ΑΚΔ – 3η Εργαστηριακή Άσκηση

Link Prediction - Πρόβλεψη συνδέσμων

Συμεών Παπαβασιλείου papavass@mail.ntua.gr

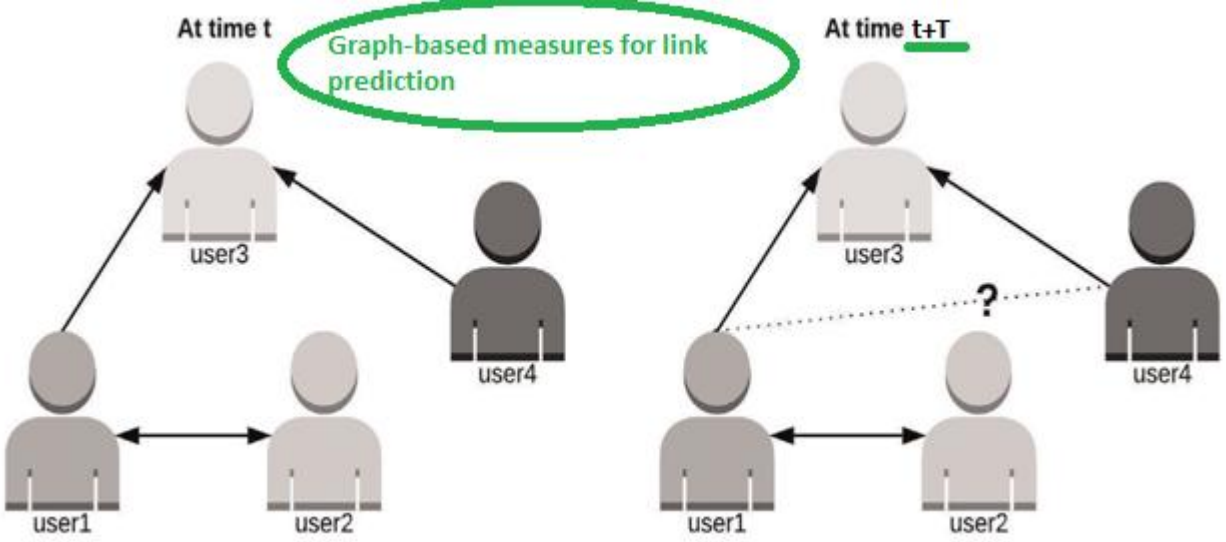
Ειρήνη Κοιλανιώτη eirinikoilanioti@mail.ntua.gr

