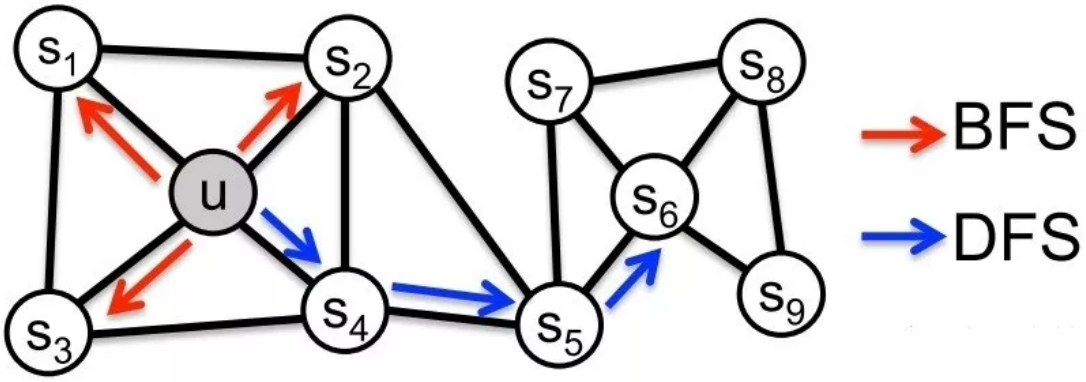
# 【Graph Embedding】node2vec-算法原理，实现和应用

沈伟臣 浅梦的学习笔记 2019-11-19

之前介绍过基于DFS邻域的DeepWalk和基于BFS邻域的LINE。




**DeepWalk：算法原理，实现和应用**

**LINE：算法原理，实现和应用**

node2vec是一种综合考虑DFS邻域和BFS邻域的graph embedding方法。简单来说，可以看作是deepwalk的一种扩展，是结合了DFS和BFS随机游走的deepwalk。

**nodo2vec 算法原理**

**优化目标**

设 $f(u)$是将顶点 $u$映射为embedding向量的映射函数,对于图中每个顶点$u$，定义 $N_S(u)$为通过采样策略 $S$采样出的顶点 $u$的近邻顶点集合。

node2vec优化的目标是给定每个顶点条件下，令其近邻顶点（**如何定义近邻顶点很重要**）出现的概率最大。

$$max_f \sum_{u \in V} \log Pr(N_S(U)|f(u))$$

为了将上述最优化问题可解，文章提出两个假设：

- 条件独立性假设

假设给定源顶点下，其近邻顶点出现的概率与近邻集合中其余顶点无关。

$$Pr(N_s(u)|f(u)) = \prod_{n_i \in N_s(u)} Pr(n_i|f(u))$$

- 特征空间对称性假设

这里是说一个顶点作为源顶点和作为近邻顶点的时候**共享同一套embedding向量。**(对比LINE中的2阶相似度，一个顶点作为源点和近邻点的时候是拥有不同的embedding向量的) 在这个假设下，上述条件概率公式可表示为：

$$Pr(n_i|f(u)) = \frac{\exp f(n_i) \cdot f(u)}{\sum_{v \in V} \exp f(v) \cdot f(u)}$$

根据以上两个假设条件，最终的目标函数表示为：

$$max_f \sum_{u \in V} [-\log Z_u + \sum_{n_i \in N_s(u)} f(n_i) \cdot f(u)]$$

由于归一化因子：

$$Z_u = \sum_{n_i \in N_s(u)} \exp(f(n_i) \cdot f(u))$$

的计算代价高，所以采用负采样技术优化。

**顶点序列采样策略**

node2vec依然采用随机游走的方式获取顶点的近邻序列，不同的是node2vec采用的是一种有偏的随机游走。

给定当前顶点 $v$，访问下一个顶点 $x$ 的概率为：

$$P(c_i = x|c_{i-1} = v) = \begin{cases} \frac{\pi_{vx}}{Z} & \text{if } (v,x) \in E \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$\pi_{vx}$ 是顶点 $v$ 和顶点 $x$ 之间的未归一化转移概率， $Z$ 是归一化常数。

node2vec引入两个超参数 $p$ 和 $q$ 来控制随机游走的策略，假设当前随机游走经过边 $(t,v)$ 到达顶点 $v$ 设 $\pi_{vx} = \alpha_{pq}(t,x) \cdot w_{vx}$ ， $w_{vx}$ 是顶点 $v$ 和 $x$ 之间的边权，

