DATA SCIENCE SUMMIT

Wspomaganie procesu klasyfikacji zmiennymi grafowymi

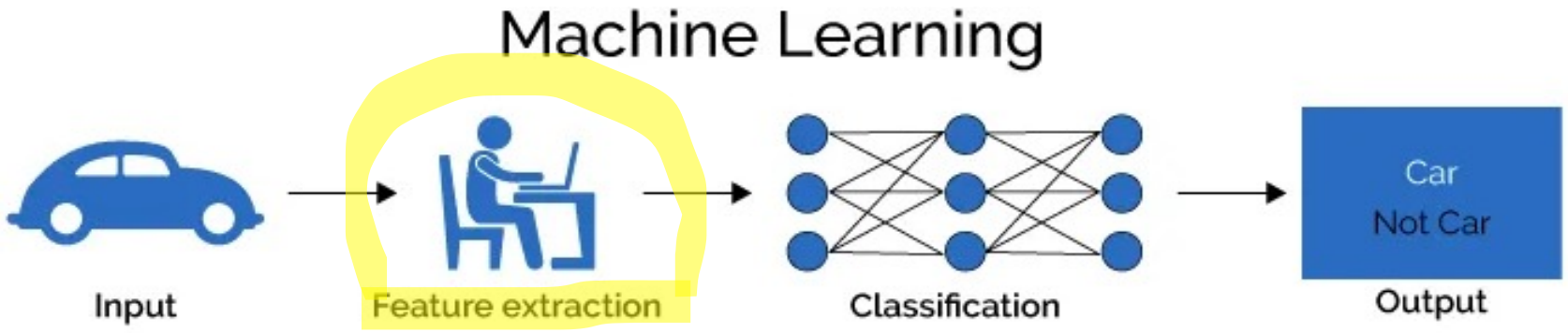
Sebastian Zając

Assistant Professor SGH
Expert in Credit Risk Information Department, PKO BP

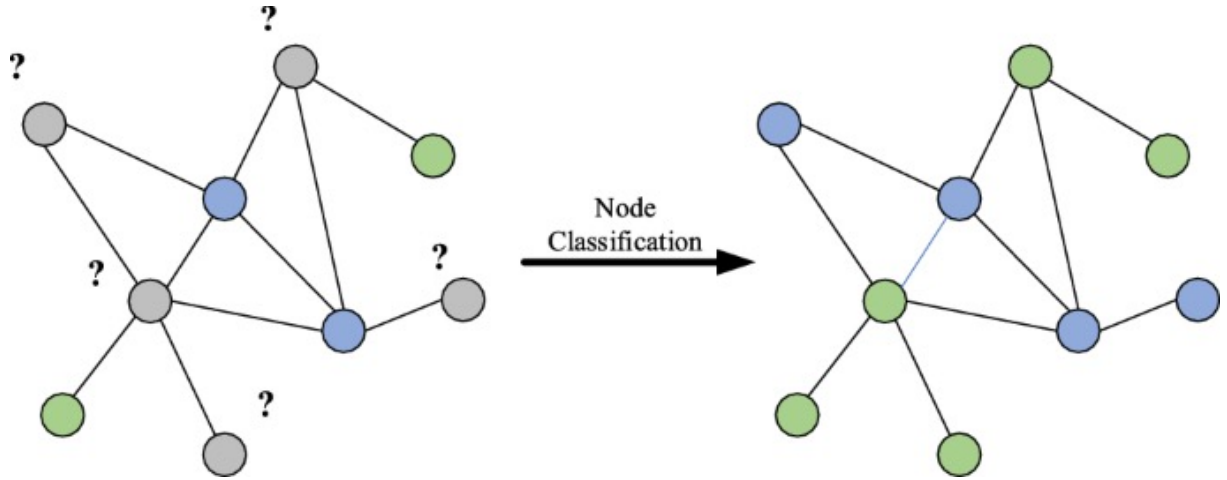
www.dssconf.pl 23-24.11.2023 PGE Narodowy + Online

ORGANIZATORZY: ACADEMIC PARTNERS Data Science Warsaw Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych POLITECHNIKA WARSZAWSKA

Motywacja



Klasyfikacja wierzchołków jest jednym z podstawowych problemów dla danych grafowych. np. klasyfikacja użytkowników online.