Μαργαρίτα Βιτοροπούλου mvitoropoulou@netmode.ntua.gr

Βασίλειος Καρυώτης vassilis@netmode.ntua.gr

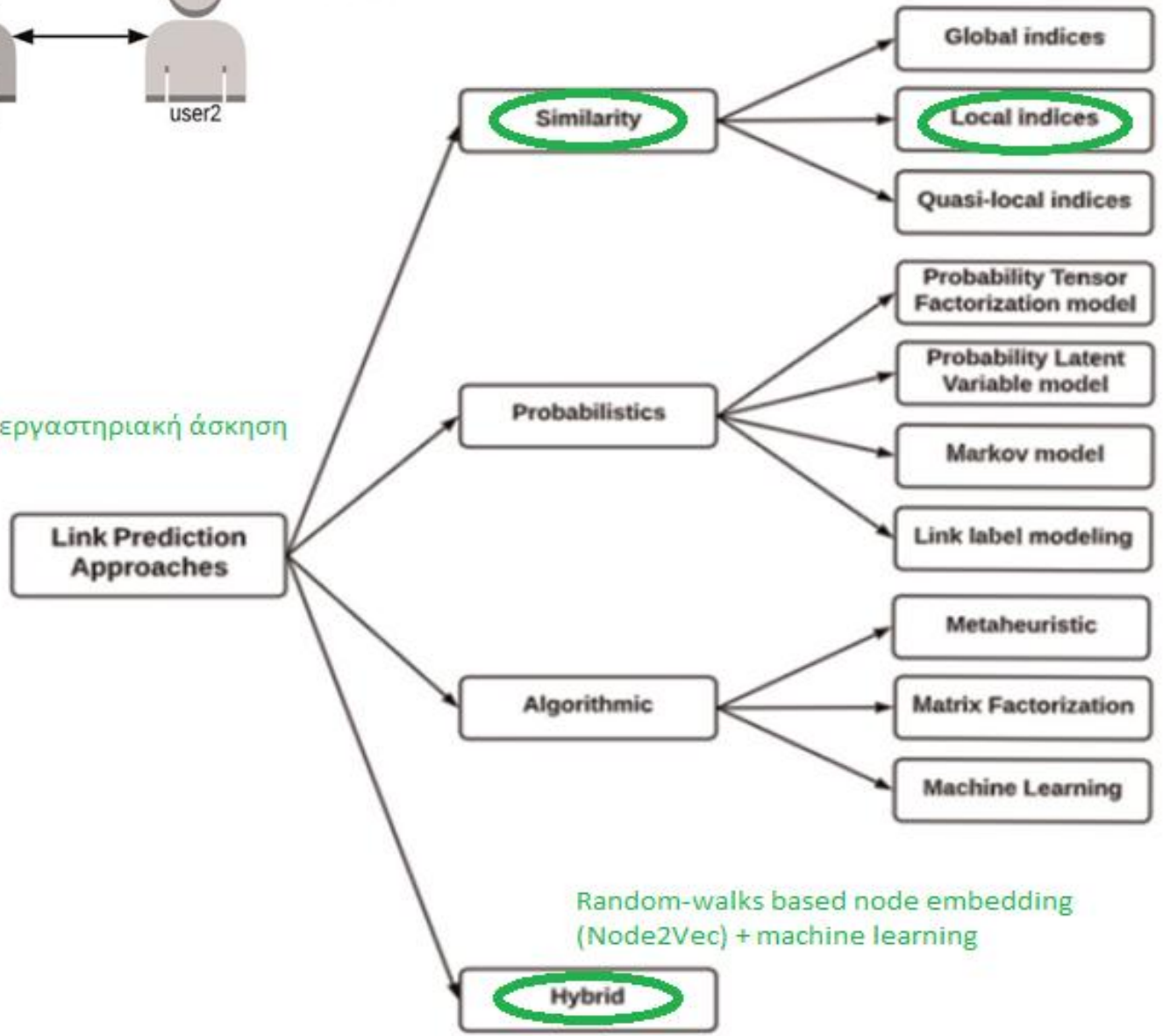
Κωνσταντίνα Σακκά nsakka@cn.ntua.gr

Ιωάννης Τζανεττής gtzane@gmail.com



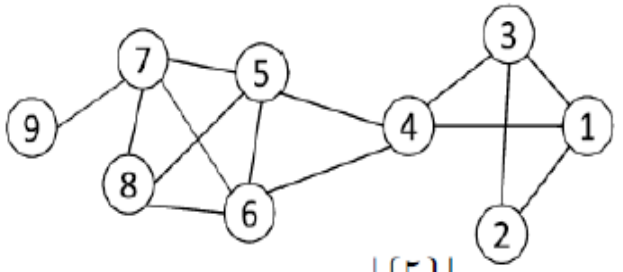
[1] Daud, Hamid, Saadoon, Sahran, Anuar, Applications of link prediction in social networks: A review. Journal of Network and Computer Applications, Volume 166, 2020, ELSEVIER.

3η εργαστηριακή άσκηση



Similarity metrics (Local indices)

- Jaccard Coefficient: $\frac{|\Gamma(u) \cap \Gamma(v)|}{|\Gamma(u) \cup \Gamma(v)|}$



$$Jaccard(4,6) = \frac{|\{5\}|}{|\{1,3,4,5,6,7,8\}|} = \frac{1}{7}$$

- Preferential Attachment: $|\Gamma(u)||\Gamma(v)|$

- Resource Allocation: $\sum_{w \in \Gamma(u) \cap \Gamma(v)} \frac{1}{|\Gamma(w)|}$

NODE EMBEDDING ΒΑΣΙΣΜΕΝΟ ΣΕ ΤΥΧΑΙΟΥΣ ΠΕΡΙΠΑΤΟΥΣ: NODE2VEC [4]

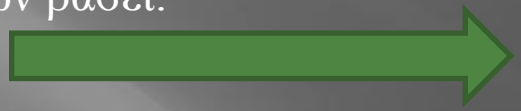
ΒΗΜΑΤΑ:

1.Τυχαίοι περίπατοι για παραγωγή προτάσεων από γράφο. Κάθε πρόταση είναι μια λίστα από node ids. Όλες οι προτάσεις συνιστούν ένα corpus.

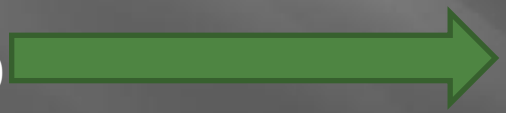
2.Το corpus χρησιμοποιείται για να απεικονιστεί ένας embedding vector για κάθε κόμβο στον γράφο. Κάθε κόμβος θεωρείται μοναδική λέξη στο λεξικό που έχει μέγεθος ίσο με το πλήθος των κόμβων στον γράφο. Για τον υπολογισμό των embedding vectors χρησιμοποιείται το Word2Vec.

