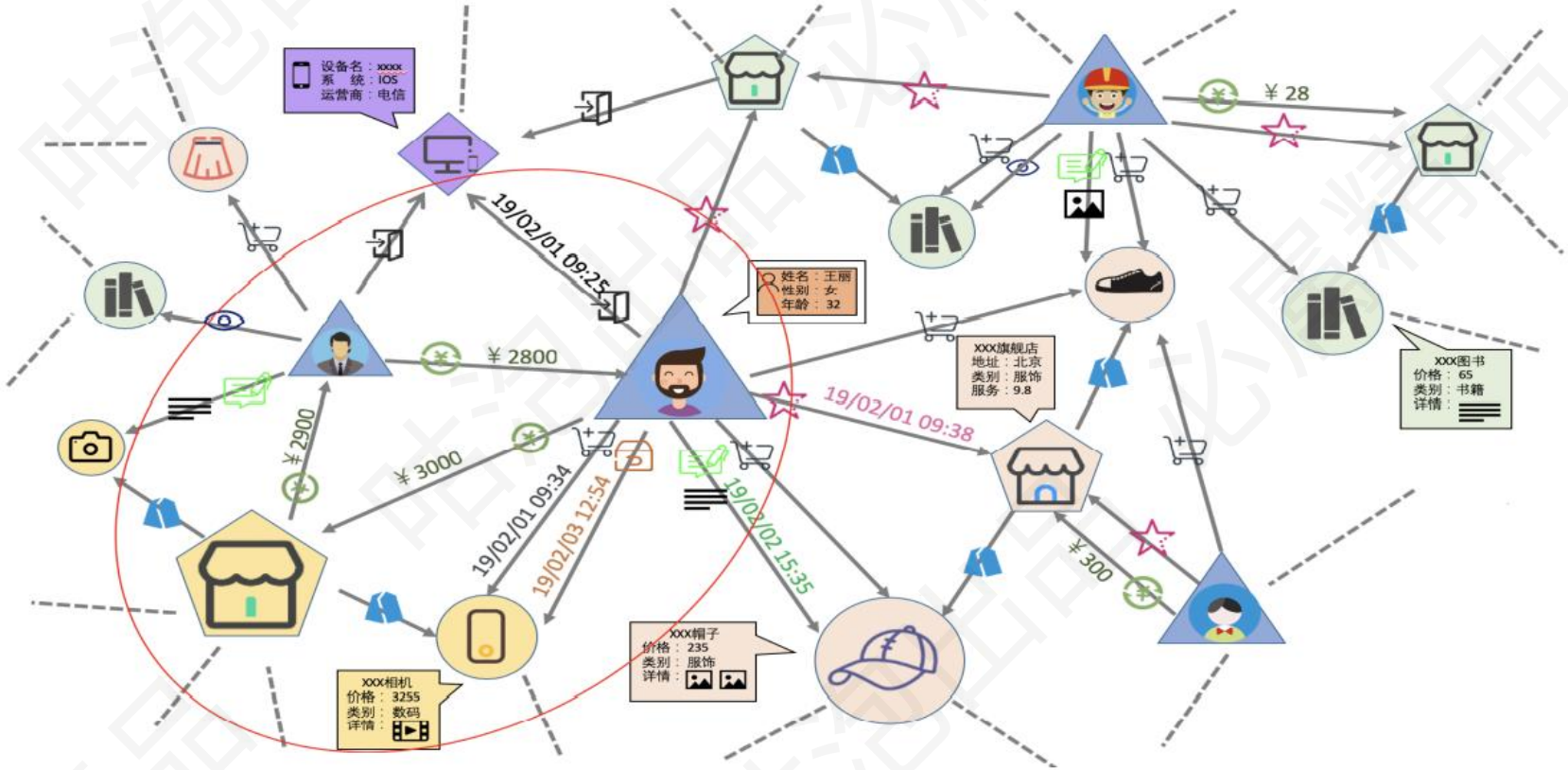
  - 点的类型多种，边的类型也多种(反正只要有一个多种的就算异构图了)



