

# 图嵌入





## 目录



图嵌入的通用框架



简单图嵌入

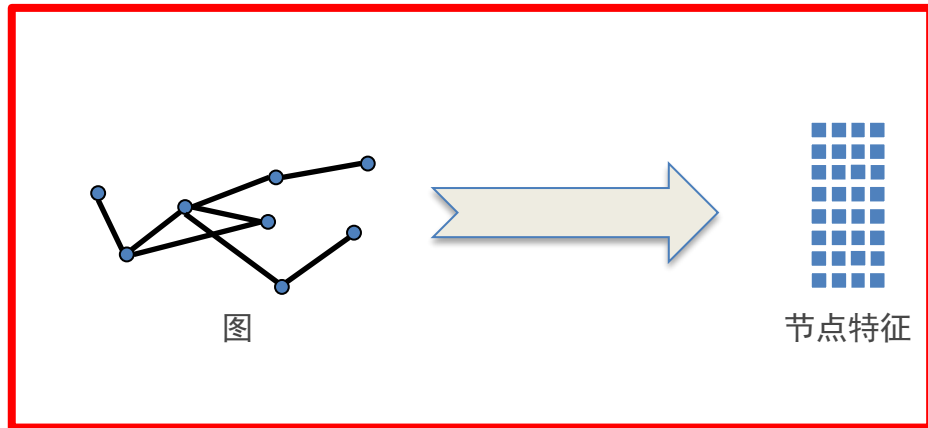


复杂图嵌入

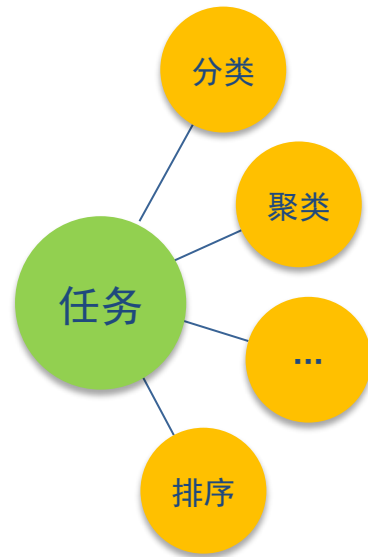




## 图上的机器学习

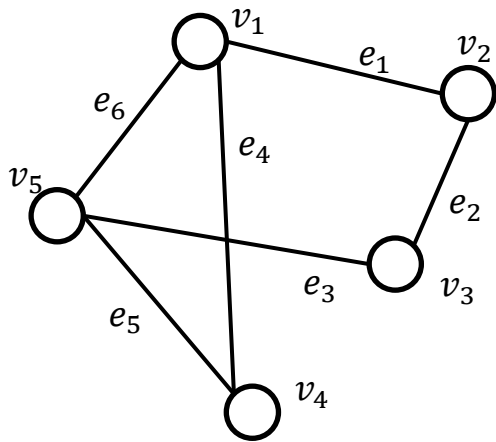


图上的特征提取





## 邻接矩阵



$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

稀疏

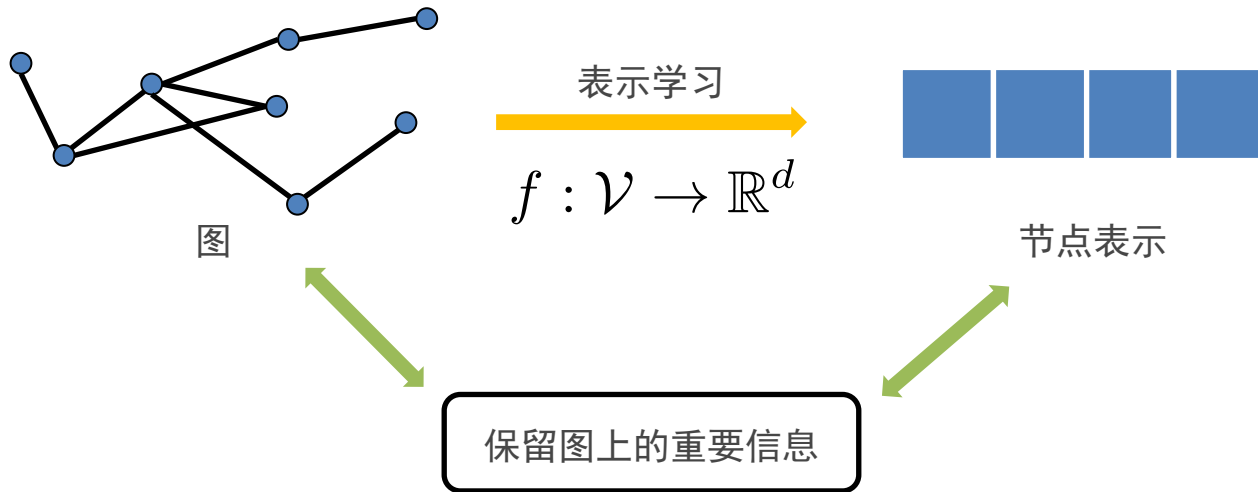
高维度

学习低维的节点表示



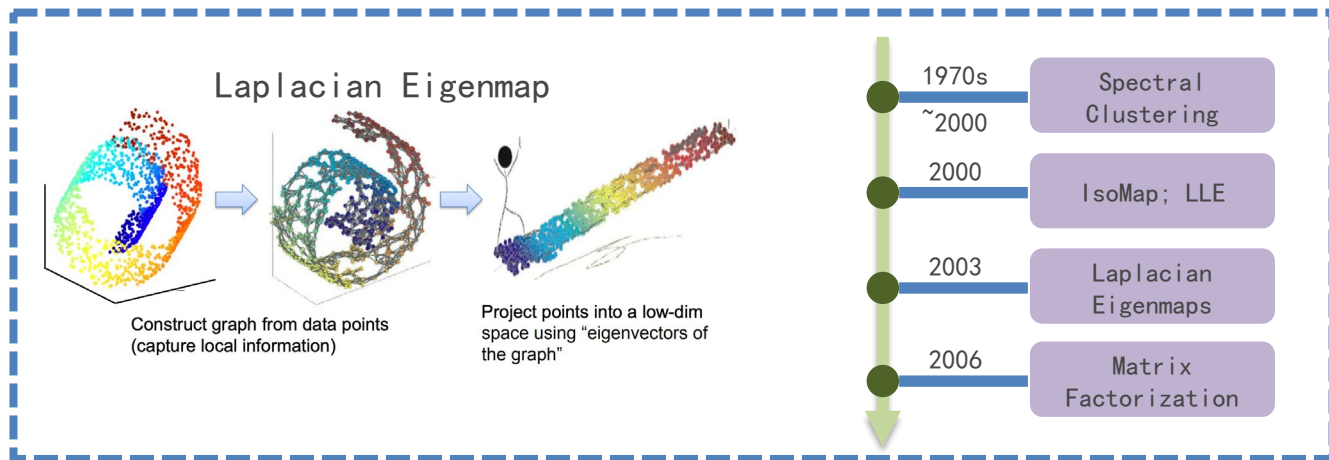


## 节点表示学习





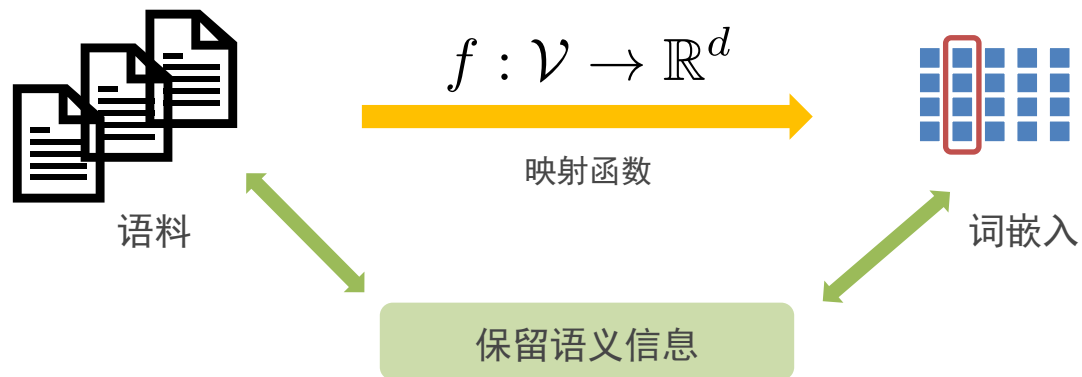
## 节点表示学习1.0：数据降维



- ❑ 通常具有很高的复杂度
- ❑ 无法应用到大规模的图上



## word2vec词嵌入



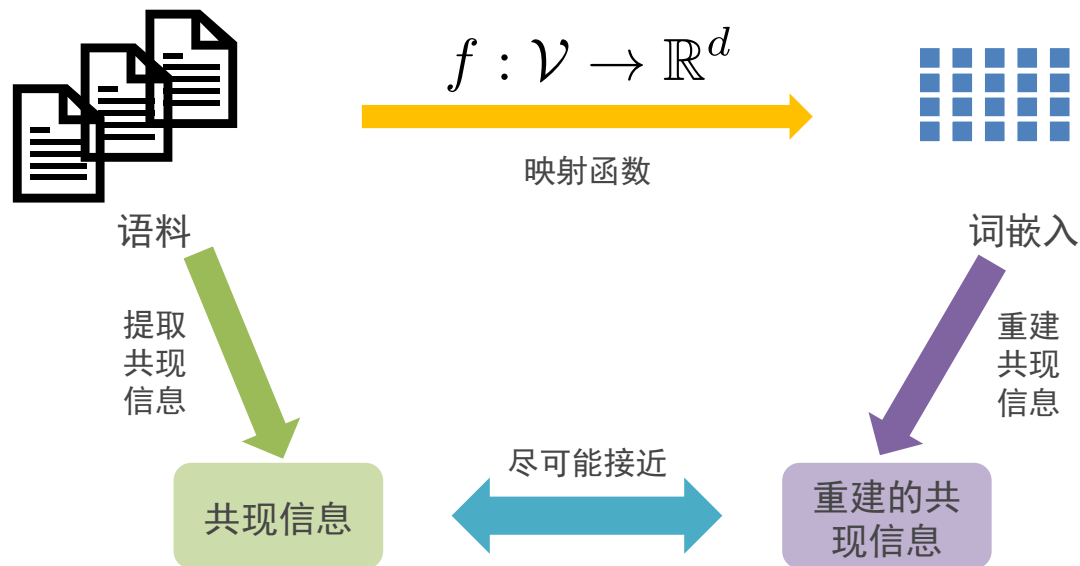
“You shall know a word by the company it keeps” —J. R. Firth:11

共现信息十分重要





## word2vec词嵌入



$$\max P(\{by, the, it, keeps\} | company)$$

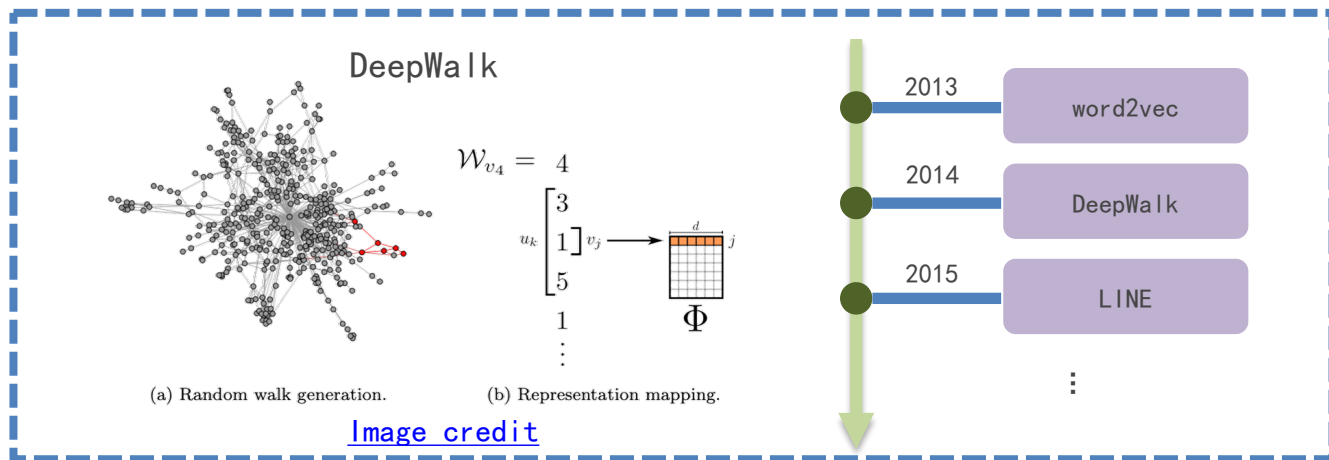
“You shall know a word by the company it keeps” —J.R. Firth:11