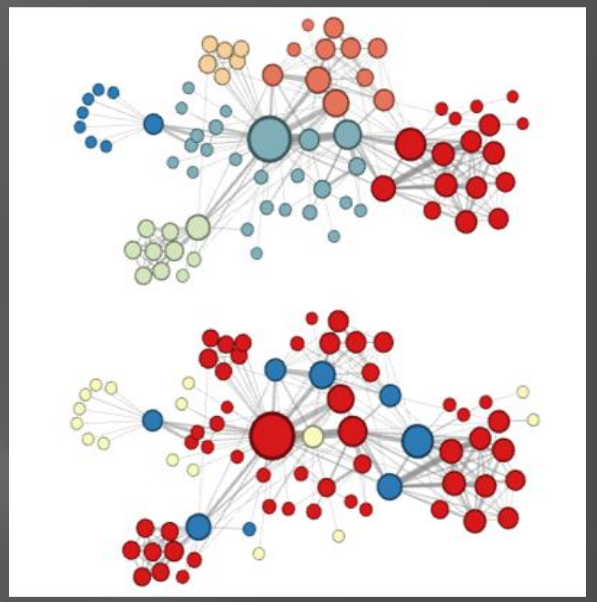
Node2Vec: Απεικόνιση γειτονικών κόμβων βάσει:

- Communities (homophily)



- Network roles (structural equivalence)

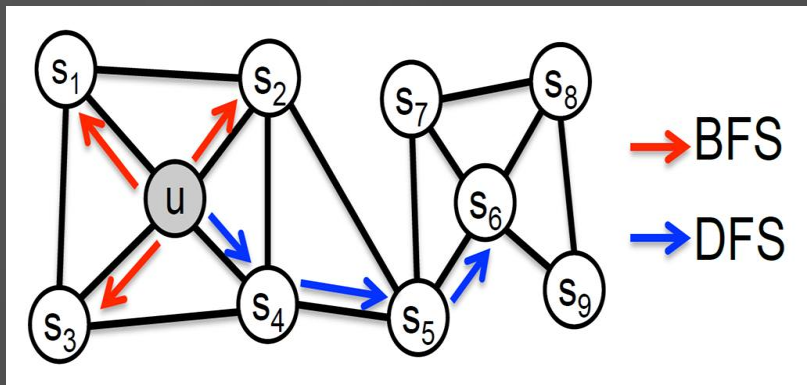




Les Misérables

•Κοντινό embedding κόμβων που ανήκουν στην ίδια κοινότητα (u, s1).

•Κόμβοι με όμοιους ρόλους (π.χ. hubs) πρέπει να έχουν παρόμοια embeddings (u, s6).



ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΤΥΧΑΙΩΝ ΠΕΡΙΠΑΤΩΝ ΜΕ ΤΟΝ NODE2VEC (1/2)

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)
  π = 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**
      $walk$ = node2vecWalk(G', u, l)
      Append $walk$ to $walks$
  f = 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} = GetNeighbors($curr$, G')
    s = AliasSample(V_{curr}, π)
    Append s to $walk$
  return $walk$

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

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

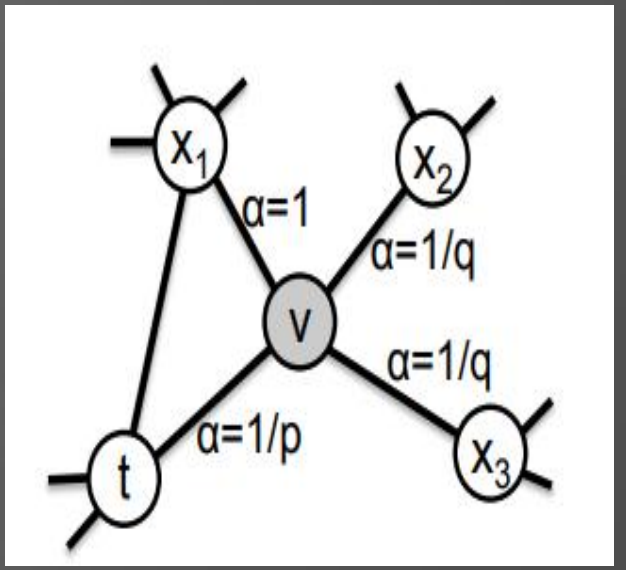
Για κάθε τυχαίο περίπατο:

- Βήμα 1: αρχικός κόμβος
- Βήμα 2: επιλογή γειτονικού κόμβου ως επόμενου
- Βήμα 3: επανάληψη βήματος 2 μέχρι το walk length να γίνει l

ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΤΥΧΑΙΩΝ ΠΕΡΙΠΑΤΩΝ ΜΕ ΤΟΝ NODE2VEC (2/2)