异构图

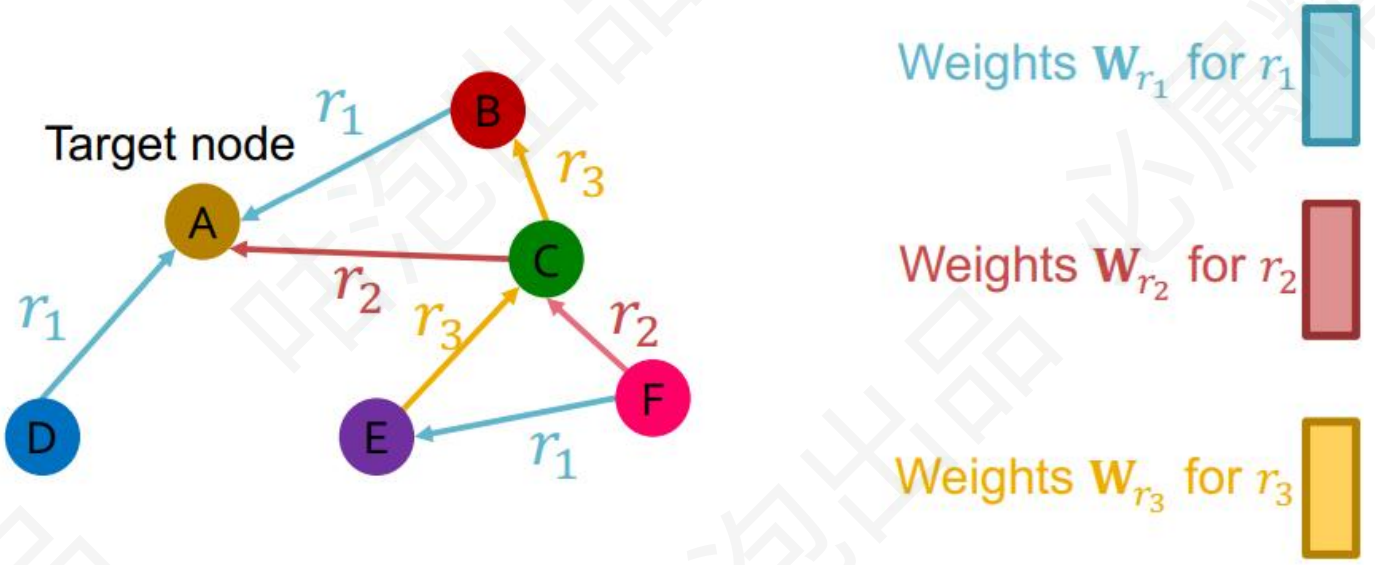
- 实际场景中

- 基本上但凡要应用基本都得是异构图，那么如何提取特征呢现在



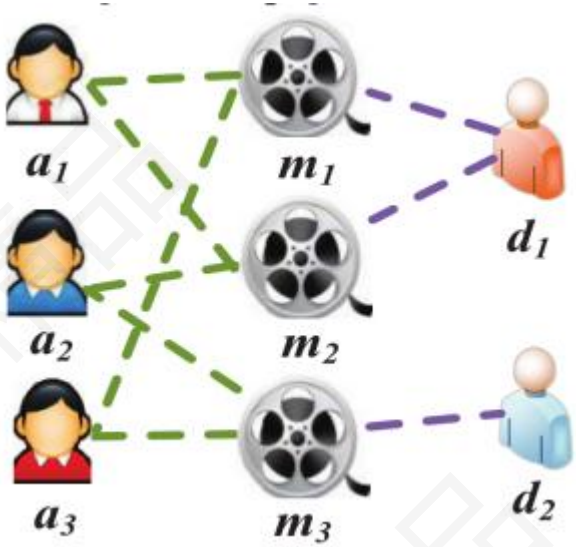
异构图

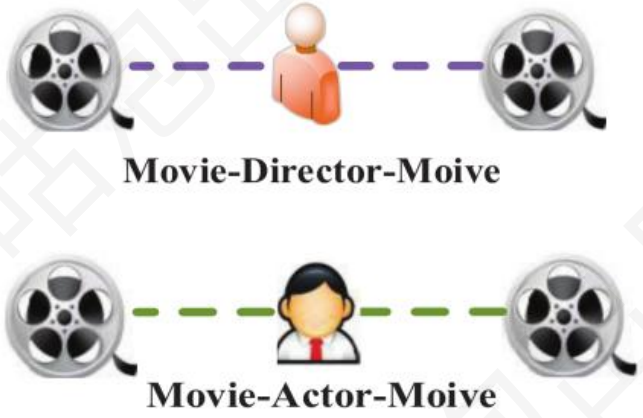
- 多种关系的时候该咋办呢
  - 关系有点乱，但是每种关系处理好自己相关的节点就可以了
  - 基本思想就是每种关系对应一组权重参数矩阵，是啥关系用啥矩阵