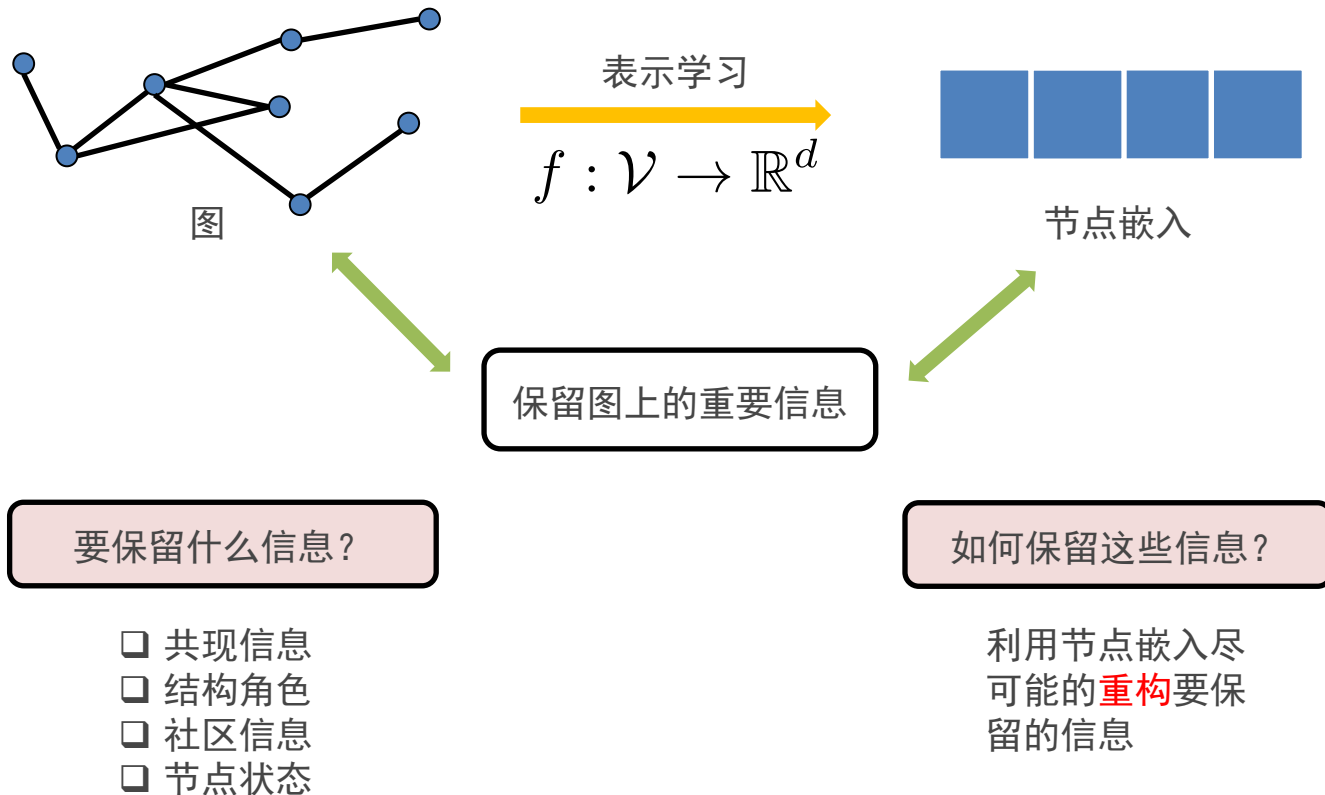
## 节点表示学习2.0：图嵌入



- ❑ 通常比较高效
- ❑ 有较好的可拓展性

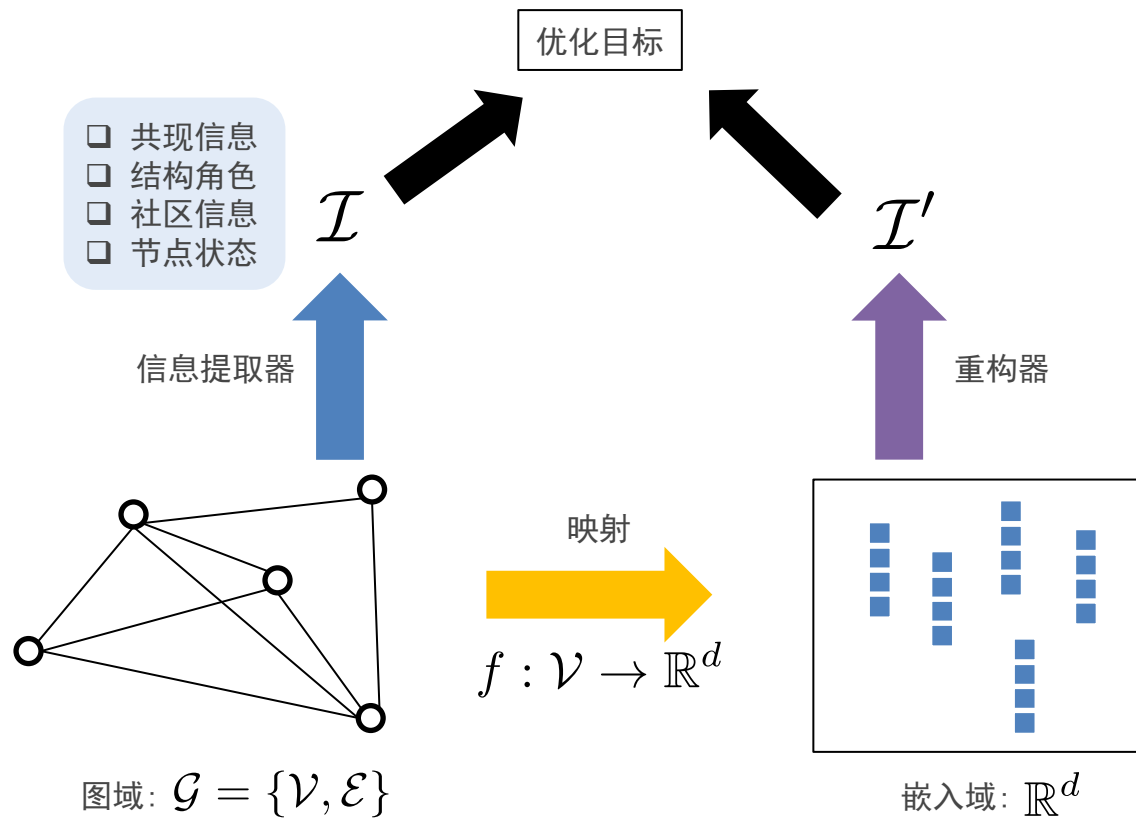


## 节点嵌入





## 图嵌入的通用框架





## 目录



图嵌入的通用框架



简单图嵌入

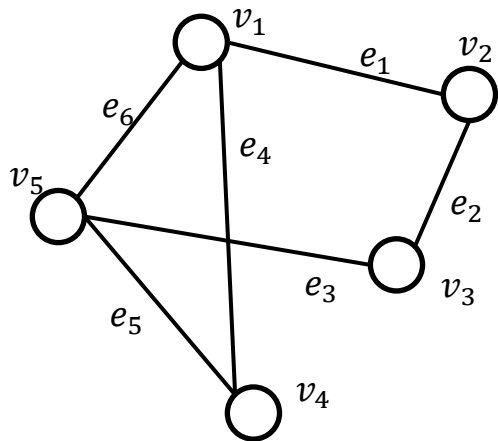


复杂图嵌入





## 简单图



无向

同质

节点和边上没有额外信息



## 目录



### 简单图嵌入



保留邻域信息



保留结构角色



保留节点状态



保留社区结构



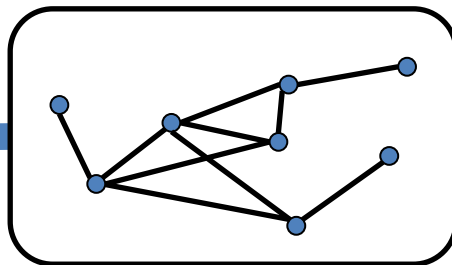


## 保留共现信息的图嵌入: DeepWalk

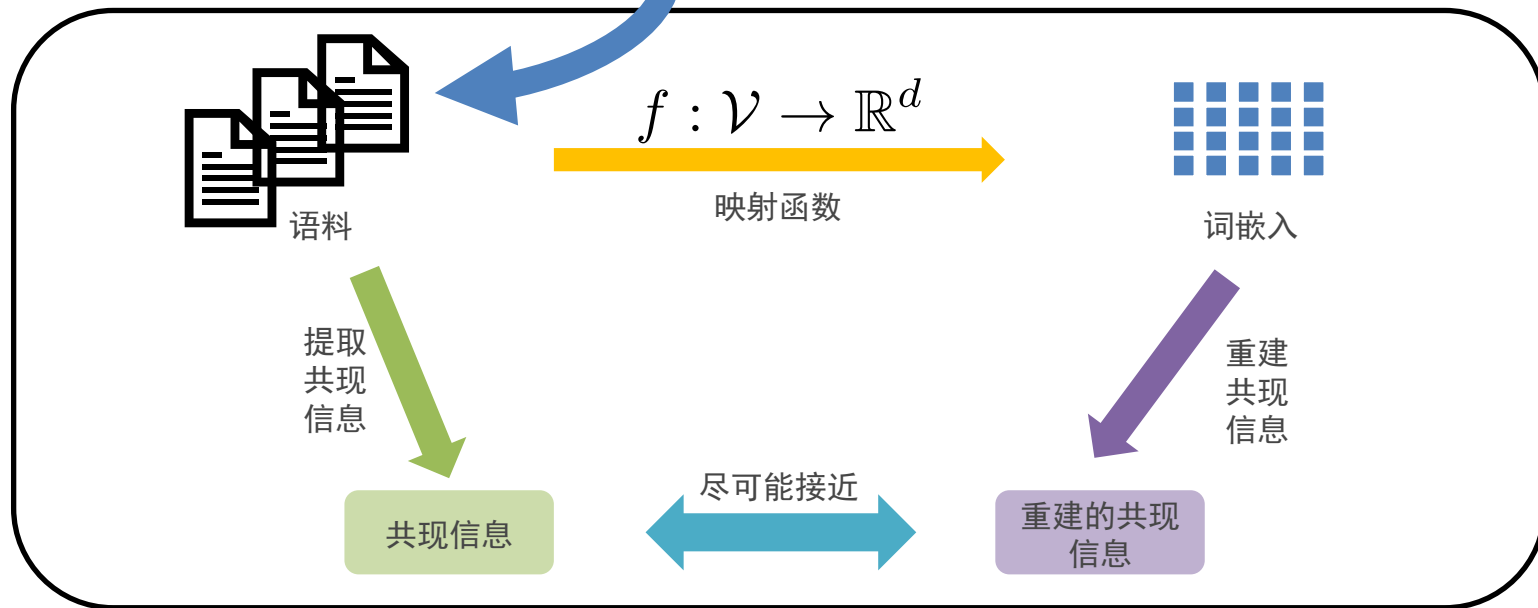
“虚拟语言”