Bias στην επιλογή του επόμενου κόμβου:

- Πιο πρόσφατη ακμή στο random walk : **t** → **v**
- Βρισκόμαστε στον **v**



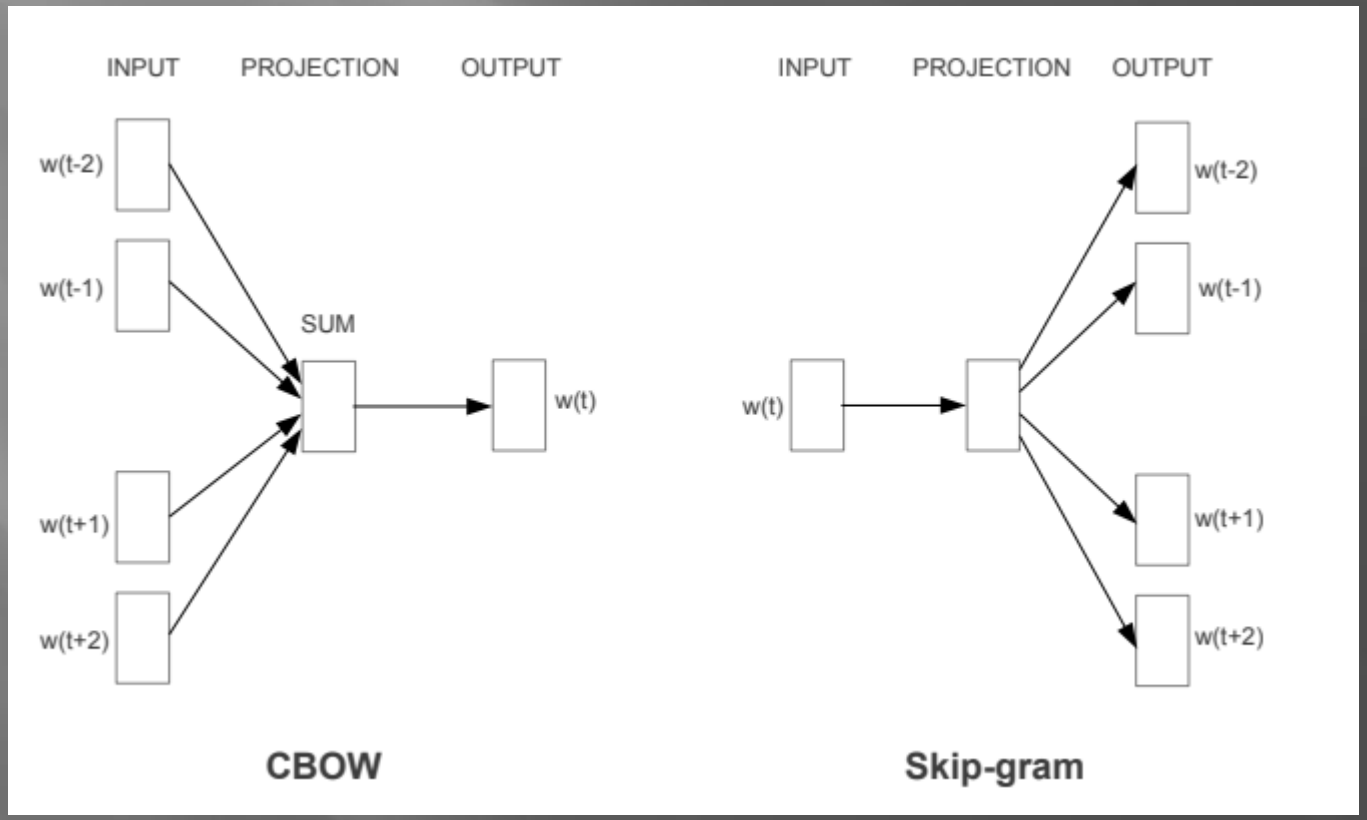
Return parameter p:
•(p> max(q, 1)) λιγότερο πιθανό να επιστρέψουμε σε κόμβο που επισκεφθήκαμε
•(p< min(q, 1)) backtrack κάποιου βήματος

In-out parameter q:
•q > 1 walk biased να επισκεφθεί κόμβους κοντά στον t (local view/ BFS).
•q < 1 walk biased να επισκεφθεί κόμβους μακριά από τον t (global view/ DFS).