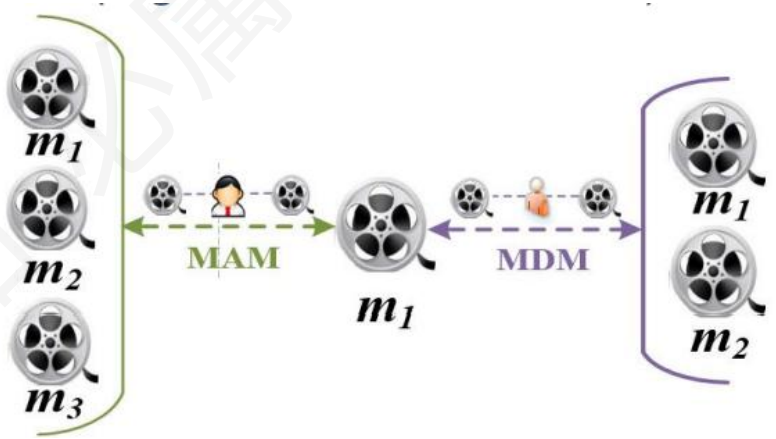


异构图

- Heterogeneous Graph Neural Networks
  - 演员，电影，导演，这回咱们有三种节点以及他们之间关系也不同
  - 首先第一个事就是meta-path（按照什么关系来寻找邻居）