- 词汇: 节点
- 句子: 随机游走

随机游走

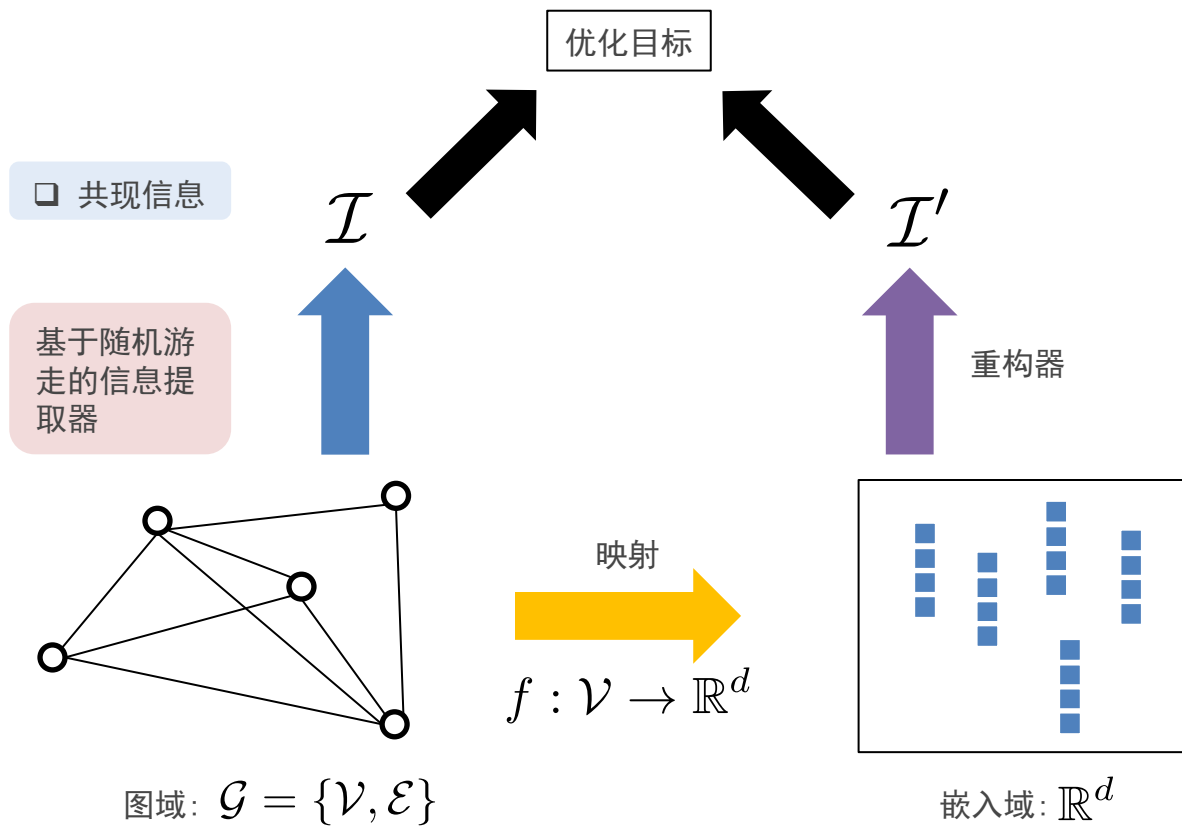


图

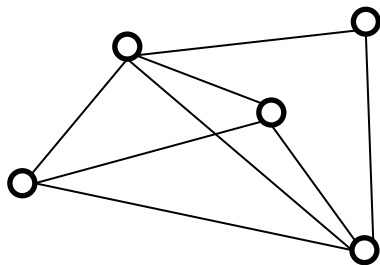




## 保留共现信息的图嵌入: DeepWalk

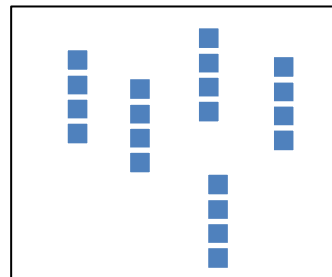






## 映射

$$f : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}^d$$



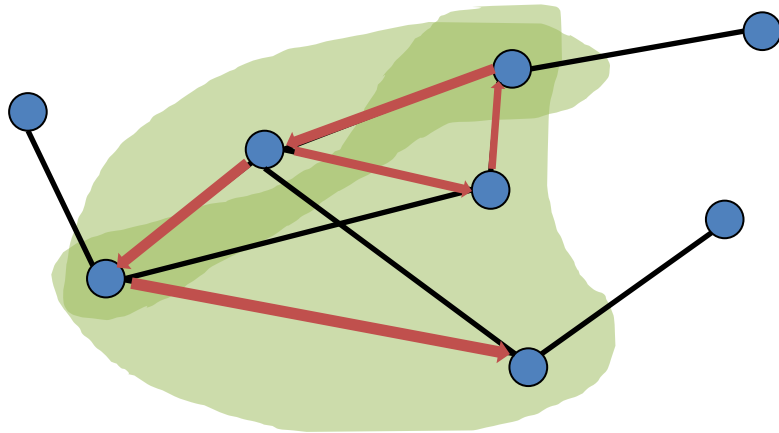
$$f(v_i) = \mathbf{W}\mathbf{e}_i$$

$$f(v_2) = \begin{matrix} \begin{bmatrix} \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{bmatrix} \\ \mathbf{W} \quad \mathbf{e}_2 \end{matrix}$$





## 随机游走



这样随机生成的途径是图上的一个随机游走

随机游走在点 $v^{(t)}$ 根据如下均匀分布选择下一个节点

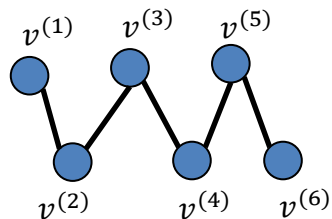
$$p\left(v^{(t+1)} \mid v^{(t)}\right) = \begin{cases} \frac{1}{d(v^{(t)})}, & \text{if } v^{(t+1)} \in \mathcal{N}\left(v^{(t)}\right) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$





## 基于随机游走的信息提取器

上下文节点：中心节点**一定距离内**的点



中心节点      上下文节点

$v^{(1)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}$
$v^{(2)}$	$v^{(1)}, v^{(3)}, v^{(4)}$
$v^{(3)}$	$v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(4)}, v^{(5)}$
$v^{(4)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}, v^{(5)}, v^{(6)}$
$v^{(5)}$	$v^{(3)}, v^{(4)}, v^{(6)}$
$v^{(6)}$	$v^{(4)}, v^{(5)}$

随机游走  $\mathcal{W} = (v^{(1)}, \dots, v^{(6)})$

- ❑ 从每个节点出发
- ❑ 重复多次

$$\mathcal{R} = \{\mathcal{W}\}$$

共现信息  $\mathcal{I}_{\mathcal{W}}$

$$\mathcal{I} = \bigcup_{\mathcal{W} \in \mathcal{R}} \mathcal{I}_{\mathcal{W}}$$





## 重构器

中心节点	上下文节点
$v^{(1)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}$
$v^{(2)}$	$v^{(1)}, v^{(3)}, v^{(4)}$
$v^{(3)}$	$v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(4)}, v^{(5)}$
$v^{(4)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}, v^{(5)}, v^{(6)}$
$v^{(5)}$	$v^{(3)}, v^{(4)}, v^{(6)}$
$v^{(6)}$	$v^{(4)}, v^{(5)}$

共现信息

$$\mathcal{I}_{\mathcal{W}} = \{(v_{cen}, v_{con})\}$$
$$\mathcal{I} = \bigcup_{\mathcal{W} \in \mathcal{R}} \mathcal{I}_{\mathcal{W}}$$

重构共现信息

利用节点嵌入预测出上下文节点

$$p(v_{con} | v_{cen})$$

$$\prod_{(v_{cen}, v_{con}) \in \mathcal{I}_{\mathcal{W}}} p(v_{con} | v_{cen})$$



## 重构器

中心节点	上下文节点
$v^{(1)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}$
$v^{(2)}$	$v^{(1)}, v^{(3)}, v^{(4)}$
$v^{(3)}$	$v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(4)}, v^{(5)}$
$v^{(4)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}, v^{(5)}, v^{(6)}$
$v^{(5)}$	$v^{(3)}, v^{(4)}, v^{(6)}$
$v^{(6)}$	$v^{(4)}, v^{(5)}$

两个映射函数

$$f_{cen}(v_i) = \mathbf{W}_{cen} \mathbf{e}_i$$

$$f_{con}(v_i) = \mathbf{W}_{con} \mathbf{e}_i$$

重构共现信息

利用节点嵌入预测出上下文节点

$$p(v_{con} | v_{cen})$$

$$\frac{\exp \left( f_{con}(v_{con})^\top f_{cen}(v_{cen}) \right)}{\sum_{v \in \mathcal{V}} \exp \left( f_{con}(v)^\top f_{cen}(v_{cen}) \right)}$$





## 重构器

中心节点	上下文节点
$v^{(1)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}$
$v^{(2)}$	$v^{(1)}, v^{(3)}, v^{(4)}$
$v^{(3)}$	$v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(4)}, v^{(5)}$
$v^{(4)}$	$v^{(2)}, v^{(3)}, v^{(5)}, v^{(6)}$
$v^{(5)}$	$v^{(3)}, v^{(4)}, v^{(6)}$
$v^{(6)}$	$v^{(4)}, v^{(5)}$

共现信息

$$\mathcal{I}_{\mathcal{W}} = \{(v_{cen}, v_{con})\}$$

$$\mathcal{I} = \bigcup_{\mathcal{W} \in \mathcal{R}} \mathcal{I}_{\mathcal{W}}$$

重构共现信息

利用节点嵌入预测出上下文节点

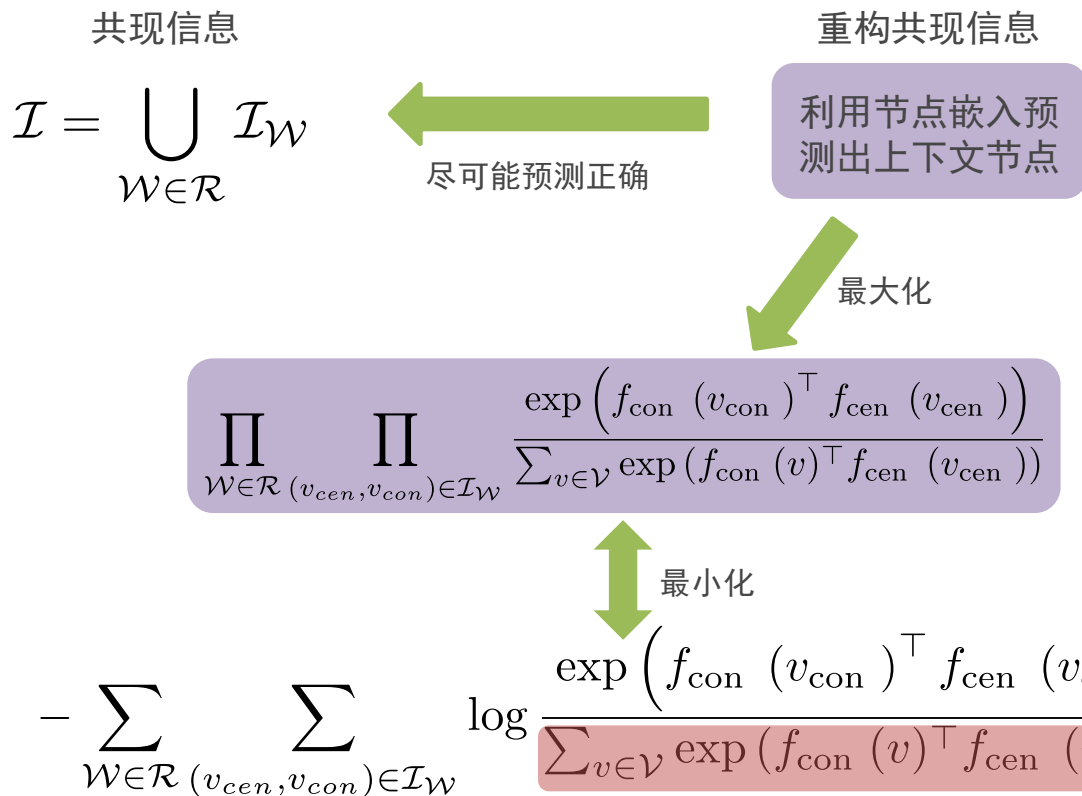
$$p(v_{con} | v_{cen})$$

$$\prod_{\mathcal{W} \in \mathcal{R}} \prod_{(v_{cen}, v_{con}) \in \mathcal{I}_{\mathcal{W}}} \frac{\exp(f_{con}(v_{con})^\top f_{cen}(v_{cen}))}{\sum_{v \in \mathcal{V}} \exp(f_{con}(v)^\top f_{cen}(v_{cen}))}$$



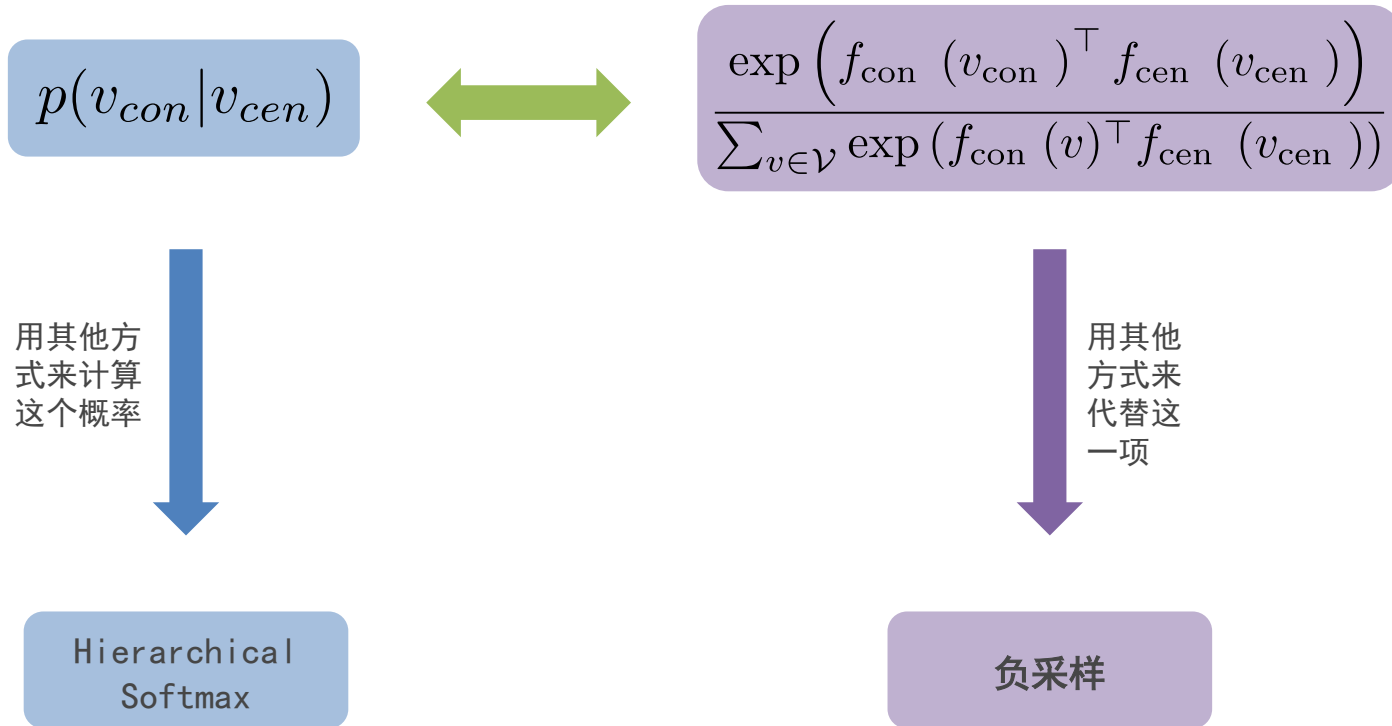


## 目标函数





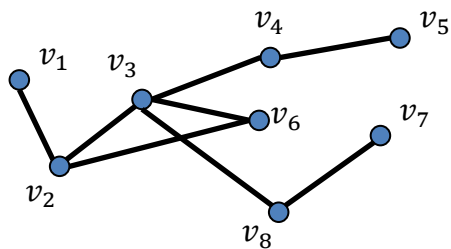
## 提高可拓展性





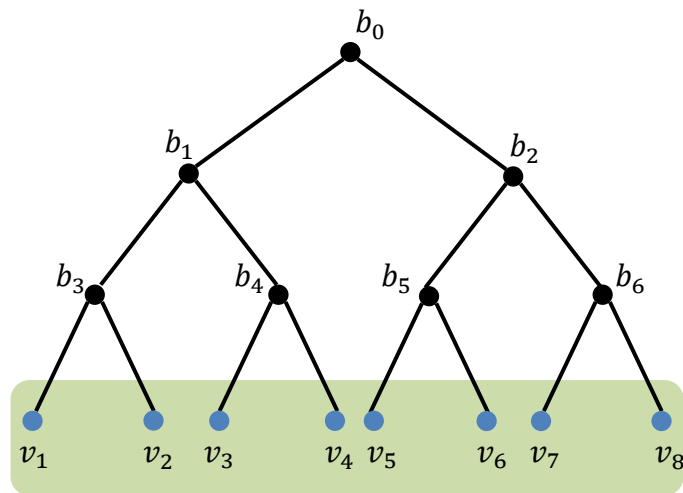


## Hierarchical Softmax



$$p(v_{con} | v_{cen})$$

$$p(v_3 | v_8)$$



$$p(\text{left} | b_0, v_8) = \sigma \left( f_b(b_0)^\top f(v_8) \right)$$



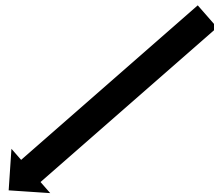


## 负采样

最大化

$$\exp \left( f_{\text{con}}(v_{\text{con}})^{\top} f_{\text{cen}}(v_{\text{cen}}) \right) \quad \text{最大化}$$

$$\sum_{v \in \mathcal{V}} \exp \left( f_{\text{con}}(v)^{\top} f_{\text{cen}}(v_{\text{cen}}) \right) \quad \text{最小化}$$