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

WORD2VEC flavours

- **CBOW:** Πρόβλεψη τρέχουσας λέξης w(t) βάσει του context
- **Skip-gram:** Πρόβλεψη context βάσει της w(t)



Mikolov et al., Exploiting Similarities among Languages for Machine Translation, 2013, arXiv

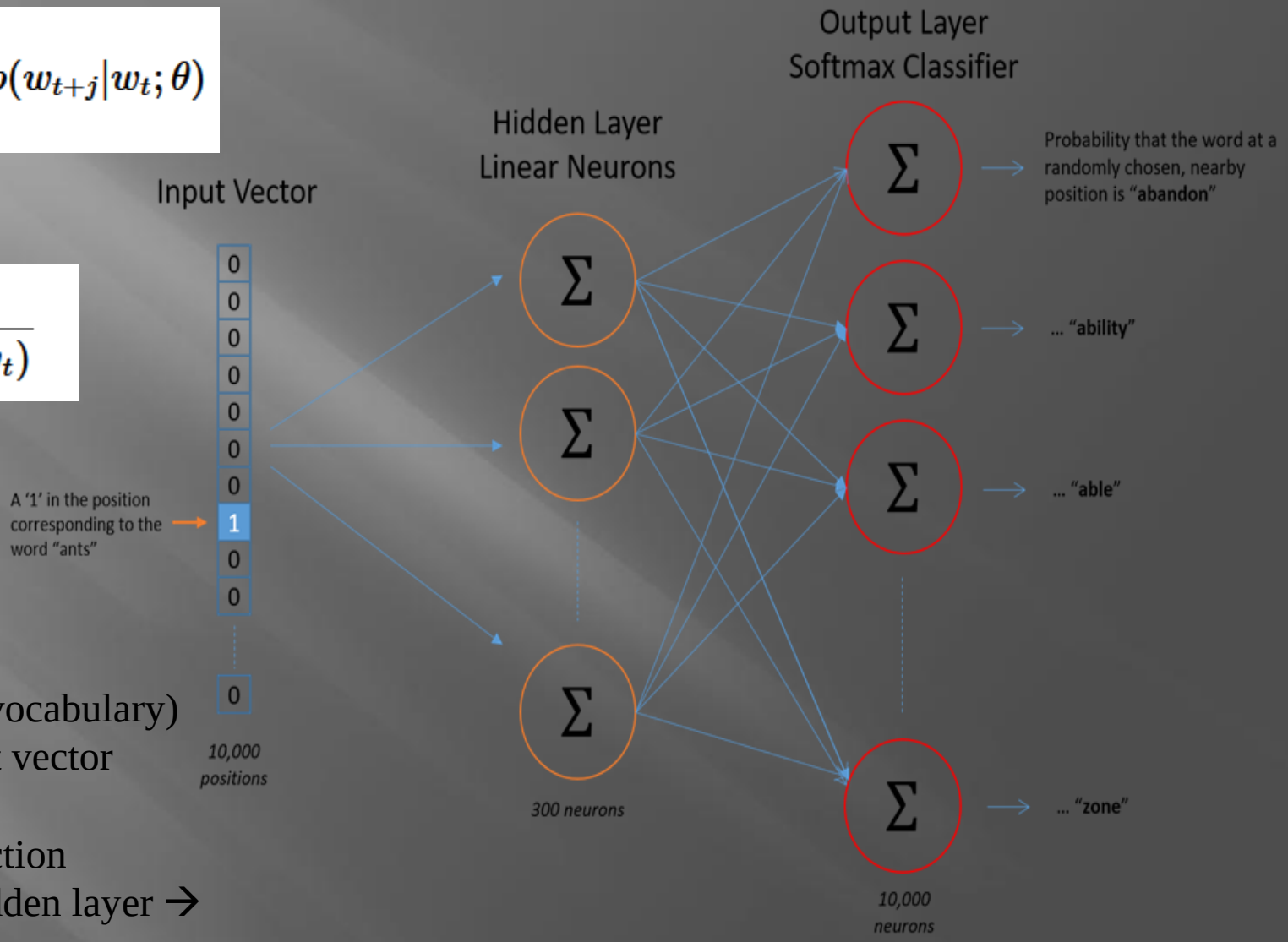
WORD2VEC SKIP-GRAM MODEL

- objective function:

$$argmax_\theta \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \sum_{j \in c, j!=0} logp(w_{t+j}|w_t;\theta)$$

- Softmax:

$$p(w_i|w_t;\theta) = \frac{exp(\theta w_i)}{\sum_t exp(\theta w_t)}$$



Παράδειγμα:

- V = 10000 (μέγεθος vocabulary)
- input: "ants" (one-hot vector encoding)
- Χωρίς activation function
- 300 νευρώνες στο hidden layer → 300 features

http://mccormickml.com/2016/04/19/word2vec-tutorial-the-skip-gram-model/

Μηχανική μάθηση (Machine Learning)