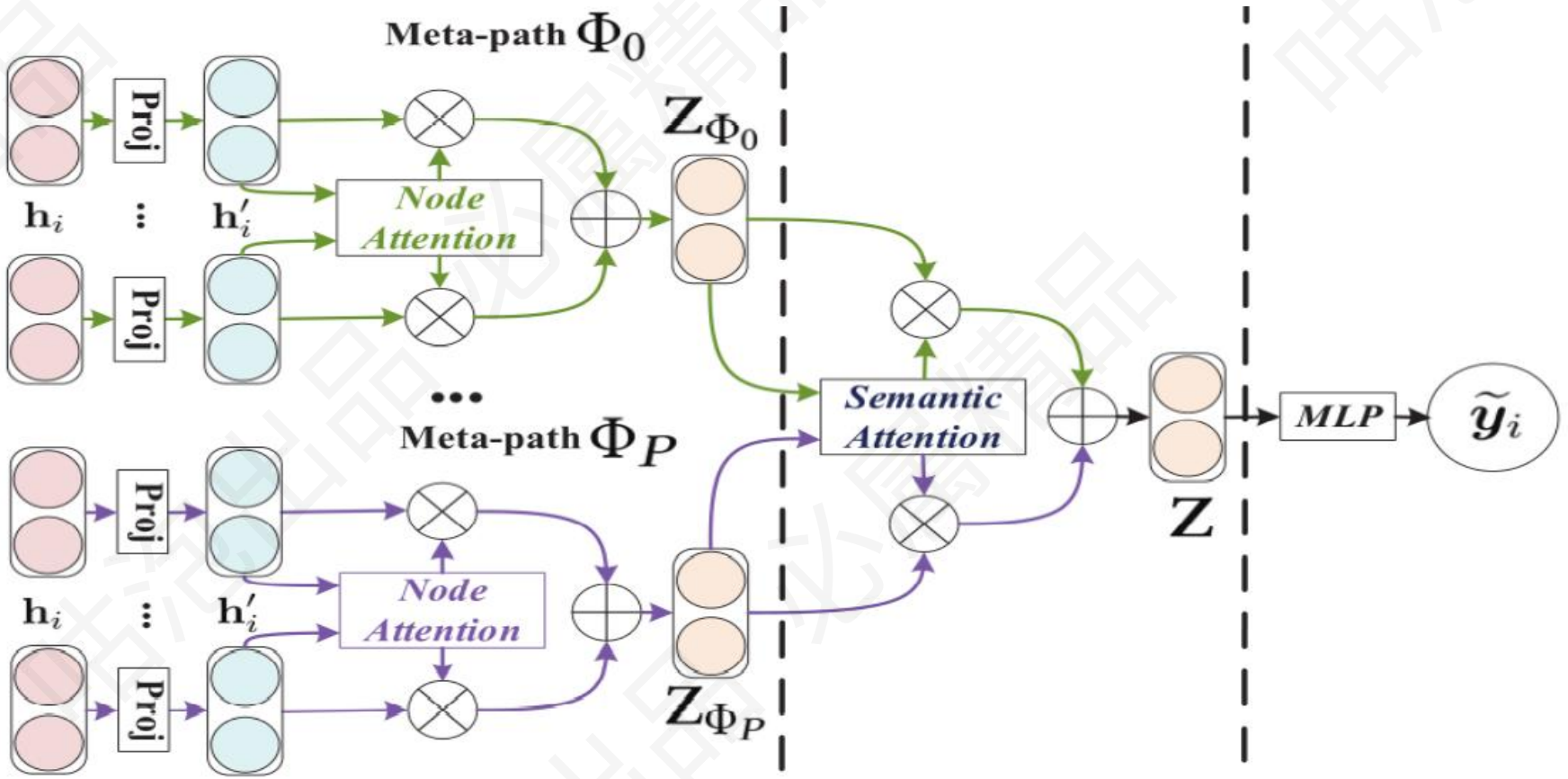






异构图

- 基本流程
  - 节点先attention
  - 不同路径聚合
  - 聚类也attention
  - 最后输出预测



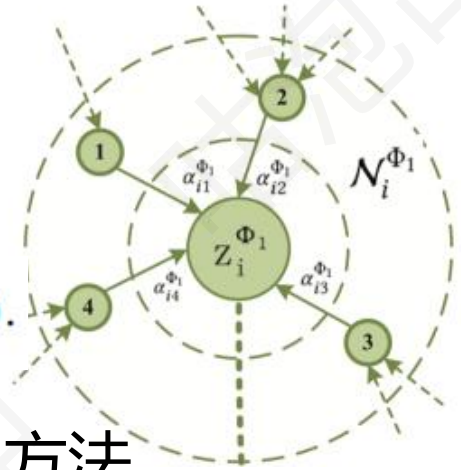
异构图

- 计算流程

  - 对于每一个meta-path计算其上节点attention

$$\mathbf{h}_i' = \mathbf{M}_{\phi_i} \cdot \mathbf{h}_i,$$

$$e_{ij}^{\Phi} = att_{node}(\mathbf{h}_i', \mathbf{h}_j'; \Phi).$$



  - 首先特征映射(不管啥类型，都映射到固定维度)，然后再用GAN方法

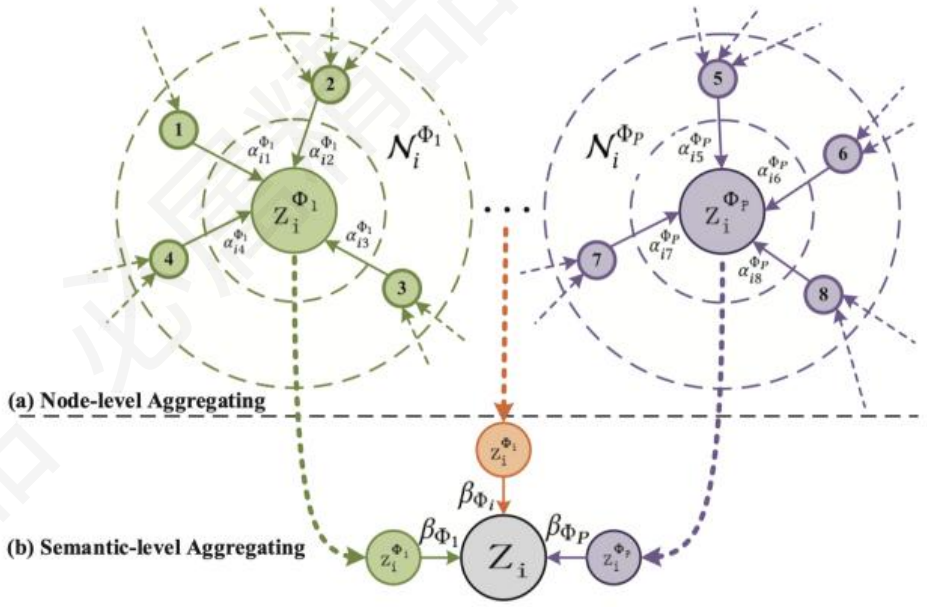
  - softmax得到该meta-path下的权重分配，也就能计算当前节点如何聚合特征