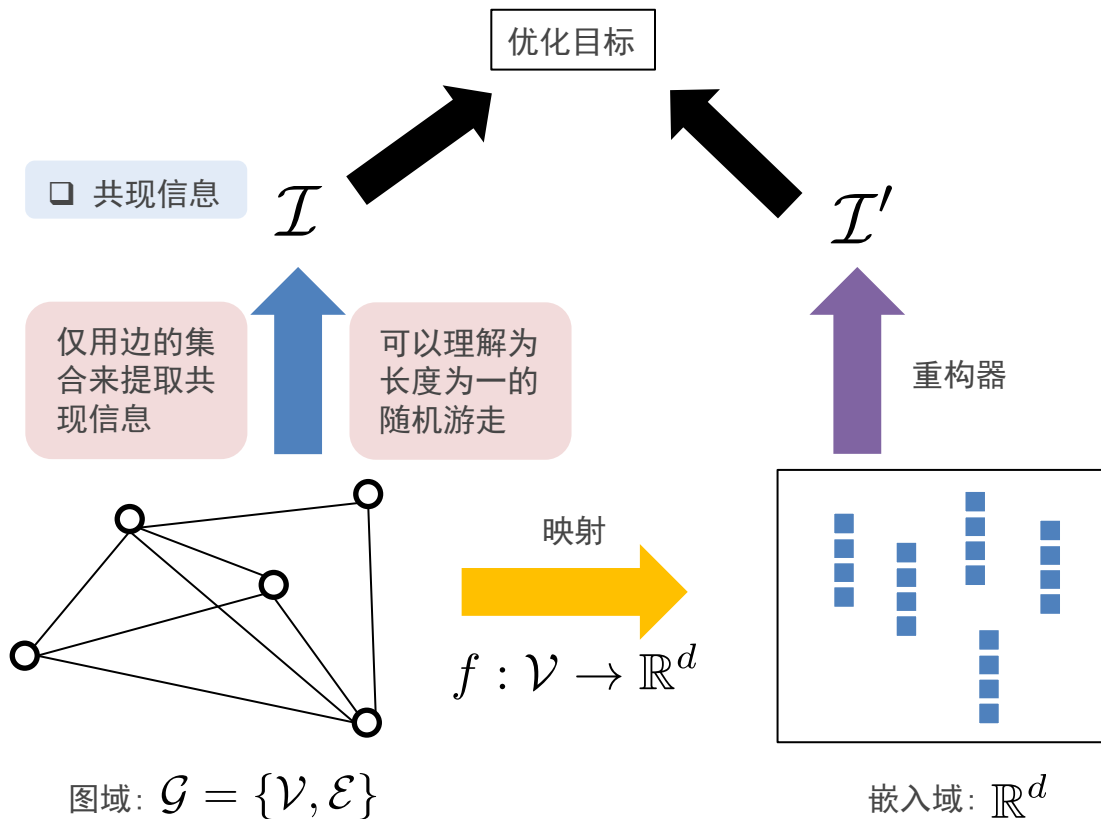
$$\log \sigma \left( f_{\text{con}}(v_{\text{con}})^{\top} f_{\text{cen}}(v_{\text{cen}}) \right) + \sum_{i=1}^k E_{v_n \sim P_n(v)} \left[ \log \sigma \left( -f_{\text{con}}(v_n)^{\top} f_{\text{cen}}(v_{\text{cen}}) \right) \right]$$

$k$ 个负样本



## 其他保留共现信息的图嵌入方法

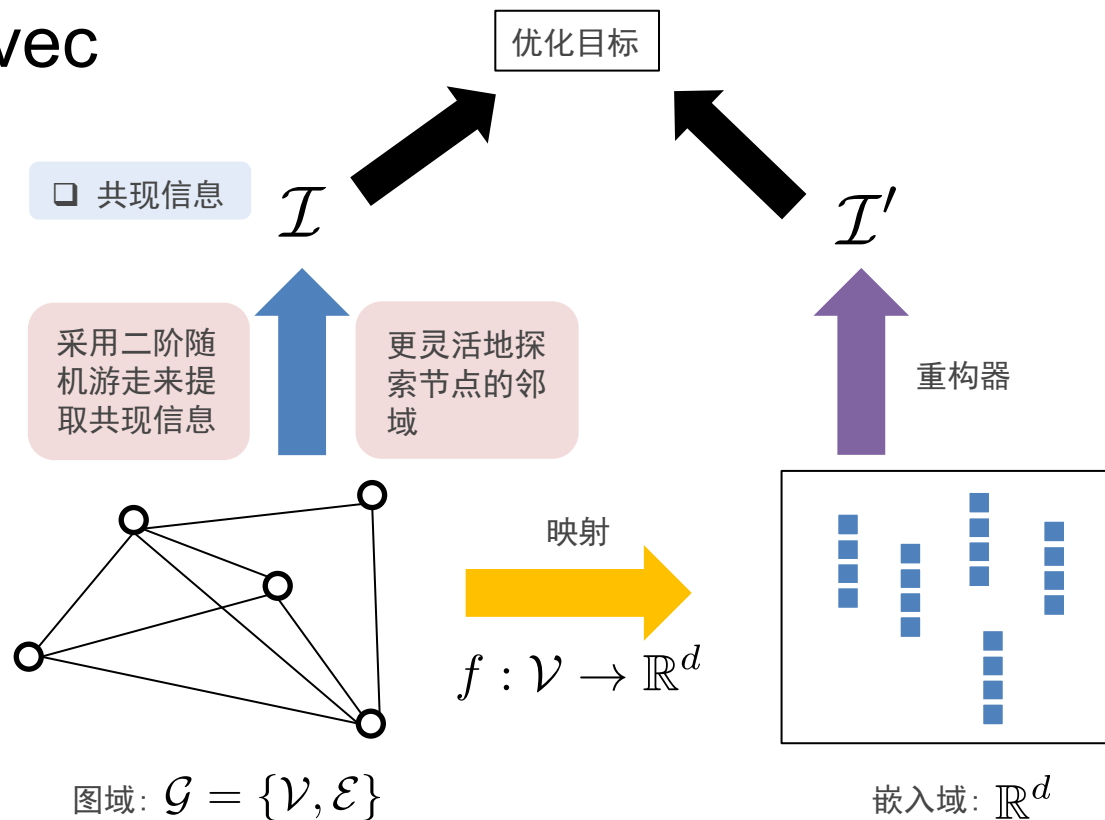
### LINE





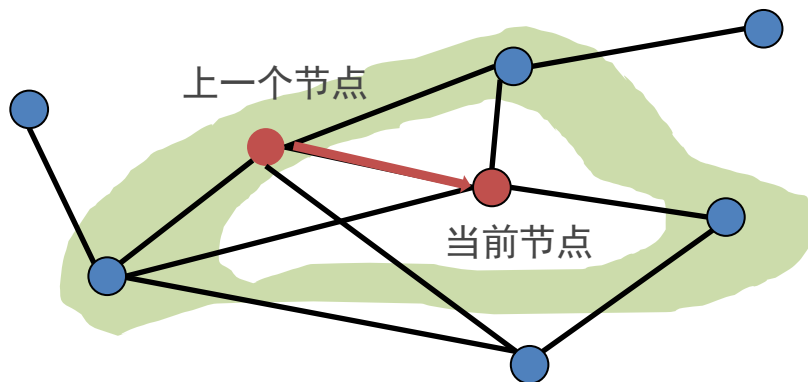
## 其他保留共现信息的图嵌入方法

### node2vec





## 二阶随机游走



邻居节点

随机游走

随机选择一个邻居节点  
作为下一个节点

二阶随机游走

选择下一个节点时同时考虑  
当前节点和上一节点

$$\alpha_{pq} \left( v^{(t+1)} \mid v^{(t-1)}, v^{(t)} \right) = \begin{cases} \frac{1}{p}, & \text{dis} \left( v^{(t-1)}, v^{(t+1)} \right) = 0 \\ 1, & \text{dis} \left( v^{(t-1)}, v^{(t+1)} \right) = 1 \\ \frac{1}{q}, & \text{dis} \left( v^{(t-1)}, v^{(t+1)} \right) = 2 \end{cases}$$





## 目录



### 简单图嵌入



保留邻域信息



**保留结构角色**



保留节点状态

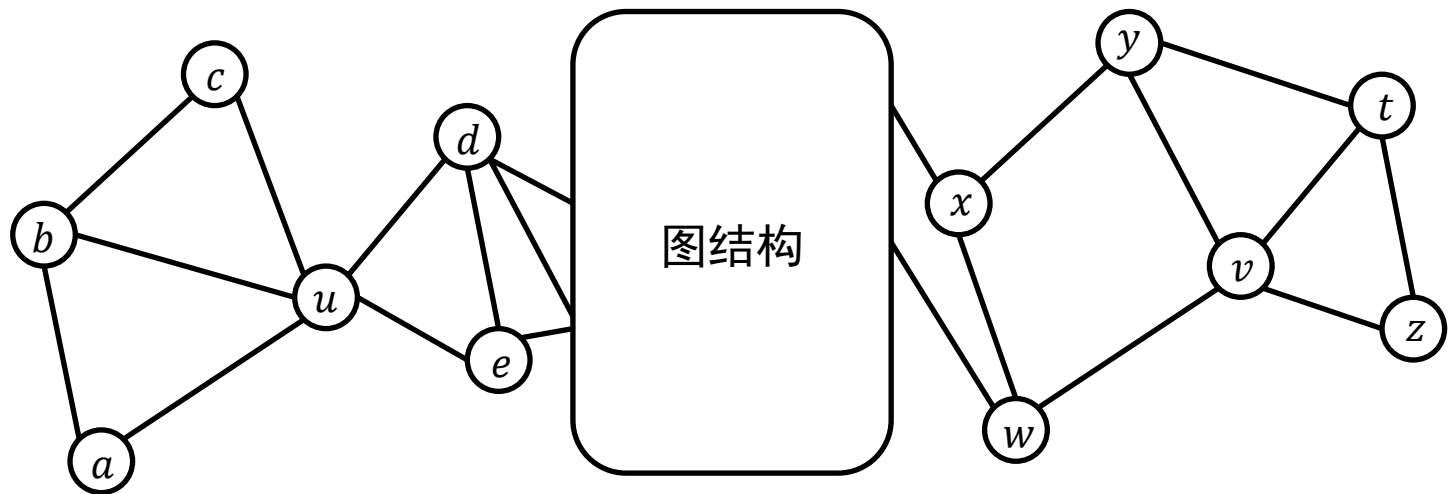


保留社区结构



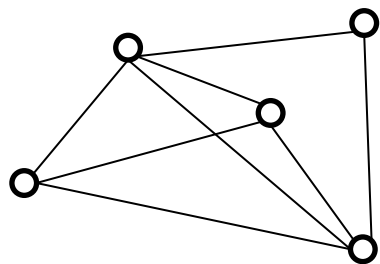


## 结构角色



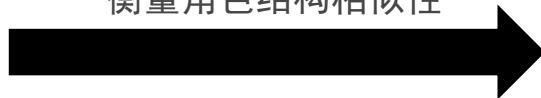


## 保留结构角色信息的图嵌入: struc2vec



图

衡量角色结构相似性



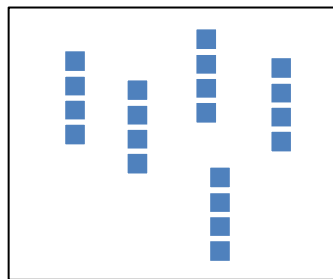
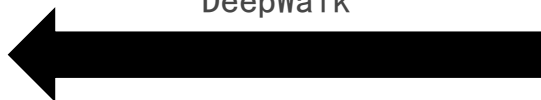
角色结构相似性  
 $g(v_i, v_j)$