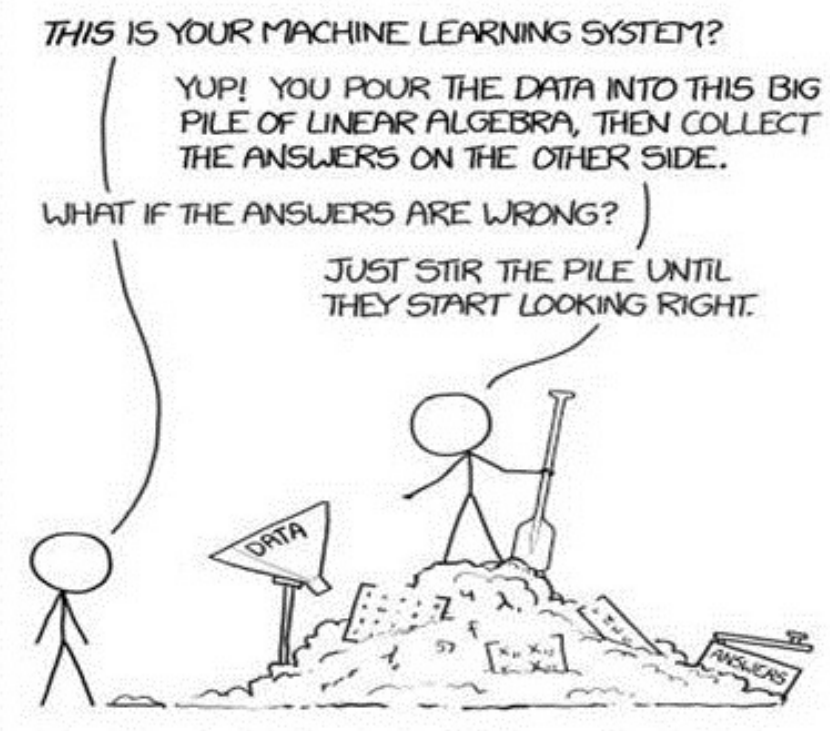


Praktyczne zastosowania:

1. Systemy rekomendacyjne
2. Analiza sieci społecznościowych
3. Chemia stosowana
4. inne

Wyniki otrzymane przy współpracy: **Bogumił Kamiński, Paweł Prałat**, oraz **Francois Theberge's** arXiv:2311.04730

Motywacja



Nie ważne jak skomplikowany klasyfikator wymyślisz i zbudujesz. Będzie on działał dobrze tylko wtedy, gdy dane, które do niego dostarczysz, będą „informowały” o realizowanym procesie. Prowadzi to do wymagania posiadania odpowiednich zmiennych, które potrafią reprezentować różne klasy modelu.

Community structure

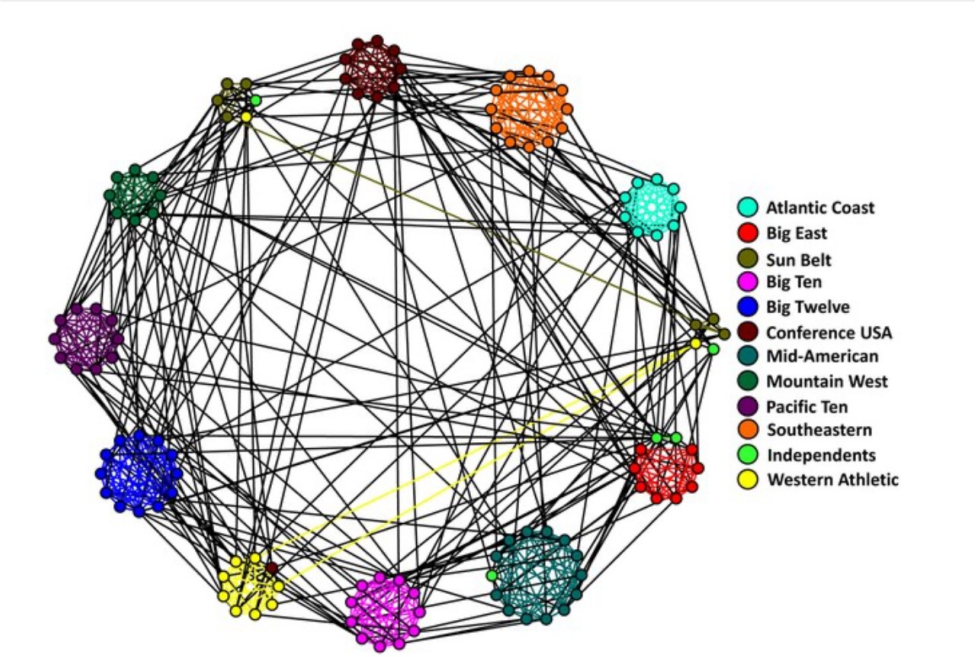
Wprowadzamy zbiór zmiennych, które zależą od **wewnętrznej struktury podziału grafu** na tzw. communities.