  - 注意每个meta-path要学习的向量不同

$$\alpha_{ij}^{\Phi} = softmax_j(e_{ij}^{\Phi}) = \frac{\exp\left(\sigma\left(\mathbf{a}_{\Phi}^{\mathrm{T}} \cdot [\mathbf{h}_i' \| \mathbf{h}_j']\right)\right)}{\sum_{k \in \mathcal{N}_i^{\Phi}} \exp\left(\sigma\left(\mathbf{a}_{\Phi}^{\mathrm{T}} \cdot [\mathbf{h}_i' \| \mathbf{h}_k']\right)\right)},$$

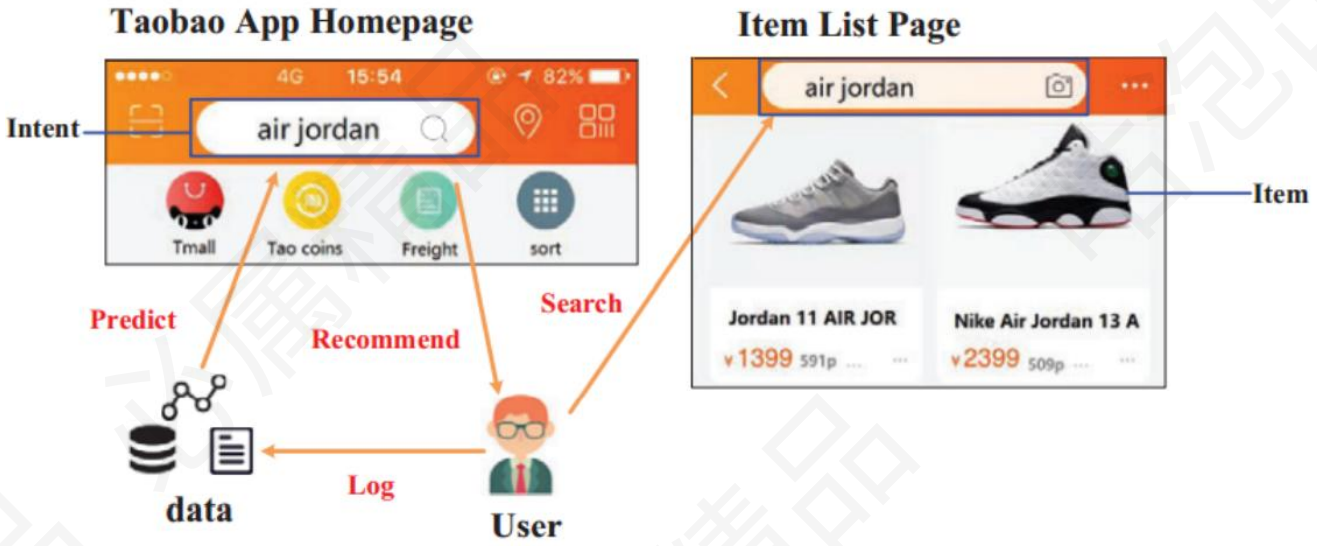
异构图

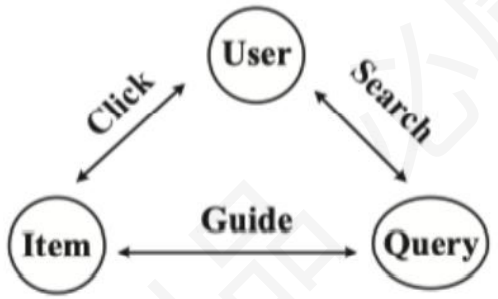
- 计算流程
  - 聚合当前节点所有邻居特征（可拓展多头）$\mathbf{z}_i^{\Phi}=\sigma\left(\sum_{j\in\mathcal{N}_i^{\Phi}}\alpha_{ij}^{\Phi}\cdot\mathbf{h}_j'\right)$. $\mathbf{z}_i^{\Phi}=\Big\|_{k=1}^{K}\sigma\left(\sum_{j\in\mathcal{N}_i^{\Phi}}\alpha_{ij}^{\Phi}\cdot\mathbf{h}_j'\right)$.
  - meta-path权重：$w_{\Phi_p}=\frac{1}{|\mathcal{V}|}\sum_{i\in\mathcal{V}}\mathbf{q}^{\mathrm{T}}\cdot\tanh(\mathbf{W}\cdot\mathbf{z}_i^{\Phi_p}+\mathbf{b}),$
  - softmax：$\beta_{\Phi_p}=\frac{\exp(w_{\Phi_p})}{\sum_{p=1}^{P}\exp(w_{\Phi_p})},$
  - 最终节点embedding：$\mathbf{Z}=\sum_{p=1}^{P}\beta_{\Phi_p}\cdot\mathbf{Z}_{\Phi_p}.$