基于角色结构相似性  
构建新图



新图  
(全连接)

DeepWalk

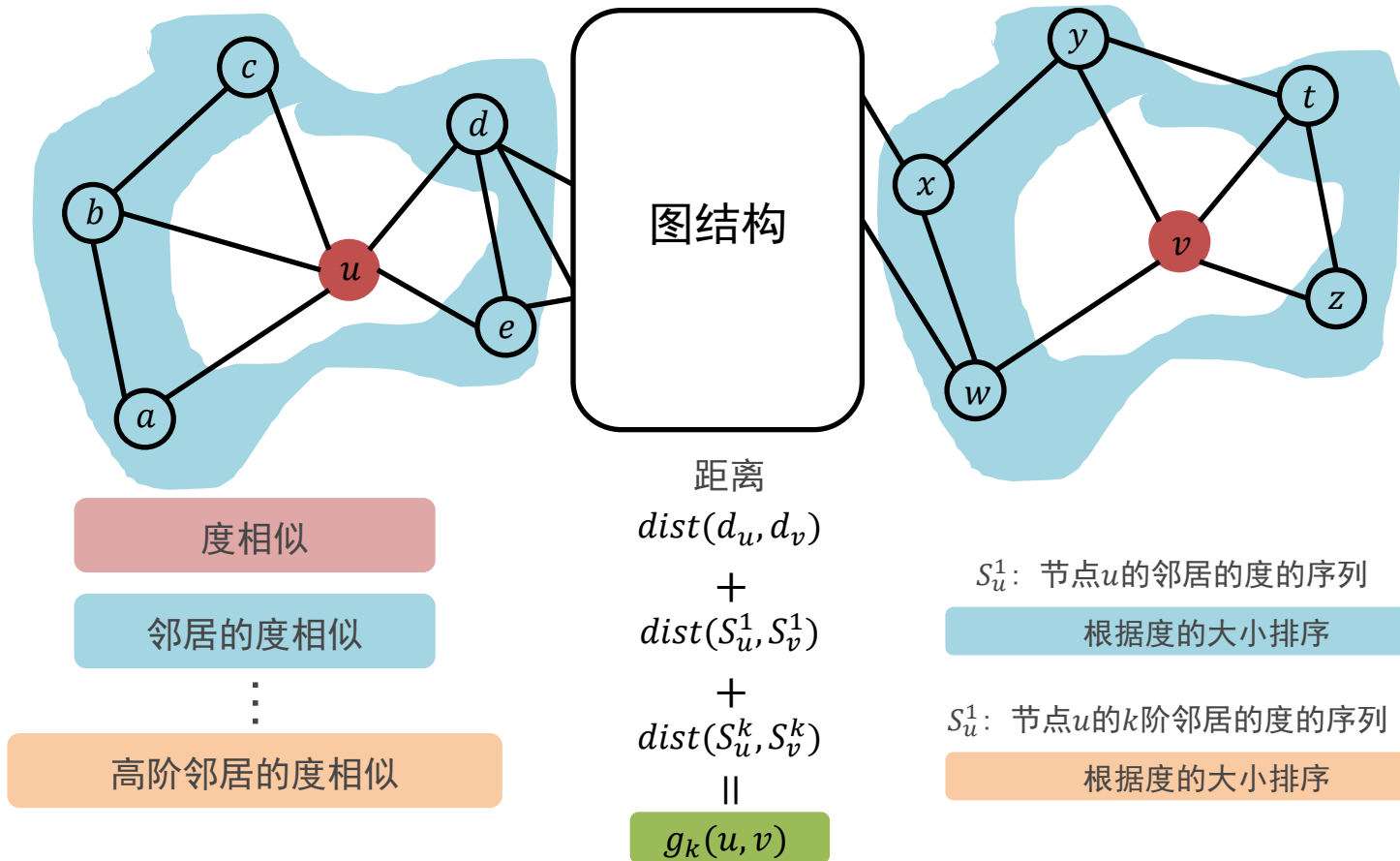


节点嵌入





## 衡量角色结构相似性





## 全连接图的构造

	距离
零阶	$g_0(u, v)$
一阶	$g_1(u, v)$
	$\vdots$
$k$ 阶	$g_k(u, v)$

利用各阶的距离构造各自的全连接图

边的权重

$$w_0(u, v) = \exp(-g_0(u, v))$$

↕ 相连接

$$w_1(u, v) = \exp(-g_1(u, v))$$

↕ 相连接

$$w_k(u, v) = \exp(-g_k(u, v))$$

- 某阶内游走
- 相邻的阶之间游走



## 目录



### 简单图嵌入



保留邻域信息



保留结构角色



**保留节点状态**

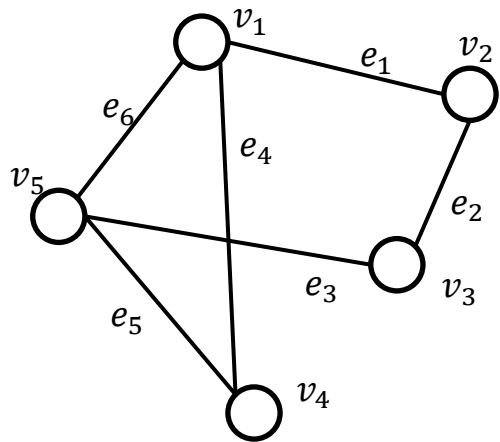


保留社区结构



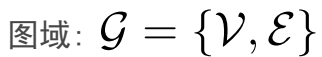


## 节点状态



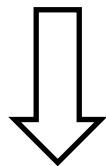
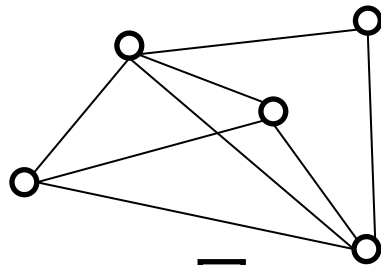
节点的中心性用来衡量  
节点在图上的重要程度





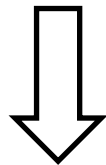


## 信息提取器



计算

节点状态

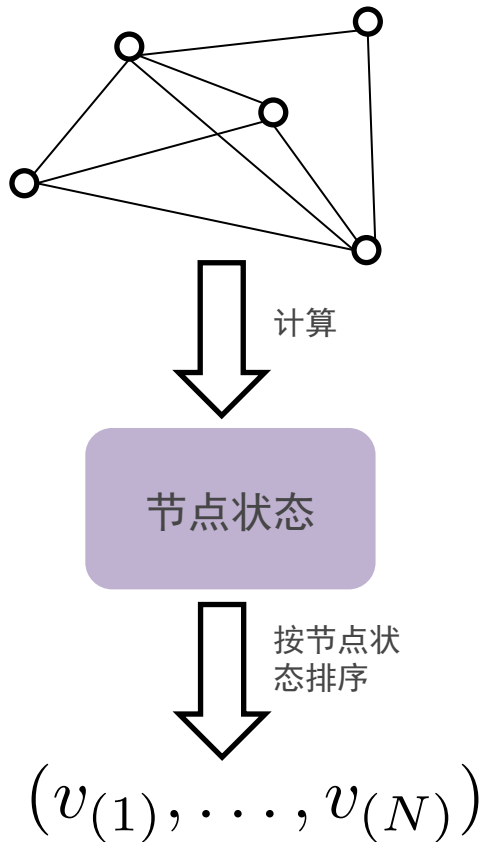


按节点状  
态排序

$(v_{(1)}, \dots, v_{(N)})$



## 重构器



重构节点状态信息

利用节点嵌入预测  
节点排序

$$p_{\text{global}} = \prod_{1 \leq i < j \leq N} p(v_{(i)}, v_{(j)})$$

预测节点  $v_{(i)}$  排在节点  $v_{(j)}$  之前的概率

$$p(v_{(i)}, v_{(j)}) = \sigma(\mathbf{w}^\top (f(v_{(i)}) - f(v_{(j)})))$$



## 目标函数

节点状态信息

$$(v_{(1)}, \dots, v_{(N)})$$

重构节点状态信息

利用节点嵌入预测  
节点排序

←  
尽可能预测正确

↙  
最大化

$$p_{\text{global}} = \prod_{1 \leq i < j \leq N} p(v_{(i)}, v_{(j)})$$



实际中我们通常最小化它的对数的相反数





## 目录



### 简单图嵌入



保留邻域信息



保留结构角色



保留节点状态

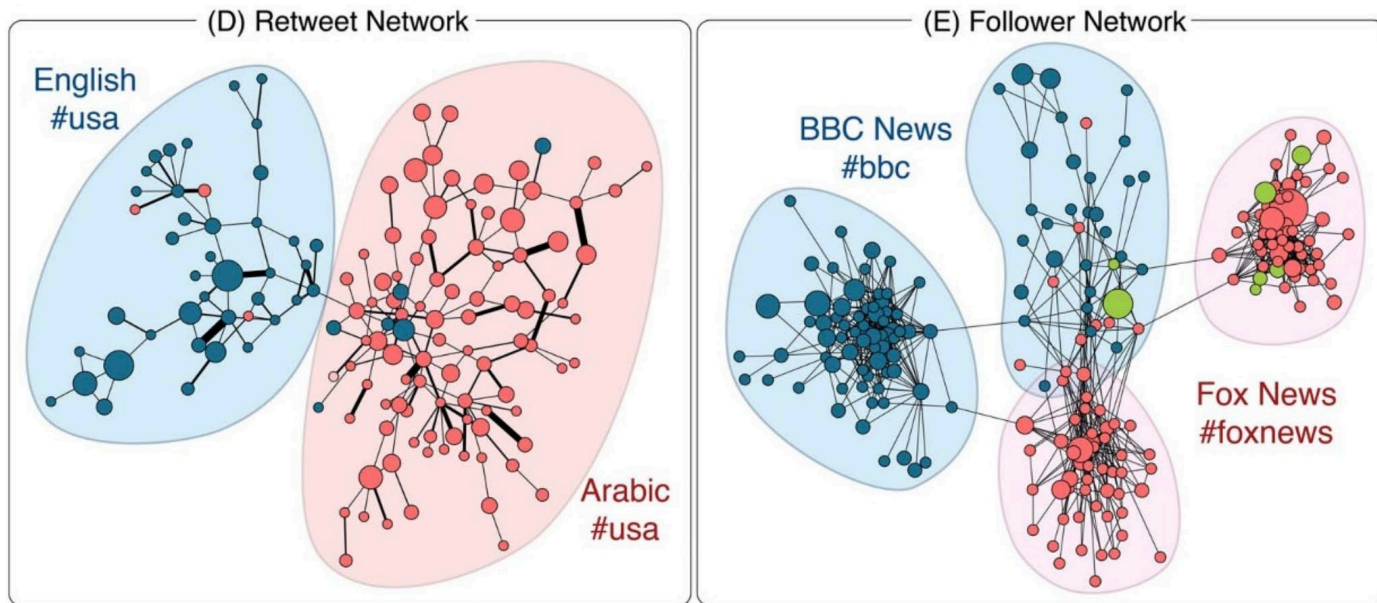


保留社区结构





## 社区结构



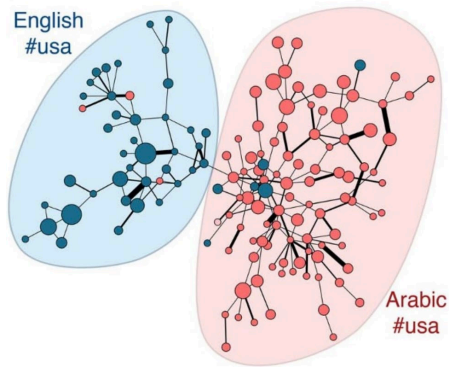
[Image credit](#)

- ❑ 社区内连接紧密
- ❑ 跨社区的连接不紧密





## 基于模块度的社区发现



拥有两个社区的图

模块度

$$Q = \frac{1}{2 \cdot \text{vol}(\mathcal{G})} \sum_{ij} \left( A_{i,j} - \frac{d(v_i) d(v_j)}{\text{vol}(\mathcal{G})} \right) h_i h_j$$

$$Q = \frac{1}{2 \cdot \text{vol}(\mathcal{G})} h^\top B h$$

$B_{i,j}$

$d(v_i)$  节点的度

$\text{vol}(\mathcal{G})$  所有节点的度的总和

$h_i$  节点所属社区的指示函数，取值0或1

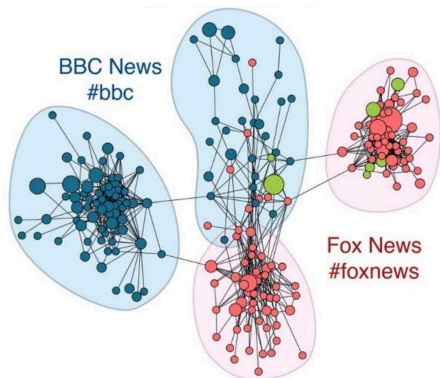
$h_i = 1$  或者  $-1$   
表示节点  $v_i$  属于哪个社区