Zmienne tego typu będziemy nazywali ***community-aware features***.

W przypadku rzeczywistych sieci podział na podsieci pozwala odkryć **wewnętrzną organizację wierzchołków**.

Identyfikacja podgrup w sieci może zostać zrealizowana jako **proces nienadzorowany** i jest często pierwszym krokiem przy eksploracyjnej analizie danych grafowych.

Przez ***„community”*** rozumiemy grupę wierzchołków, które są gęsto połączone wewnątrz grupy, ale mogą również zawierać rzadkie połączenia z innymi grupami.



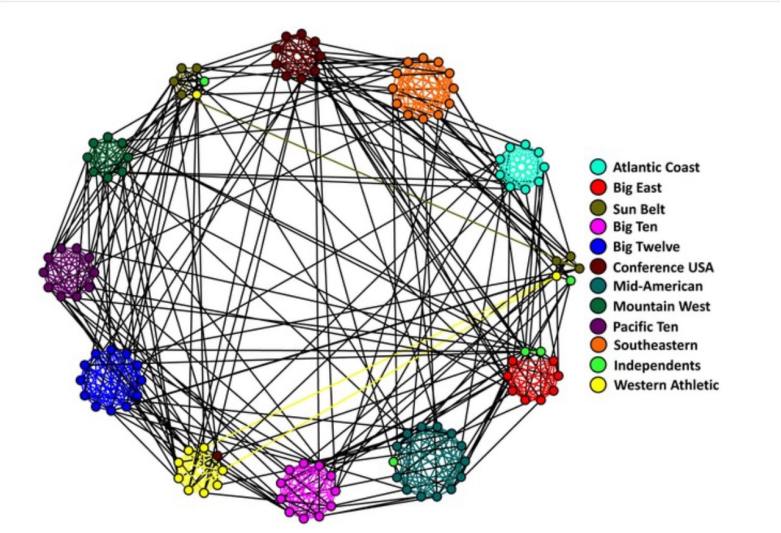
Cel:

1. Sprawdzić czy takie zmienne mogą nieść informację w zadaniach klasyfikacji.
2. Czy nowe zmienne nie są zależne od tradycyjnych zmiennych wynikających z innych własności grafów.

Community structure

Cel:

1. Sprawdzić czy takie zmienne mogą nieść informację w zadaniach klasyfikacji.
2. Czy nowe zmienne nie są zależne od tradycyjnych zmiennych wynikających z innych własności grafów.