- **Training:** training set από labeled examples $\{(\mathbf{x}_1,y_1), \ldots, (\mathbf{x}_N,y_N)\}$, υπολογισμός της prediction function f
- **Testing:** εφαρμογή της f σε νέα test examples **x** και υπολογισμός της $y = f(\mathbf{x})$

$$y = f(\mathbf{x})$$

output/target variable

prediction function input/feature

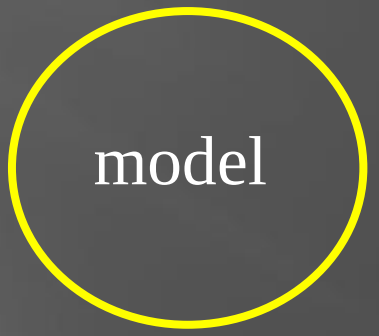
Μηχανική μάθηση (Machine Learning)

training data
(labeled)

Terrain	Unicycle-type	Weather	Go-For-Ride?
Trail	Normal	Rainy	NO
Road	Normal	Sunny	YES
Trail	Mountain	Sunny	YES
Road	Mountain	Rainy	YES
Trail	Normal	Snowy	NO
Road	Normal	Rainy	YES
Road	Mountain	Snowy	YES
Trail	Normal	Sunny	NO
Road	Normal	Snowy	NO
Trail	Mountain	Snowy	YES

Terrain	Unicycle-type	Weather	Go-For-Ride?
Trail	Normal	Rainy	NO
Road	Normal	Sunny	YES
Trail	Mountain	Sunny	YES
Road	Mountain	Rainy	YES
Trail	Normal	Snowy	NO
Road	Normal	Rainy	YES
Road	Mountain	Snowy	YES
Trail	Normal	Sunny	NO
Road	Normal	Snowy	NO
Trail	Mountain	Snowy	YES

learn



pre-processing

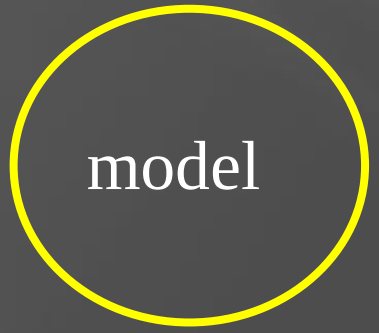
test data

Terrain	Unicycle-type	Weather	Go-For-Ride?
Trail	Normal	Rainy	NO
Road	Normal	Sunny	YES
Trail	Mountain	Sunny	YES
Road	Mountain	Rainy	YES
Trail	Normal	Snowy	NO
Road	Normal	Rainy	YES
Road	Mountain	Snowy	YES
Trail	Normal	Sunny	NO
Road	Normal	Snowy	NO
Trail	Mountain	Snowy	YES

Terrain	Unicycle-type	Weather	Go-For-Ride?
Trail	Normal	Rainy	NO
Road	Normal	Sunny	YES
Trail	Mountain	Sunny	YES
Road	Mountain	Rainy	YES
Trail	Normal	Snowy	NO
Road	Normal	Rainy	YES
Road	Mountain	Snowy	YES
Trail	Normal	Sunny	NO
Road	Normal	Snowy	NO
Trail	Mountain	Snowy	YES

Classify (discrete output variable)

Regress (continuous output variable)



prediction

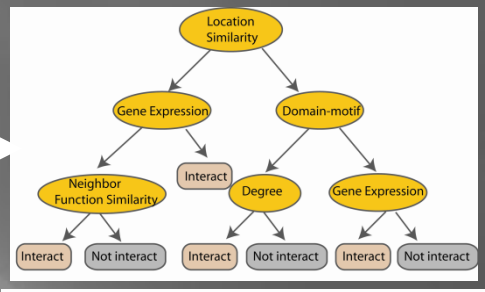
Random Forest Classifier

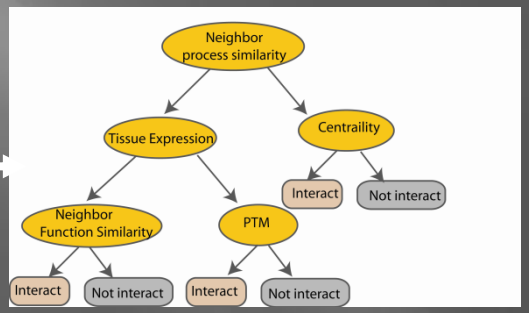
$$\hat{f}_{\text{bag}}(x) = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} \hat{f}^{*b}(x).$$