最大化模块度来进行社区发现



## 拓展到多个社区的情况

在图中有两个社区的情况下



在图中有多于两个社区的情况下

$h_i = 1$  或者  $-1$   
表示节点  $v_i$  属于哪个社区

$h$  包含所有节点社区信息的向量

$H$  表示社区的分配矩阵

$H$  的每一行都是one-hot向量, 表示了相应节点的社区归属

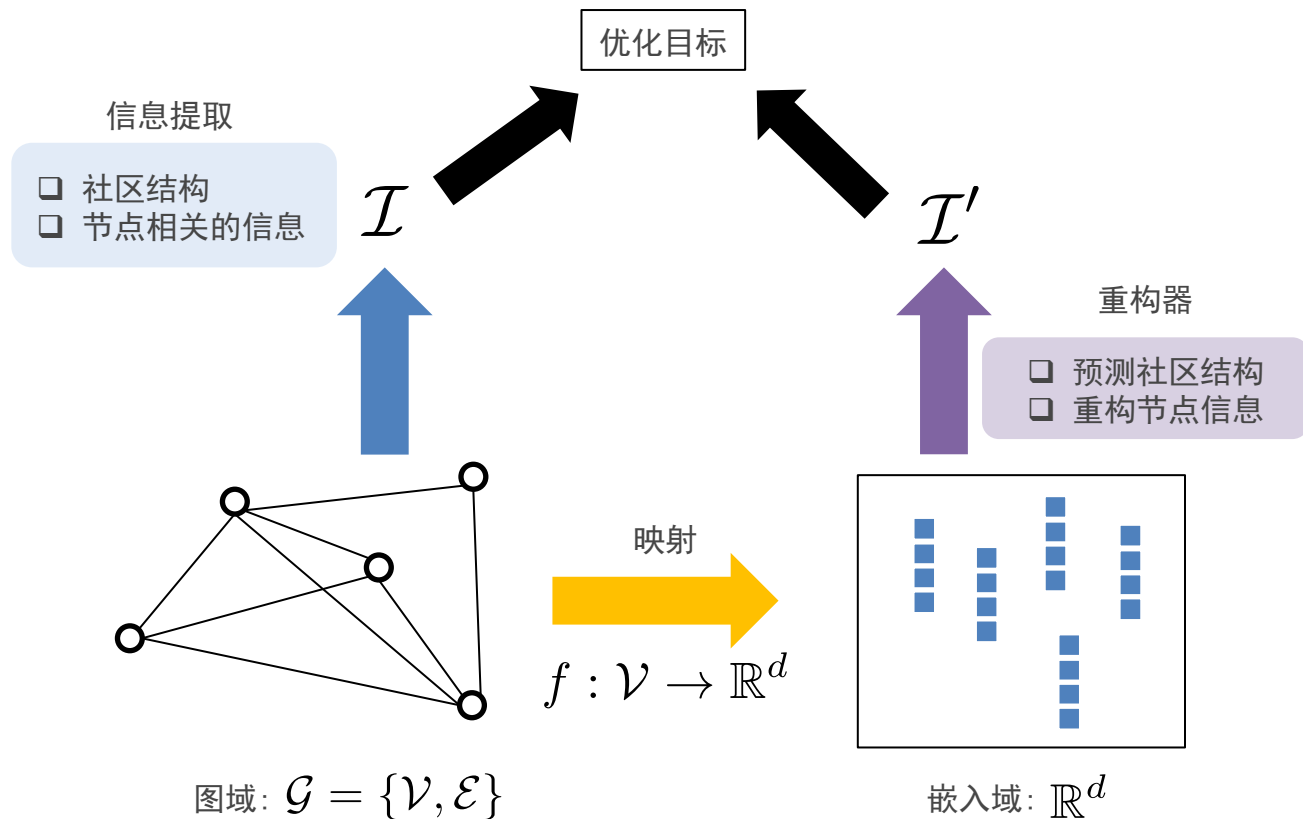
每个节点只属于一个社区



$$\text{s.t. } \text{tr} \left( H^{\top} H \right) = N$$

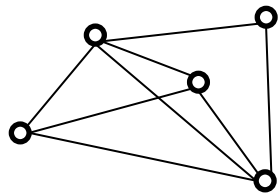


## 保留社区结构的图嵌入

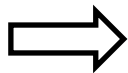




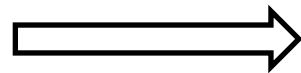
## 提取节点相关的信息



连接矩阵  
(边的信息)



$A$



邻域重合度信息

$S$

$$S_{i,j} = \frac{A_i A_j^\top}{\|A_i\| \|A_j\|}$$

提取的节点信息

$$P = A + \eta \cdot S$$





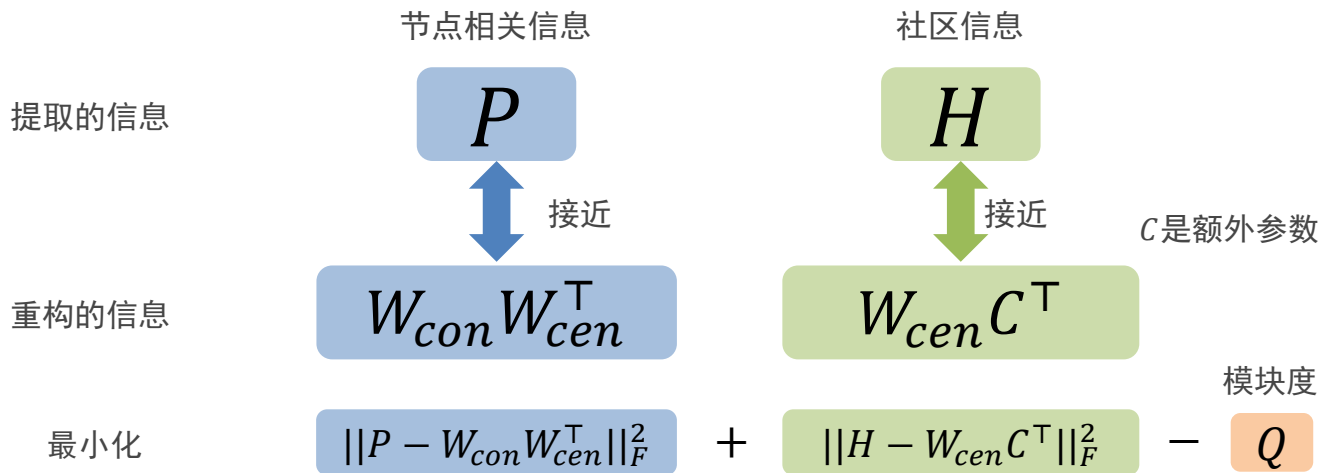
## 重构器和目标函数

两个映射函数（和DeepWalk一样）

$$f_{cen}(v_i) = \mathbf{W}_{cen} \mathbf{e}_i$$

$$f_{con}(v_i) = \mathbf{W}_{con} \mathbf{e}_i$$

节点嵌入





## 目录



图嵌入的通用框架



简单图嵌入



复杂图嵌入







## 目录



### 复杂图嵌入



异质图嵌入



二分图嵌入



多维图嵌入



符号图嵌入



超图嵌入



动态图嵌入





## 目录



### 复杂图嵌入



#### 异质图嵌入



#### 二分图嵌入



#### 多维图嵌入



#### 符号图嵌入



#### 超图嵌入

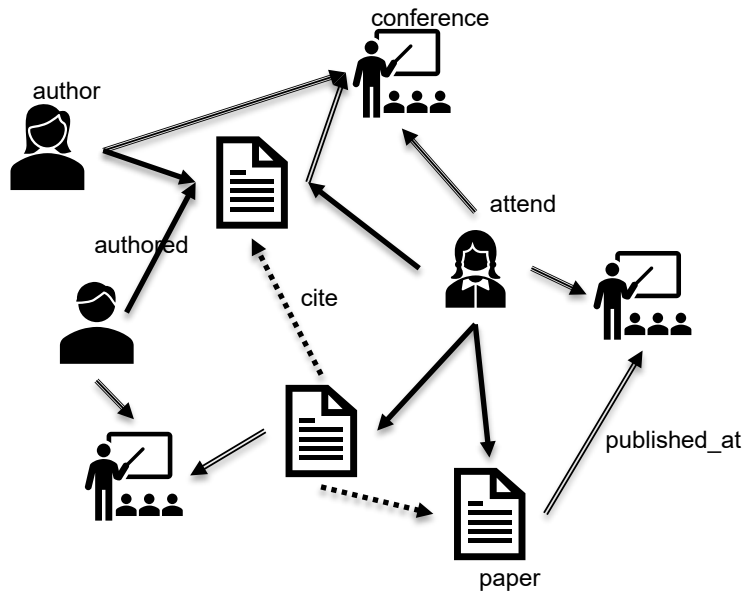


#### 动态图嵌入





## 异质图



$$\mathcal{V}, \mathcal{E}$$

包含不同种类的节点和边

$$\phi_n : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{T}_n$$

$$\phi_e : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{T}_e$$

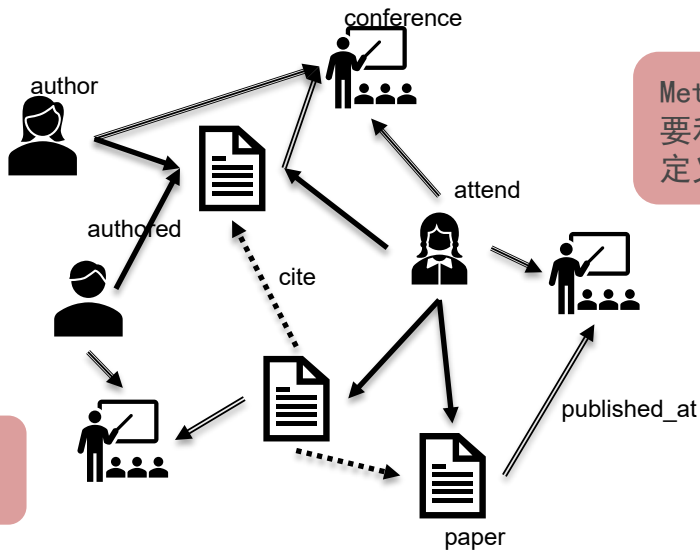
$$\mathcal{T}_n = \{\text{author, paper, conference}\}$$