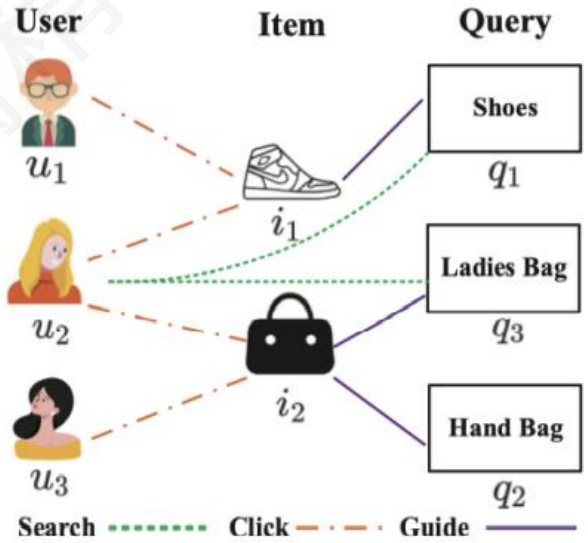


异构图

- 应用实例
  - 用户根据关键词点击商品
  - 那么现在就有三种节点了
  - 任务：预测用户会不会买
  - 其实还是异构图提特征



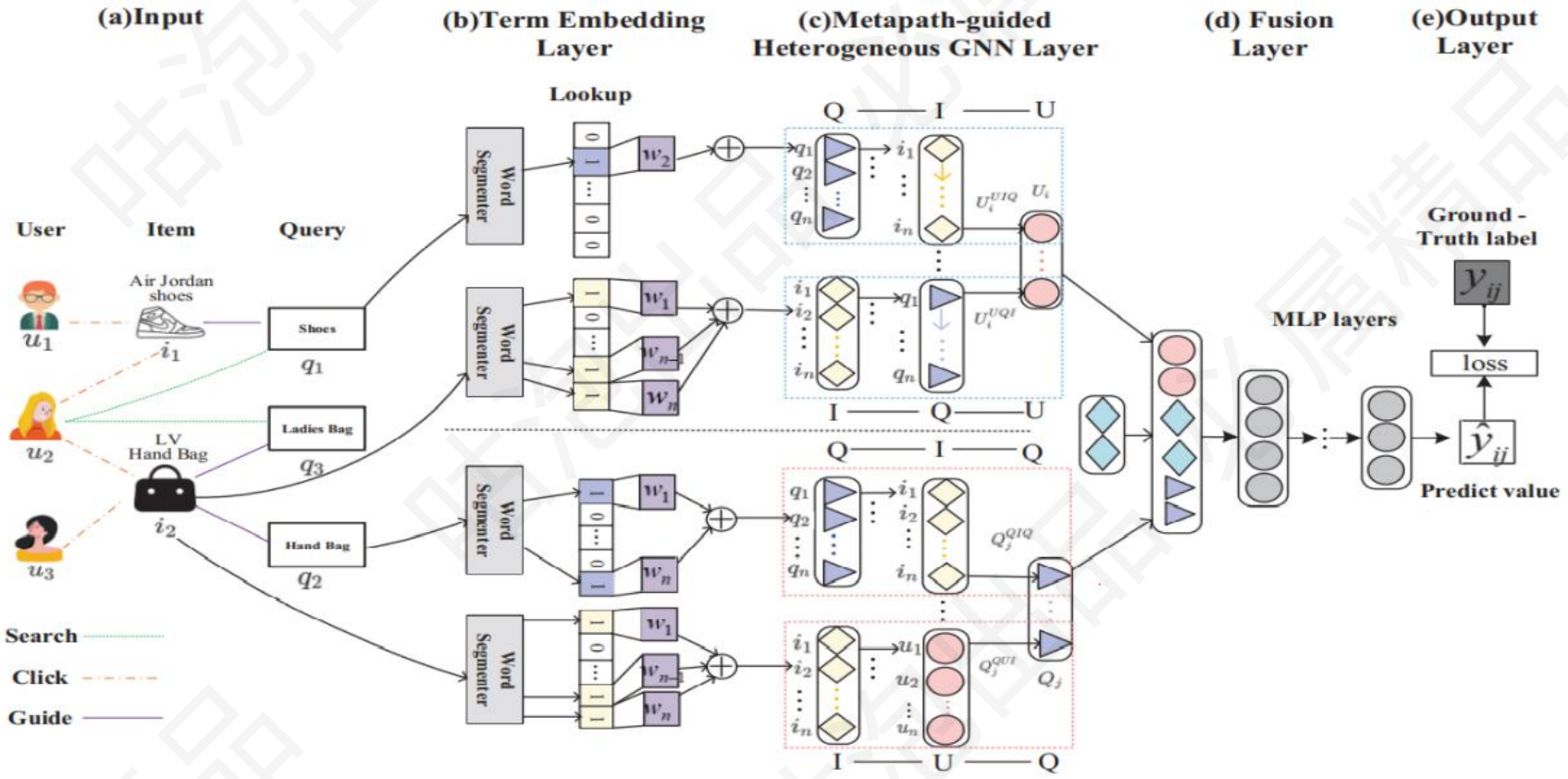




异构图

应用实例

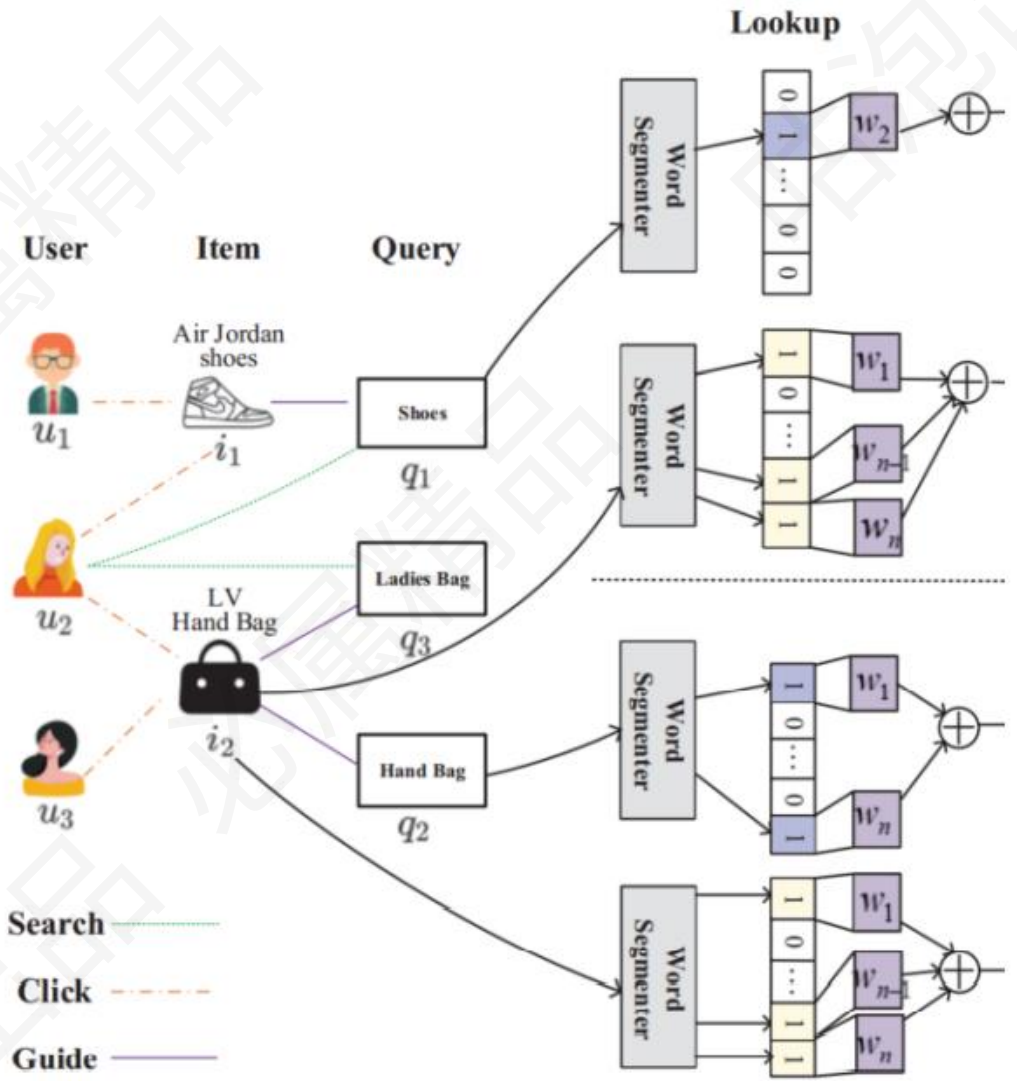
基本流程还是分别得得到U和I以及其他特征的表示，然后拼接预测



异构图

- 编码处理
  - 针对I和Q，直接编码会导致矩阵太大了
  - 创建固定词表，这样one-hot就可以了
  - 简化Embedding表示后的结果

$$
\begin{aligned}
&\{w_1, && w_2, && \cdots, && w_{n-1}, && w_n\} \\
q_2 &= (1, && 0, && \cdots, && 0, && 1) \\
i_2 &= (1, && 0, && \cdots, && 1, && 1).
\end{aligned}
$$