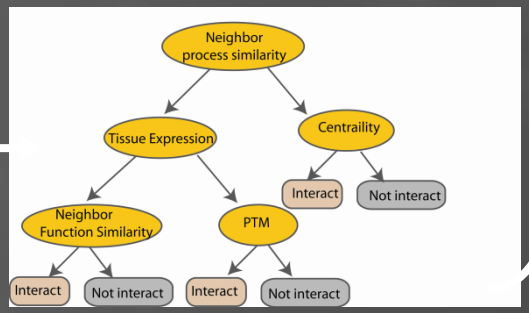
B bootstrap samples
from training data

M features

N examples







Majority voting

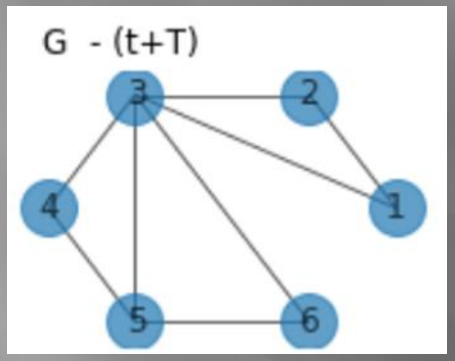
1. Κατασκευή γράφου και προεργασία για την πρόβλεψη συνδέσμων

- **1(i).** Κατασκευή γράφου από Similarities DBPedia Κόμβοι: σελίδες Wikipedia, ακμές: σχέσεις ομοιότητας.

- **1(ii).** G: |V|, |E|, avg(degree), #conn.components.

- **1(iii).** Υπολογίστε όλα τα ασύνδετα ζεύγη κόμβων στον γράφο χρησιμοποιώντας τον πίνακα γειτνίασης (adjacency matrix) (μη κατευθυνόμενος γράφος, συμμετρικός πίνακας)

π.χ.




```
[[0. 1. 1. 0. 0. 0.]
 [1. 0. 1. 0. 0. 0.]
 [1. 1. 0. 1. 1. 1.]
 [0. 0. 1. 0. 1. 0.]
 [0. 0. 1. 1. 0. 1.]
 [0. 0. 1. 0. 1. 0.]]
```

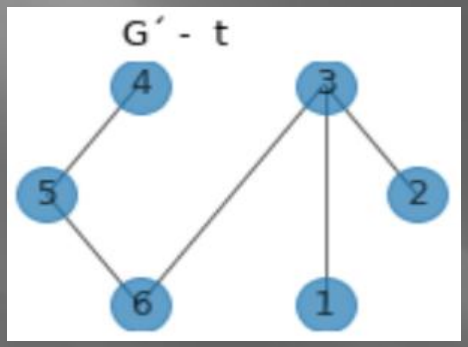
unconnected_edges={(1, 4), (1, 5), (1, 6), (2, 4), (2, 5), (2, 6), (4, 6)}

- **1(iv).** Υπολογίστε το σύνολο των ακμών που μπορούν να αφαιρεθούν από τον γράφο χωρίς να υπάρχει κατάτμηση (splitting) του γράφου (αριθμός των συνεκτικών συνιστωσών αμετάβλητος). Ελέγξτε, επίσης, ότι δεν μειώνεται ο αριθμός των κόμβων (εφόσον δεν υπάρχει ξεχωριστό αρχείο μόνο με κόμβους στο dataset).

π.χ. removable_edges={ (1, 2),(3, 4), (3, 5) }

- **1(να).** Κατασκευάστε dataframe που συνενώνει τις απαντήσεις των ερωτημάτων 1(iii) και 1(iv) (unconnected+removables). Χρησιμοποιήστε την μεταβλητή *link* που θα παίρνει τιμή 1 ή 0 ανάλογα με την ύπαρξη συνδέσμου ή μη. Το dataframe αυτό συγκεντρώνει τα θετικά και αρνητικά δείγματα για την πρόβλεψη των μελλοντικών συνδέσεων.

- **1(νβ).** Κατασκευάστε τον γράφο G′ που προκύπτει από την αφαίρεση από τον γράφο G των ακμών του ερωτήματος 1(iv).



- **1(νγ).** G′: |V|, |E|, avg(degree), #conn.components.

2. Εισαγωγή σε similarity-based μετρικές για link prediction

- **2(i).** Υπολογισμός Jaccard Coefficient(G′) (NetworkX)
- **2(ii).** k ακμές με την υψηλότερη τιμή μετρικής JC, όπου k= A.M. mod 10. Για A.M. λήγοντα σε 0 δώστε τις 10 ακμές με την υψηλότερη τιμή μετρικής.
- **2(iii).** *Precision, Recall* και *Accuracy* για τιμές κατωφλίου: 0.10, 0.15, 0.25, 0.50, 1.00.

$$Precision = \frac{TP}{TP+FP}$$
$$Recall = \frac{TP}{TP+FN}$$
$$Accuracy = \frac{TP+TN}{TP+FN+TN+FP}$$