$$\mathcal{T}_e = \{\text{authored, cite, published\_at}\}$$



## Meta-path模式

不同的meta-path模式捕捉不同的语义信息

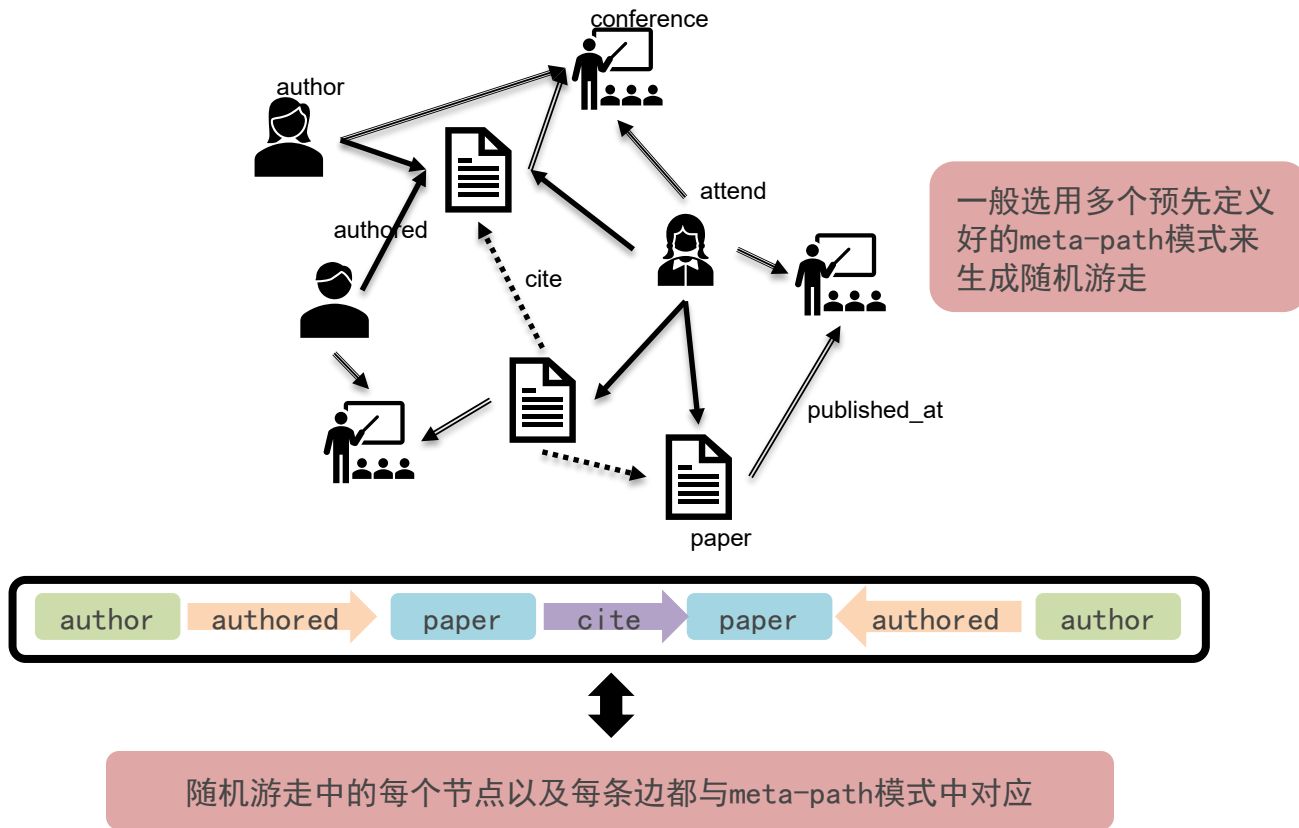


Meta-path模式一般需  
要利用专业知识来预先  
定义好的



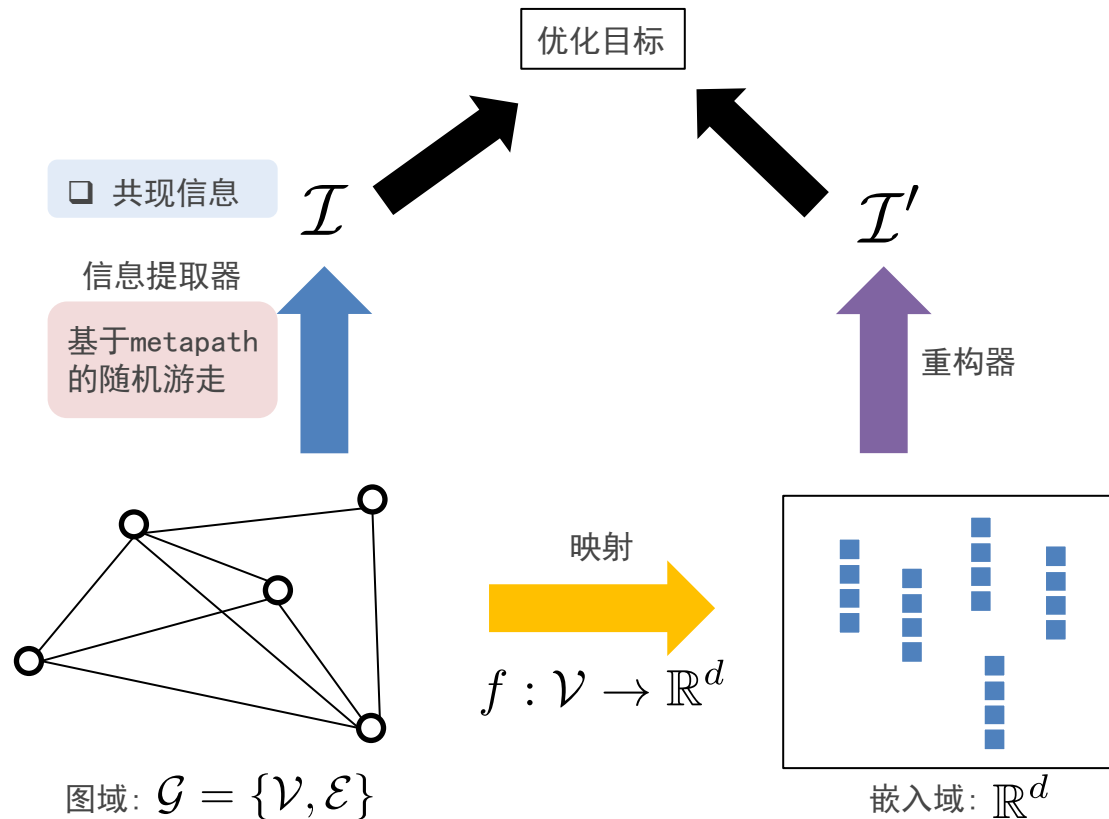


## 基于Meta-path的随机游走





## 异质图嵌入: metapath2vec





## 目录



### 复杂图嵌入



#### 异质图嵌入



#### 二分图嵌入



#### 多维图嵌入



#### 符号图嵌入



#### 超图嵌入

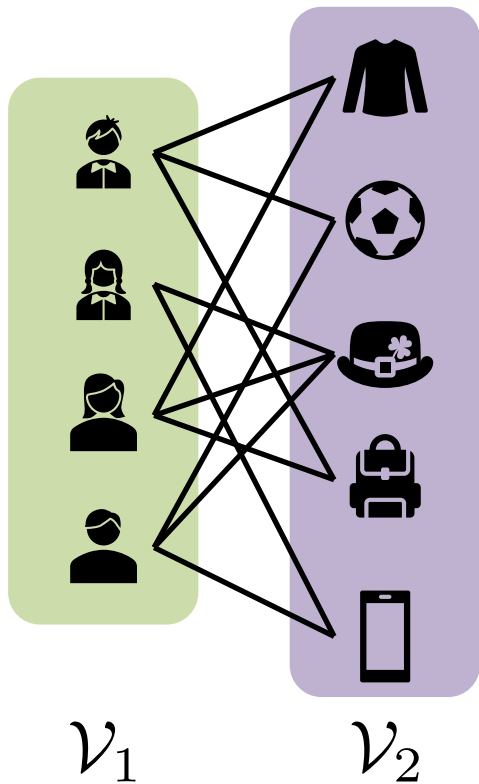


#### 动态图嵌入





## 二分图



$\mathcal{V}, \mathcal{E}$

- $\mathcal{V}$  可以被分为两个不相交的子集
- 每一子集内的任意点之间没有边相连接

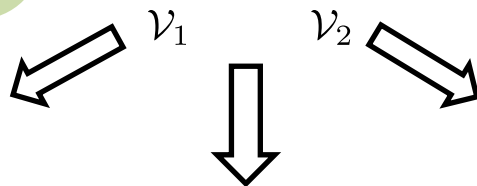
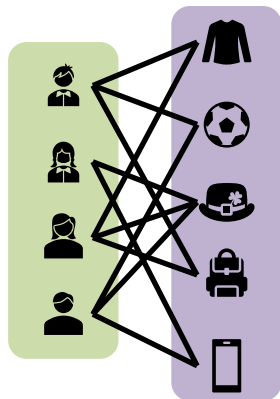






## 信息提取器

- 如果  $v_1$  中的两个节点共享至少一个邻居，则这两个节点在生成子图中相连
- 新边的权重是两条原图中的边的乘积（如果共享多个邻居，则需要在这些邻居上求和）



$v_1$  生成的子图



$v_1$  中节点共现信息



Deepwalk

$v_2$  生成的子图



$v_2$  中节点共现信息



Deepwalk



## 边的信息的重构器和目标函数

$\mathcal{E}$  : 边的信息

$$e = (v^{(1)}, v^{(2)})$$

重构边的信息

利用节点嵌入预测  
边是否存在

尽可能预测正确

$$p(e|v^{(1)}, v^{(2)})$$

$$p(e|v^{(1)}, v^{(2)}) = \sigma \left( f(v^{(1)})^\top f(v^{(2)}) \right)$$

考虑所有边

最大化

$$\prod_{e \in \mathcal{E}} p(e|v^{(1)}, v^{(2)}) = \prod_{e \in \mathcal{E}} \sigma \left( f(v^{(1)})^\top f(v^{(2)}) \right)$$

实际中我们通常最小化它的对数的相反数



## 目录



### 复杂图嵌入



#### 异质图嵌入



#### 二分图嵌入



#### 多维图嵌入



#### 符号图嵌入

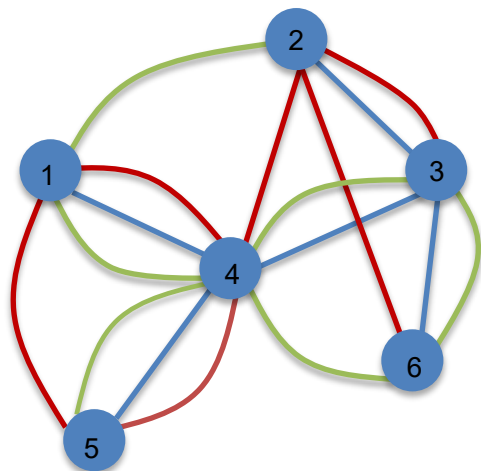


#### 超图嵌入



#### 动态图嵌入

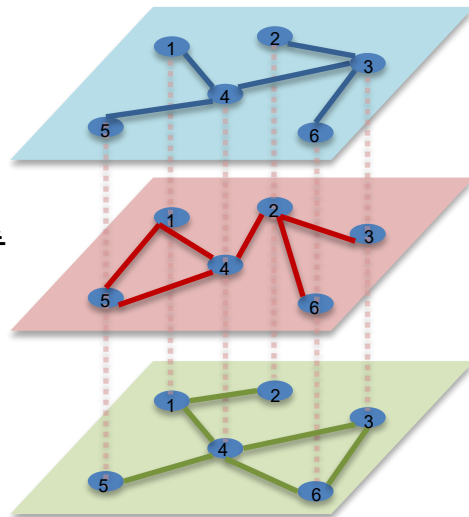




— 订阅

— 观看

— 评论

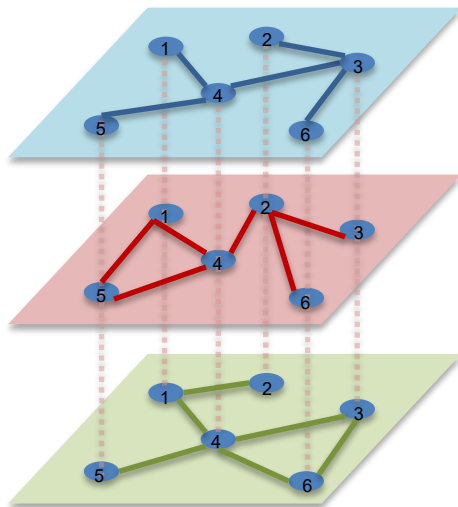


同一对节点之间可以同时存在多种不同的关系





# 映射函数



通用映射

$$f(v_i)$$

维度特定映射

$$f_{blue}(v_i)$$

$$f_{red}(v_i)$$

$$f_{green}(v_i)$$

节点在某一  
维度的特定  
表示

捕捉各个维度  
共享的信息

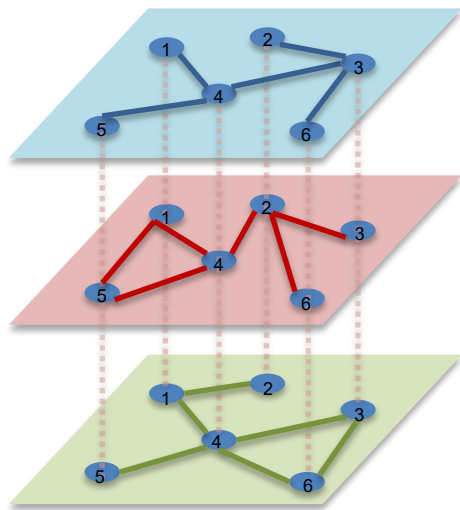
捕捉各个维度  
特有的信息

$$\mathbf{u}_i^{blue} = f(v_i) + f_{blue}(v_i)$$





## 信息提取器



维度内随机游走



每个维度的共现信息

$\mathcal{I}_{blue}$

$\mathcal{I}_{red}$

$\mathcal{I}_{green}$



## 重构器和目标函数

每个维度的共现信息

利用节点在维度内的特定表示来重建每个维度的共现信息

$\mathcal{I}_{blue}$



$\{\mathbf{u}_i^{blue}\}_{i \in \mathcal{V}}$

$\mathcal{I}_{red}$



$\{\mathbf{u}_i^{red}\}_{i \in \mathcal{V}}$

$\mathcal{I}_{green}$



$\{\mathbf{u}_i^{green}\}_{i \in \mathcal{V}}$

每一维度内的重建过程以及目标函数与deepwalk一致



## 目录



### 复杂图嵌入



异质图嵌入



二分图嵌入



多维图嵌入



符号图嵌入



超图嵌入



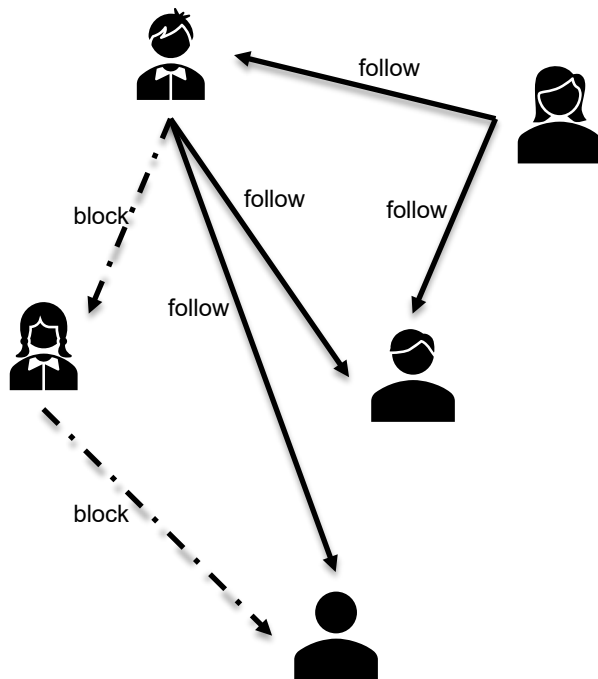
动态图嵌入







## 符号图

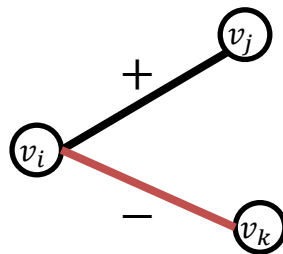
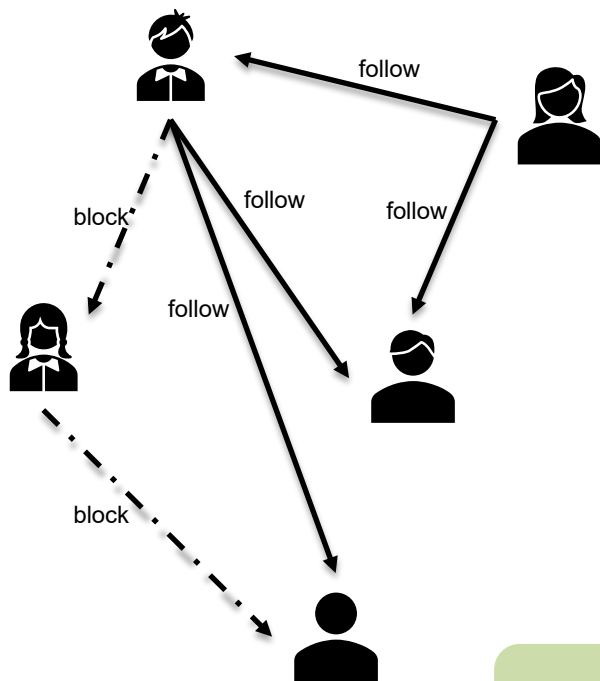