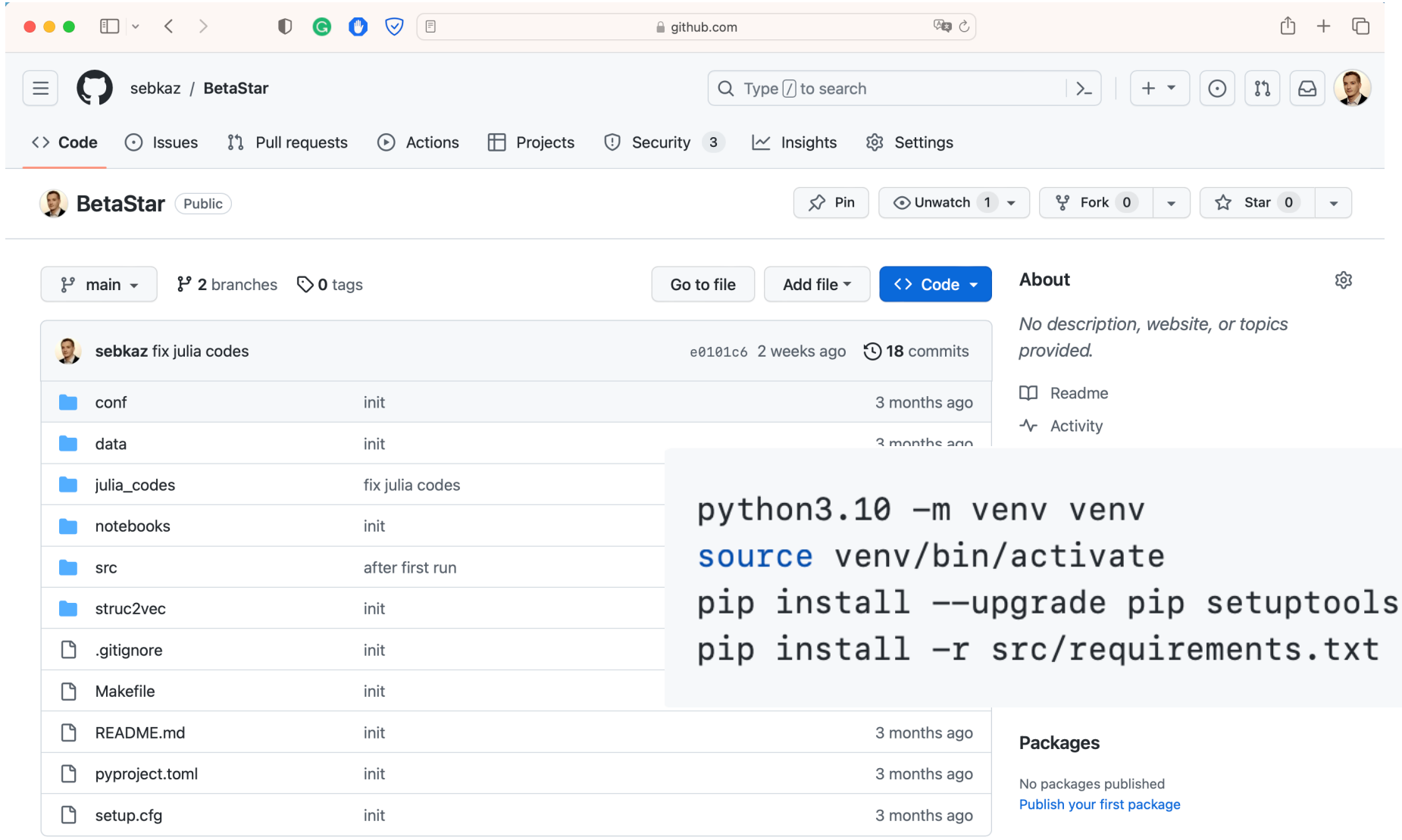


Biznesowo:
Czy dany wierzchołek jest **„silnym”** członkiem swojego community ?
A może jest **„słabym”** członkiem wielu podgrup ?

Aby policzyć wartości nowych zmiennych, musimy najpierw **zidentyfikować strukturę ,,communities'' w grafie**.

Zadanie to jest realizowane poprzez **skomplikowaną, nieliniową transformację grafu**, która najczęściej nie jest szybko i w prosty sposób odkrywana przez modele ML czy DL.