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

$d_{tx}$ 为顶点 $t$ 和顶点 $x$ 之间的最短路径距离。

下面讨论超参数p和 q对游走策略的影响

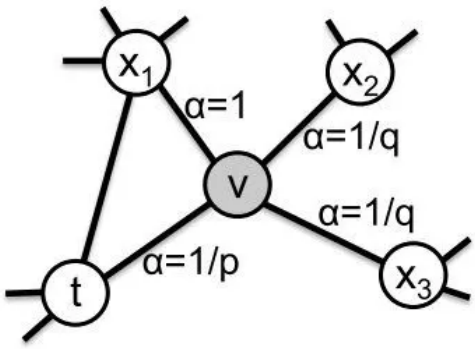
- Return parameter,p

参数p控制重复访问刚刚访问过的顶点的概率。注意到p仅作用于 $d_{tx} = 0$ 的情况，而 $d_{tx} = 0$ 表示顶点x就是访问当前顶点 $v$ 之前刚刚访问过的顶点。那么若 p较高，则访问刚刚访问过的顶点的概率会变低，反之变高。

- In-out papameter,q

q控制着游走是向外还是向内，若$q>1$，随机游走倾向于访问和t接近的顶点(偏向BFS)。若$q<1$，倾向于访问远离t的顶点(偏向DFS)。

下面的图描述的是当从t访问到$v$时，决定下一个访问顶点时每个顶点对应的$\alpha$。




**学习算法**

采样完顶点序列后，剩下的步骤就和deepwalk一样了，用word2vec去学习顶点的embedding向量。值得注意的是node2vecWalk中不再是随机抽取邻接点，而是按概率抽取，node2vec采用了Alias算法进行顶点采样。

Alias Method:时间复杂度O(1)的离散采样方法
https://zhuanlan.zhihu.com/p/54867139

**node2vec核心代码**

**Algorithm 1** The *node2vec* algorithm.

**LearnFeatures** (Graph $G = (V, E, W)$, Dimensions $d$, Walks per node $r$, Walk length $l$, Context size $k$, Return $p$, In-out $q$)
$\pi = \text{PreprocessModifiedWeights}(G, p, q)$
$G' = (V, E, \pi)$
Initialize $walks$ to Empty
**for** $iter = 1$ **to** $r$ **do**
  **for all** nodes $u \in V$ **do**
    $walk = \text{node2vecWalk}(G', u, l)$
    Append $walk$ to $walks$
$f = \text{StochasticGradientDescent}(k, d, walks)$
**return** $f$

**node2vecWalk** (Graph $G' = (V, E, \pi)$, Start node $u$, Length $l$)
Inititalize $walk$ to $[u]$
**for** $walk\_iter = 1$ **to** $l$ **do**
  $curr = walk[-1]$
  $V_{curr} = \text{GetNeighbors}(curr, G')$
  $s = \text{AliasSample}(V_{curr}, \pi)$
  Append $s$ to $walk$
**return** $walk$

### node2vecWalk

通过上面的伪代码可以看到，node2vec和deepwalk非常类似，主要区别在于顶点序列的采样策略不同，所以这里我们主要关注**node2vecWalk**的实现。

由于采样时需要考虑前面2步访问过的顶点，所以当访问序列中只有1个顶点时，直接使用当前顶点和邻居顶点之间的边权作为采样依据。当序列多余2个顶点时，使用文章提到的有偏采样。

```
def node2vec_walk(self, walk_length, start_node):
    G = self.G
    alias_nodes = self.alias_nodes
    alias_edges = self.alias_edges
    walk = [start_node]
    while len(walk) < walk_length:
        cur = walk[-1]
        cur_nbrs = list(G.neighbors(cur))
        if len(cur_nbrs) > 0:
            if len(walk) == 1:
                walk.append(cur_nbrs[alias_sample(alias_nodes[cur][0], ali
            else:
                prev = walk[-2]
```

```
                edge = (prev, cur)
                next_node = cur_nbrs[alias_sample(alias_edges[edge][0],ali
                walk.append(next_node)
        else:
            break
    return walk
```