异构图

- 编码聚合预测

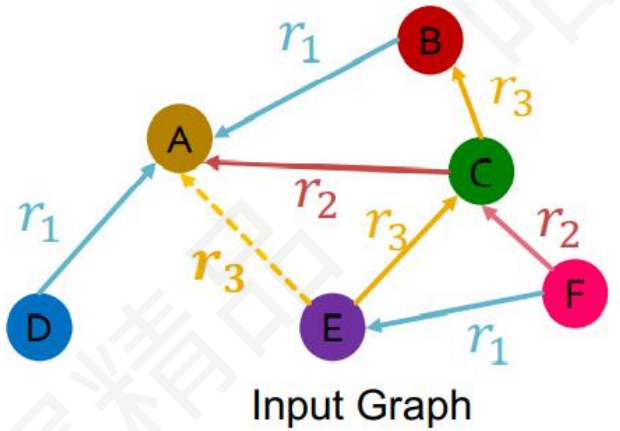
  - 不同类别节点特征编码：$E_{q_2} = g(e_{w_1}, e_{w_n}), E_{i_2} = g(e_{w_1}, e_{w_{n-1}}, e_{w_n}),$
  - 按照不同meta-path聚合节点特征：$I_j^{\mathrm{UIQ}} = g(E_{q_1}, E_{q_2}, \cdots),$ $U_i = g(U_i^{\rho_1}, U_i^{\rho_2}, \cdots, U_i^{\rho_k}),$ $U_i^{\mathrm{UIQ}} = g(I_1^{\mathrm{UIQ}}, I_2^{\mathrm{UIQ}}, \cdots),$
  - 通过异构图分别得到U和I以及其他特征（如果有的话，都可以考虑进来）
  - 最后进行特征拼接，完成预测即可：$\hat{y}_{ij} = sigmoid(f(U_i \oplus Q_j \oplus S_{ij})),$

异构图

- Link prediction
  - 首先第一件事就是数据集切分，跟之前有些不同
  - 为了防止透题，训练集中要区别消息传递的和输出预测的(计算损失的)

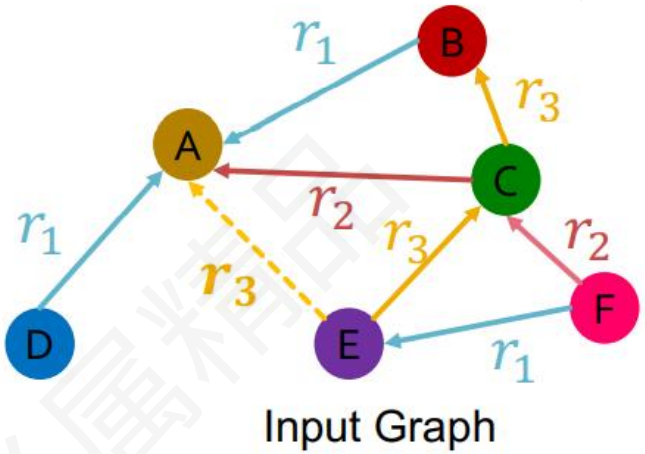
异构图

- Link prediction
  - 右图中(E, r_3, A)是 training supervision edge
  - 其他的边都是 training supervision edge
  - 虚线的我们可以当作正样本，但是负样本如何定义呢?
  - 可以生成一些负样本，个数都可以自己定，例如: (E, r_3, B), (E, r_3, D)



异构图

- Link prediction
  - 任何图神经网络模型都可以，聚合得到各点特征
  - 通过生成的负样本与正样本进行有监督训练
  - 损失函数如下：（预测链路是否存在）



$$\ell = -\log\sigma\left(f_{r_3}(h_E, h_A)\right) - \log(1 - \sigma(f_{r_3}(h_E, h_B)))$$