Github repo: https://github.com/sebkaz/BetaStar

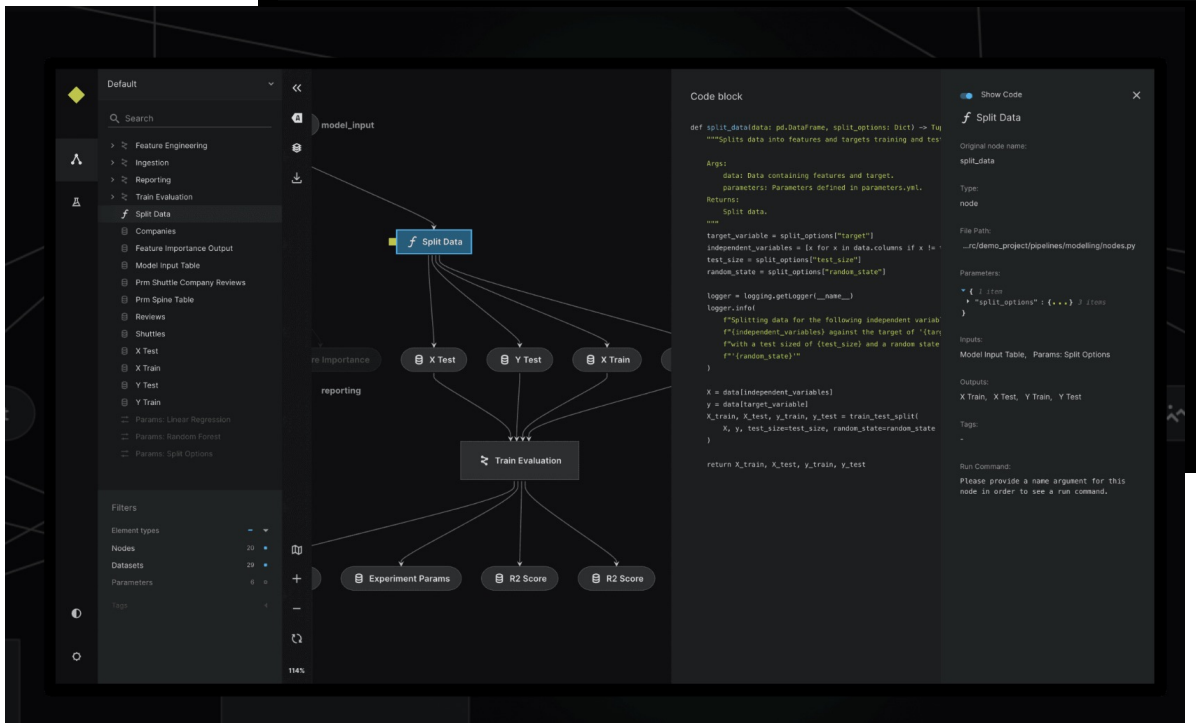



```
python3.10 -m venv venv
source venv/bin/activate
pip install --upgrade pip setuptools
pip install -r src/requirements.txt
```

Kedro Python

```
project-template     # Project folder
├── conf             # Configuration files
├── data             # Local project data
├── docs             # Documentation
├── logs             # Logs of pipeline runs
├── notebooks        # Exploratory Jupyter notebooks
├── pyproject.toml   # Project metadata and linter configuration
├── README.md        # README.md explaining your project
└── src              # Source code for pipelines
```

Standard kodowania – **Black, flake8, isort**
Dokumentacja - **Sphinx**
Testy – **pytest**



— 01

Data Catalog

A series of lightweight data connectors used to save and load data across many different file formats and file systems. The Data Catalog supports S3, GCP, Azure, sFTP, DBFS, and local filesystems. Supported file formats include Pandas, Spark, Dask, NetworkX, Pickle, Plotly, Matplotlib, and many more. The Data Catalog also includes data and model snapshots for file-based systems.