$\mathcal{V}, \mathcal{E}$

- $\mathcal{E}$ 可以被分为两个不相交的子集
- 这两个子集分别包含正边和负边



## 信息提取器



$\mathcal{I}$ : 所有这种形式的三元组

$$\mathcal{I} = \{(v_i, v_j, v_k) \mid A_{i,j} = 1, A_{i,k} = -1\}$$

$v_i$  和  $v_j$  的相似度高于  
 $v_i$  和  $v_k$  的相似度

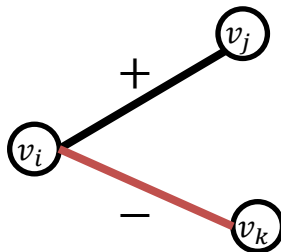




## 重构器与目标函数

$$\mathcal{I} = \{(v_i, v_j, v_k) \mid A_{i,j} = 1, A_{i,k} = -1\}$$

$v_i$ 和 $v_j$ 的相似度高于 $v_i$ 和 $v_k$ 的相似度



尽量好地重建

重建的相似度关系

$$s(f(v_i), f(v_j)) - (s(f(v_i), f(v_k)) + \delta)$$

尽量使得它大于0



## 目录



### 复杂图嵌入



异质图嵌入



二分图嵌入



多维图嵌入



符号图嵌入

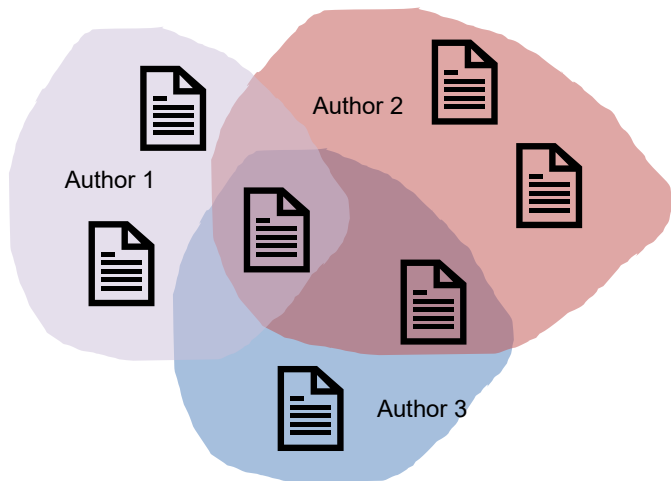


超图嵌入



动态图嵌入



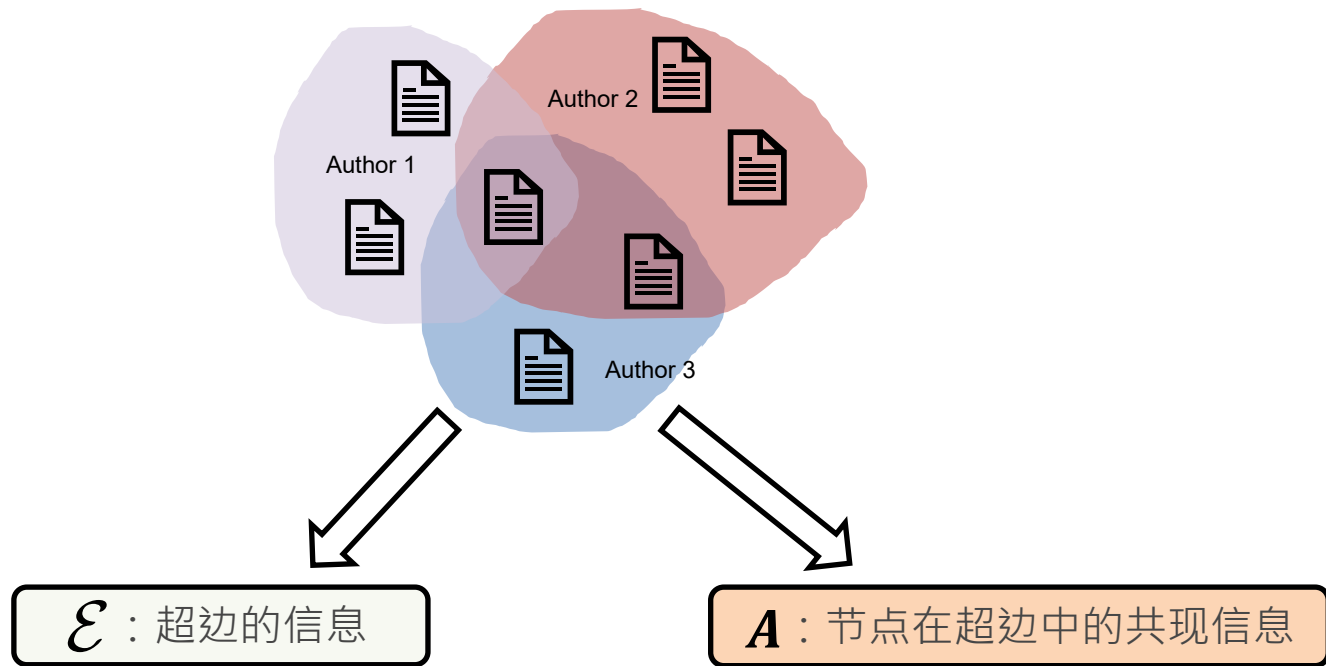


$$\mathcal{V}, \mathcal{E}$$

- $\mathcal{E}$ 为超边的集合
- 超边可以描述超越两两之间的关系的更高维度的关系



## 信息提取器



$A_{i,j}$ : 节点  $v_i$  和  $v_j$  在所有超边中共现的次数

$A_i$ :  $A$  的第  $i$  行, 表示节点  $v_i$  和其他所有节点的共现情况





## 重构器与目标函数：超边中的共现信息

映射函数

$$f(v_i) = MLP(A_i)$$

**$A$**  : 节点在超边中的共现信息

尽可能接近

利用节点嵌入重  
构共现信息

$A_i$ :  $A$ 的第 $i$ 行, 表示节点 $v_i$ 和其他所有节点的共现情况

$$\hat{A}_i = MLP(f(v_i))$$

最小化 
$$\sum_{v_i \in \mathcal{V}} \|A_i - \hat{A}_i\|_2^2$$

可以被考虑为自编码器





## 重构器与目标函数：超边

$\mathcal{E}$  : 超边的信息

$$e = \{v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(3)}\}$$

重构超边的信息

利用节点嵌入预测超边是否存在

尽可能预测正确

$$p(e|\{v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(3)}\})$$

最大化

$$\prod_{e \in \mathcal{E}} p(e|\{v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(3)}\}) = \prod_{e \in \mathcal{E}} \sigma \left( MLP([f(v^{(1)}), f(v^{(2)}), f(v^{(3)})]) \right)$$

实际中我们通常最小化它的对数的相反数





## 目录



### 复杂图嵌入



#### 异质图嵌入



#### 二分图嵌入



#### 多维图嵌入



#### 符号图嵌入



#### 超图嵌入

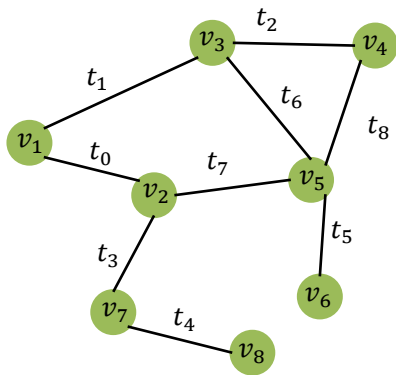


#### 动态图嵌入





## 动态图



$$\mathcal{V}, \mathcal{E}$$

节点和边有对应的时间信息

$$\phi_n : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{T}$$

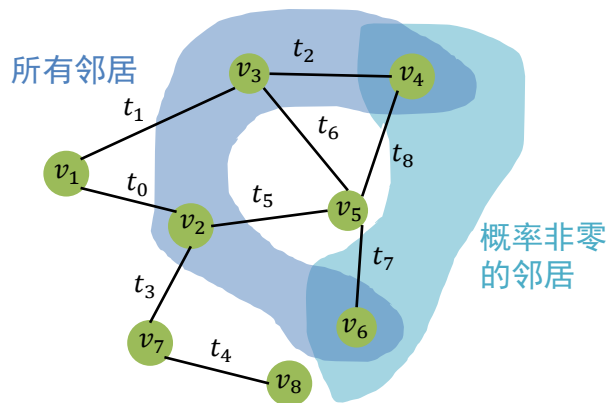
$$\phi_e : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{T}$$

$\mathcal{T}$ 表示时间的集合





## 时序随机游走



- ❑ 只能按时间顺序进行随机游走
- ❑ 下一条边的发生时间要在上一条边的发生时间之后

候选的下一节点 当前节点

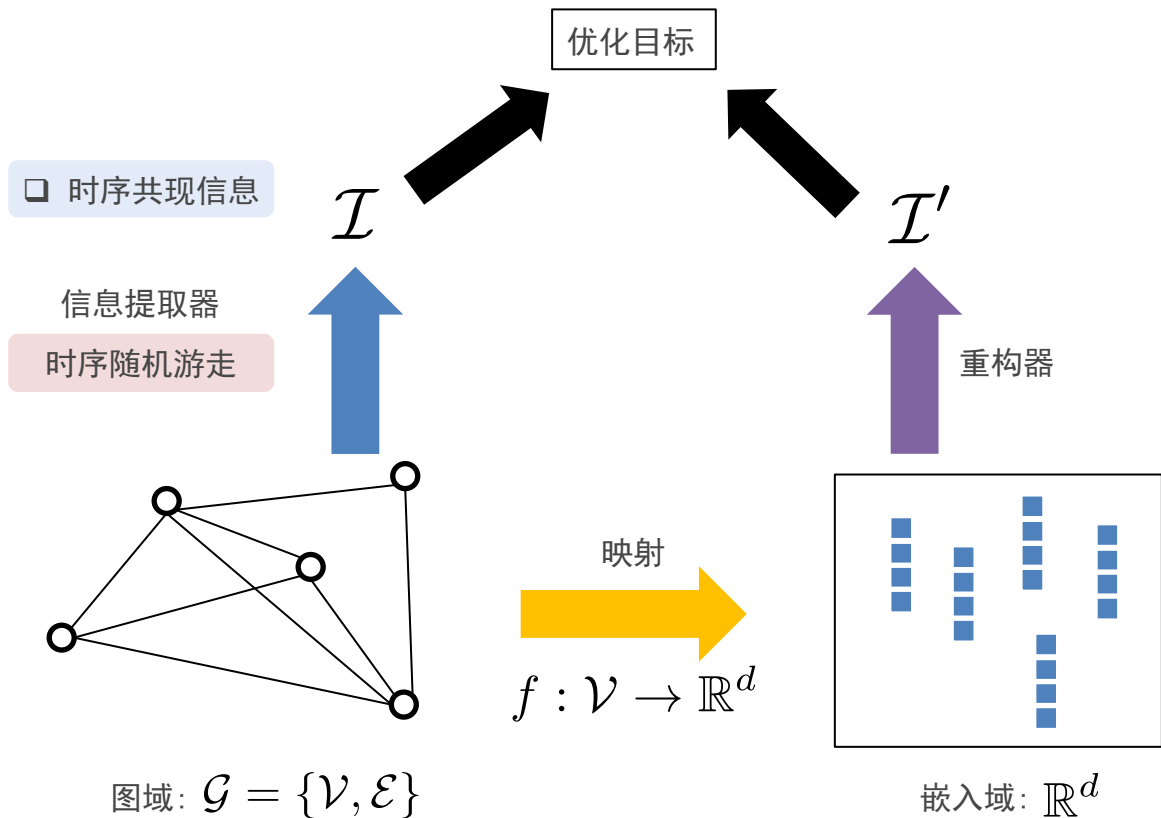
上一节点

$$p\left(v^{(k+1)} \mid v^{(k)}\right) = \begin{cases} \text{pre}\left(v^{(k+1)}\right), & \text{如果边 } \left(v^{(k)}, v^{(k+1)}\right) \text{ 发生在 } \left(v^{(k-1)}, v^{(k)}\right) \text{ 之后} \\ 0, & \text{如果边 } \left(v^{(k)}, v^{(k+1)}\right) \text{ 发生在 } \left(v^{(k-1)}, v^{(k)}\right) \text{ 之前} \end{cases}$$

会以较高的概率选择离当前时间具有较小间隔的节点



# 动态图嵌入





## 目录



图嵌入的通用框架



简单图嵌入



复杂图嵌入



感谢聆听！  
Thanks for Listening