- **Υπόδειξη:** Θετικό αποτέλεσμα: η μετρική JC υπερβαίνει μια τιμή κατωφλίου (>=).
- Αληθώς θετικά: τα αποτελέσματα που βγήκαν θετικά και πράγματι θα υπάρξουν οι συνδέσεις που περιγράφουν (ερ. 1(iv)).
- Αληθώς αρνητικά: τα αποτελέσματα που βγήκαν αρνητικά και πράγματι δεν θα υπάρξουν οι συνδέσεις που περιγράφουν (ερ. 1(iii)).
- TN+FP =all unconnected edges(G)

3. Πρόβλεψη συνδέσμων βάσει similarity-based μετρικών

- 3(i). Μετρικές: JC, PA, RA. Τρόποι συσχέτισης (correlation) μεταξύ των τιμών των μετρικών μέσα από τα πακέτα NumPy ή SciPy ή Pandas.

- **3(ii).** Εργαστείτε πάνω σε **αντίγραφο** του dataframe που κατασκευάσατε στο ερώτημα 1(να) (unconnected+removables). Στο dataframe θα προσθέσετε ως στήλες τις τιμές των μετρικών JC, PA, RA (NetworkX) για τον μειωμένο γράφο G′.

	link	Jacc.Coeff.	Pr.Attachment	Resource Allocation
(1, 6)	0	0.333333	32	0.700000
(1, 46)	0	0.200000	8	0.166667

- **3(iiiα).** Random Forest Classifier για πρόβλεψη συνδέσεων (στο αντίγραφο dataframe).

- **3(iiiβ).** Δώστε τις (A.M mod 10) πρώτες προβλέψεις και την ακρίβεια (accuracy) του μοντέλου.

- **3(iiiγ).**Υπολογίστε την πιθανότητα να συνδεθούν οι κόμβοι (1,47).

4. Πρόβλεψη συνδέσμων με embedding βασισμένο σε τυχαίους περιπάτους (Random Walks)

- **4(i).** Εξάγετε τα χαρακτηριστικά (features) του γράφου G′ με τον αλγόριθμο Node2vec.

p	q	dimensions	num_walks	walk_length	window_size	workers
1.0	1.0	128	10	80	10	multiprocessing.cpu_count()

- p - παράμετρος τυχαίων περιπάτων p που καθορίζει την πιθανότητα “1/p” επιστροφής στον κόμβο προέλευσης (source node),
- q - παράμετρος τυχαίων περιπάτων q που καθορίζει την πιθανότητα “1/q” μετακίνησης σε κόμβο μακριά από τον κόμβο προέλευσης (source node),
- dimensions - πλήθος διαστάσεων των node2vec embeddings,
- num_walks - αριθμός περιπάτων από κάθε κόμβο,
- walk_length - μήκος τυχαίου περιπάτου,
- window_size - μέγεθος παραθύρου context για τον αλγόριθμο Word2Vec,
- num_iter - αριθμός SGD επαναλήψεων (epochs),
- workers - αριθμός workers για τον Word2Vec

- **4(ii).** Εφαρμόστε τον αλγόριθμο Random Forest Classifier, για να προβλέψετε τις συνδέσεις.

- **4(iii).** Υπολογίστε την ακρίβεια (accuracy) του μοντέλου.

- **Ερώτηση bonus(+10/100):** Για τους binary operators για learning των edge features με τον αλγόριθμο Node2Vec [4] ((α) Average, (β) Hadamard, (γ) Weighted-L1 και (δ) Weighted-L2) τροποποιήστε τον κώδικά σας και σημειώστε τις παρατηρήσεις σας ως προς την απόδοση του αλγορίθμου.

Βιβλιογραφία:

[1] Nur Nasuha Daud, Siti Hafizah Ab Hamid, Muntadher Saadoon, Firdaus Sahran, Nor Badrul Anuar, Applications of link prediction in social networks: A review, Journal of Network and Computer Applications,Volume 166, 2020, ELSEVIER, ISSN 1084-8045

[2] Jérôme Kunegis. KONECT – The Koblenz Network Collection. In Proc. Int. Conf. on World Wide Web Companion, pages 1343–13502013.

[3] Sören Auer, Christian Bizer, Georgi Kobilarov, Jens Lehmann, Richard Cyganiak, and Zachary Ives. DBpedia: A nucleus for a web of open data. In Proc. Int. Semant. Web Conf., pages 722–735, 2008.

[4] A. Grover, J. Leskovec, Node2vec: Scalable Feature Learning for Networks. In ACM KDD, 2016.

[5] T. Mikolov, I. Sutskever, K. Chen, G. S. Corrado, and J. Dean. Distributed representations of words and phrases and their compositionality. In NIPS, 2013.