Explore the data catalog

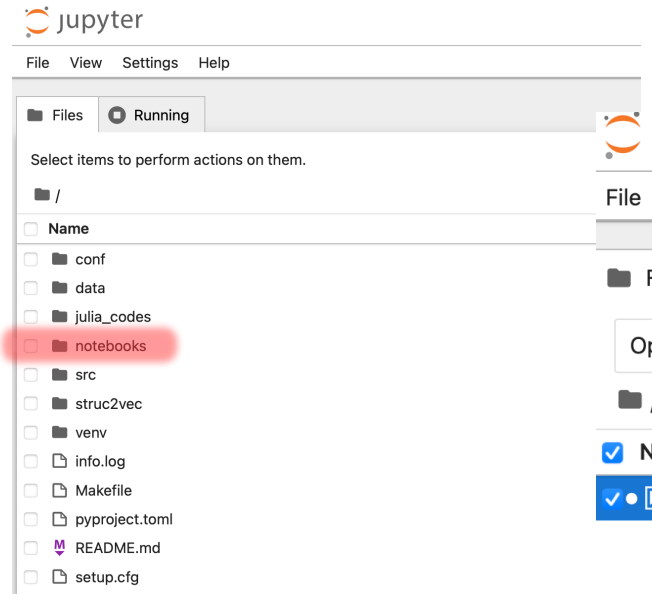
```yaml
# Load a Spark DataFrame on S3

flight_patterns:
  type: spark.SparkDataset
  filepath: s3a://your_bucket/data/01_raw/flight_patterns*
  credentials: dev_s3
  file_format: csv
```

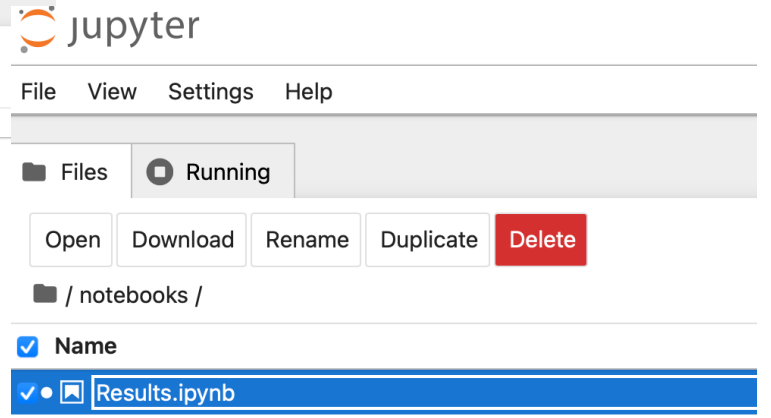
```yaml
# Save an image created with Matplotlib on Google Cloud Storage

results_plot:
  type: matplotlib.MatplotlibWriter
  filepath: gcs://your_bucket/data/08_results/plots/output_1.jpeg
  fs_args:
  project: my-project
  credentials: my_gcp_credentials
```

obsługa **Jupyter notebooks**
Integracja z **Docker, Airflow** i **MLflow**

Praca z Jupyter notebook

```
kedro jupyter notebook --env=x3_o1000 --port 8999

❯ cd Documents/GitHub/BetaStar
❯ ls
Makefile       data           pyproject.toml struc2vec
README.md      julia_codes    setup.cfg      venv
conf           notebooks      src
❯ source venv/bin/activate
❯ kedro info

 _            _
| | _____  __| |_ __ ___
| |/ / _ \/ _` | '__/ _ \
|   <  __/ (_| | | | (_) |
|_|\_\___|\__,_|_|  \___/
v0.18.11

Kedro is a Python framework for
creating reproducible, maintainable
and modular data science code.

No plugins installed
❯ kedro jupyter notebook --env=x3_o1000 --port 8999
/Users/air/Documents/GitHub/BetaStar/venv/bin/python3.10 -m jupyter notebook -
```





Kedro project

- you have access to `catalog`, `context` and `session` objects

```
[1]: session, catalog, context
```

```
[1]:
(
    <kedro.framework.session.session.KedroSession object at 0x107d00f10>,
    <kedro.io.data_catalog.DataCatalog object at 0x15ee83eb0>,
    <kedro.framework.context.context.KedroContext object at 0x10c402a40>
)
```

```
[1]: catalog.list()
```

```
[
    'graph',
    'data',
    'graph_pre',
    'graph_struct',
    'embedded_graph_node2vec',
    'embedded_graph_struc2vec',
    'model_data',
    'X_train_linear',
    'X_test_linear',
    'task1_predictions',
```

Szybka analiza i eksploracja danych

VOD:
Prognozowanie szeregów czasowych z użyciem algorytmu Prophet w GCP.
Marcin Szymelfenig

Kedro Data Catalog = Data in our project

Rozważamy tylko **nieskierowane i proste grafy**. Dla każdego grafu posiadamy etykiety „ground-truth”.