**构造采样表**

preprocess_transition_probs 分别生成 alias_nodes 和 alias_edges ， alias_nodes 存储着在每个顶点时决定下一次访问其邻接点时需要的alias表（**不考虑当前顶点之前访问的顶点**）。 alias_edges 存储着在前一个访问顶点为t，当前顶点为 $v$时决定下一次访问哪个邻接点时需要的alias表。

get_alias_edge 方法返回的是在上一次访问顶点 t，当前访问顶点为$v$时到下一个顶点$x$的未归一化转移概率:

$$\pi_{vx} = \alpha_{pq}(t,x) \cdot w_{vx}$$

```
def get_alias_edge(self, t, v):
    G = self.G
    p = self.p
    q = self.q
    unnormalized_probs = []
    for x in G.neighbors(v):
        weight = G[v][x].get('weight', 1.0)# w_vx
        if x == t:# d_tx == 0
            unnormalized_probs.append(weight/p)
        elif G.has_edge(x, t):# d_tx == 1
            unnormalized_probs.append(weight)
        else:# d_tx == 2
            unnormalized_probs.append(weight/q)
    norm_const = sum(unnormalized_probs)
    normalized_probs = [float(u_prob)/norm_const for u_prob in unnormalize
    return create_alias_table(normalized_probs)def preprocess_transition_p
    G = self.G
    alias_nodes = {}
    for node in G.nodes():
        unnormalized_probs = [G[node][nbr].get('weight', 1.0) for nbr in G
        norm_const = sum(unnormalized_probs)
        normalized_probs = [float(u_prob)/norm_const for u_prob in unnorma
        alias_nodes[node] = create_alias_table(normalized_probs)
    alias_edges = {}
```

```
        for edge in G.edges():
            alias_edges[edge] = self.get_alias_edge(edge[0], edge[1])
        self.alias_nodes = alias_nodes
        self.alias_edges = alias_edges
        return
```

### node2vec应用

使用node2vec在wiki数据集上进行节点分类任务和可视化任务。wiki数据集包含 2,405 个网页和17,981条网页之间的链接关系，以及每个网页的所属类别。通过简单的超参搜索，这里使用p=0.25,q=4的设置。

本例中的训练，评测和可视化的完整代码在下面的git仓库中：

shenweichen/GraphEmbedding
https://github.com/shenweichen/GraphEmbedding

```
G = nx.read_edgelist('../data/wiki/Wiki_edgelist.txt',create_using=nx.DiGr

model = Node2Vec(G,walk_length=10,num_walks=80,p=0.25,q=4,workers=1)
model.train(window_size=5,iter=3)
embeddings = model.get_embeddings()

evaluate_embeddings(embeddings)
plot_embeddings(embeddings)
```

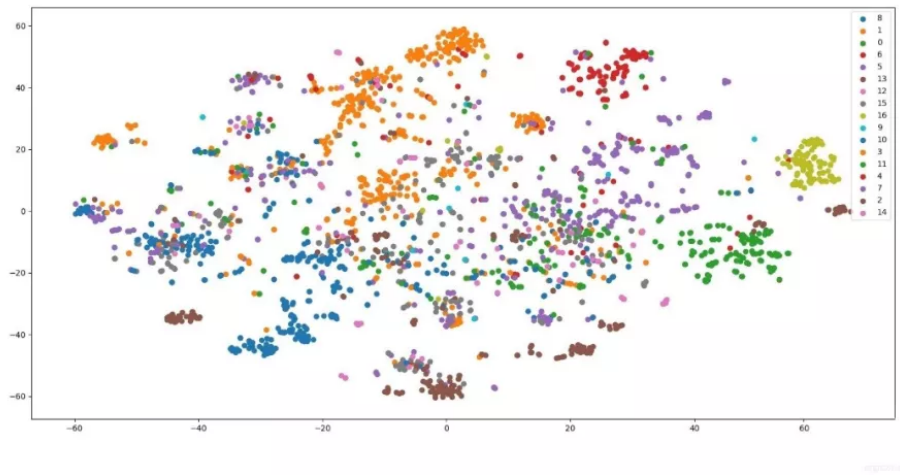
### 分类任务

micro-F1: 0.6757 macro-F1: 0.5917

这个结果相比于DeepWalk和LINE是有提升的。

### 可视化

这个结果相比于DeepWalk和LINE可以看到不同类别的分布更加分散了。




**参考资料**


- Grover A, Leskovec J. node2vec: Scalable Feature Learning for Networks[C]// Acm Sigkdd International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. 2016. https://www.kdd.org/kdd2016/papers/files/rfp0218-groverA.pdf


想了解更多关于GraphEmbedding的内容，欢迎关注公众号**浅梦的学习笔记**，回复“**加群**”可以一起参与讨论交流！