Synthetic
Artificial Benchmark for Community Detection+o Graphs

Empirical Graphs

Sztucznie wygenerowane sieci dla:

N = 10,000 nodes wraz z 1,000 of outliers.

The node’s degree distr with a power-law with exponent $\gamma = 2.5$ and degrees between 5 and 500.

The community’s distr with a power-law with exponent $\beta = 1.5$ and size range from 50 to 2,000.

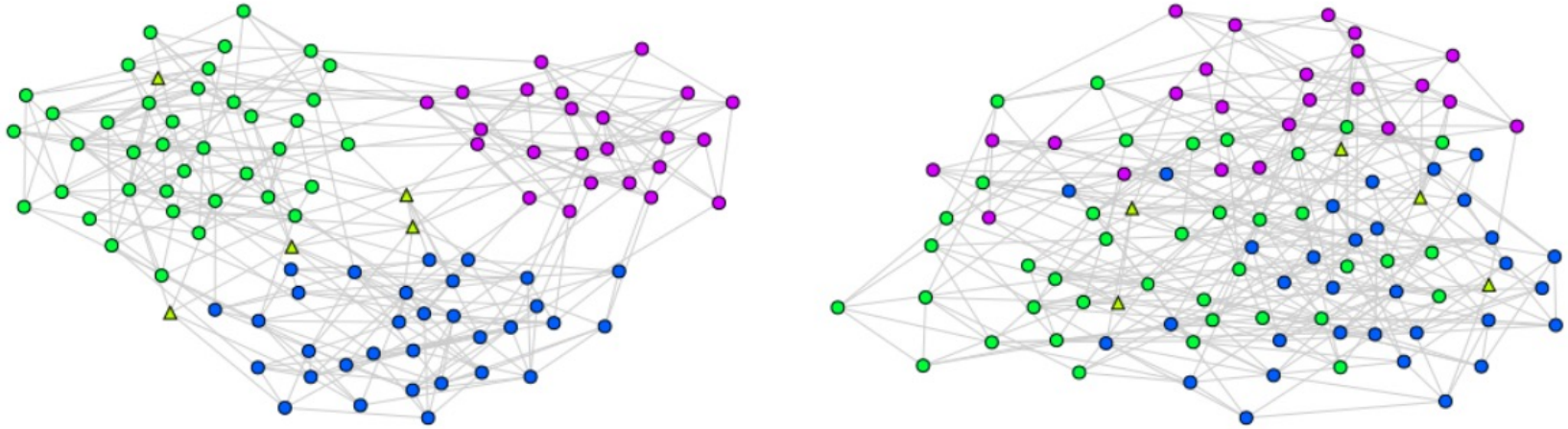
Dataset	# nodes	Avg deg	# clusters	Target class prop
Reddit	10,980	14.3	12	3.66%
Grid	13,478	2.51	78	0.86%
LastFM	7,624	7.29	28	20.62%
Facebook	22,470	15.20	58	25.67%
Amazon	9,314	37.49	39	8.60%

Podział grafu - 1,000 niezależnych uruchomień Leiden algo.

4 networks z różnym poziomem szumu: $\xi \in \{ 0.3, 0.4, 0.5, 0.6 \}$

Kedro Data Catalog = Data in our project

The Artificial Benchmark for the Community Detection graph is a random model with community structure and power-law distribution for degrees and community sizes. It has been recently augmented to allow for the generation of outlier nodes (ABCD+o).



ABCD+o graphs with ($\xi = 0.2$, left) and ($\xi = 0.4$, right)

See also: ABCD graph generator in Julia programming language - `https://github.com/bkamins/ABCDGraphGenerator.jl`

B. Kamiński, P. Prałat, F. Théberge: „*Mining Complex Networks*", CRC Press (2022) or *Outliers in the ABCD Random Graph Model with Community Structure (ABCD+o)*.

Data preprocessing

Każdy graf = niezależne **środowisko projektu Kedro**.

/ julia_codes /

Name

- com_x3_o1000.dat
- com_x4_o1000.dat
- com_x5_o1000.dat
- com_x6_o1000.dat
- com_x7_o1000.dat
- compute_stats.jl
- edge_amazon.dat
- edge_x3_o1000.dat
- edge_x4_o1000.dat

Struktura grafów: data/01_raw/edges

Wszystkie **zmienne + target**: data/01_raw/data

Python Codes

1. Python/Julia graph - counter list
2. *Node2Vec*, *Struc2Vec* embeddings

Julia Codes

1. The Classical Node features
2. The Community-aware node features

/ ··· / 01_raw / data /

Name

- amazon.csv
- facebook.csv
- grid.csv
- lastfm.csv
- reddit.csv
- x3.csv
- x4.csv
- x5.csv
- x6.csv

jupyter catalog.yml Last Checkpoint: 22 days

File Edit View Settings Help

```yaml
# nodes and edges
graph:
  type: pandas.CSVDataSet
  filepath: data/01_raw/edges/edge_x3.dat
  load_args:
    engine: python
    sep: '\t'
    names: [in, out]

# community and non community features
data:
  type: pandas.CSVDataSet
  filepath: data/01_raw/data/x3.csv
```

/ ··· / 01_raw / edges /

Name

- edge_amazon.dat
- edge_facebook.dat
- edge_grid.dat
- edge_lastfm.dat
- edge_reddit.dat
- edge_x3.dat
- edge_x4.dat
- edge_x5.dat
- edge_x6.dat

Python Codes
1. Python/Julia graph - counter list
2. ***Node2Vec*, *Struc2Vec* embeddings**

Julia Codes
1. The Classical Node features
2. The Community-aware node features

Data preprocessing - Embeddings

Node2vec

Add languages

Article Talk | Read Edit View history Tools

From Wikipedia, the free encyclopedia

node2vec is an algorithm to generate vector representations of nodes on a graph. The *node2vec* framework learns low-dimensional representations for nodes in a graph through the use of random walks through a graph starting at a target node. It is useful for a variety of machine learning applications. Besides reducing the engineering effort, representations learned by the algorithm lead to greater predictive power.[1] *node2vec* follows the intuition that random walks through a graph can be treated like sentences in a corpus. Each node in a graph is treated like an individual word, and a random walk is treated as a sentence. By feeding these "sentences" into a skip-gram, or by using the continuous bag of words model paths found by random walks can be treated as sentences, and traditional data-mining techniques for documents can be used. The algorithm generalizes prior work which is based on rigid notions of network neighborhoods, and argues that the added flexibility in exploring neighborhoods is the key to learning richer representations of nodes in graphs.[2] The algorithm is considered one of the best graph classifiers.[3]

Struc2Vec

Params: dim = 16; num-walks = 10, walk-length = 50, window-size = 5, OPT1, OPT2, OPT3 = true

jupyter parameters.yml

File Edit View Settings Help

```yaml
# parameters for node2vec
node2vec:
  dimensions: 16
  walk_length: 50
  num_walks: 10
  p: 1
  q: 1
  workers: 1
  seed: 123
```

Struc2vec

Add languages

Article Talk | Read Edit View history Tools

From Wikipedia, the free encyclopedia

struc2vec is a framework to generate node vector representations on a graph that preserve the structural identity.[1] In contrast to *node2vec*, that optimizes node embeddings so that nearby nodes in the graph have similar embedding, *struc2vec* captures the **roles** of nodes in a graph, even if structurally similar nodes are far apart in the graph. It learns low-dimensional representations for nodes in a graph, generating random walks through a constructed multi-layer graph starting at each graph node. It is useful for machine learning applications where the downstream application is more related with the structural equivalence of the nodes (e.g., it can be used to detect nodes in networks with similar functions, such as interns in the social network of a corporation). *struc2vec* identifies nodes that play a similar role based solely on the structure of the graph, for example computing the structural identity of individuals in social networks.[2] In particular, *struc2vec* employs a degree-based method to measure the pairwise structural role similarity, which is then adopted to build the multi-layer graph. Moreover, the distance between the latent representation of nodes is strongly correlated to their structural similarity. The framework contains three optimizations: reducing the length of degree sequences considered, reducing the number of pairwise similarity calculations, and reducing the number of layers in the generated graph.

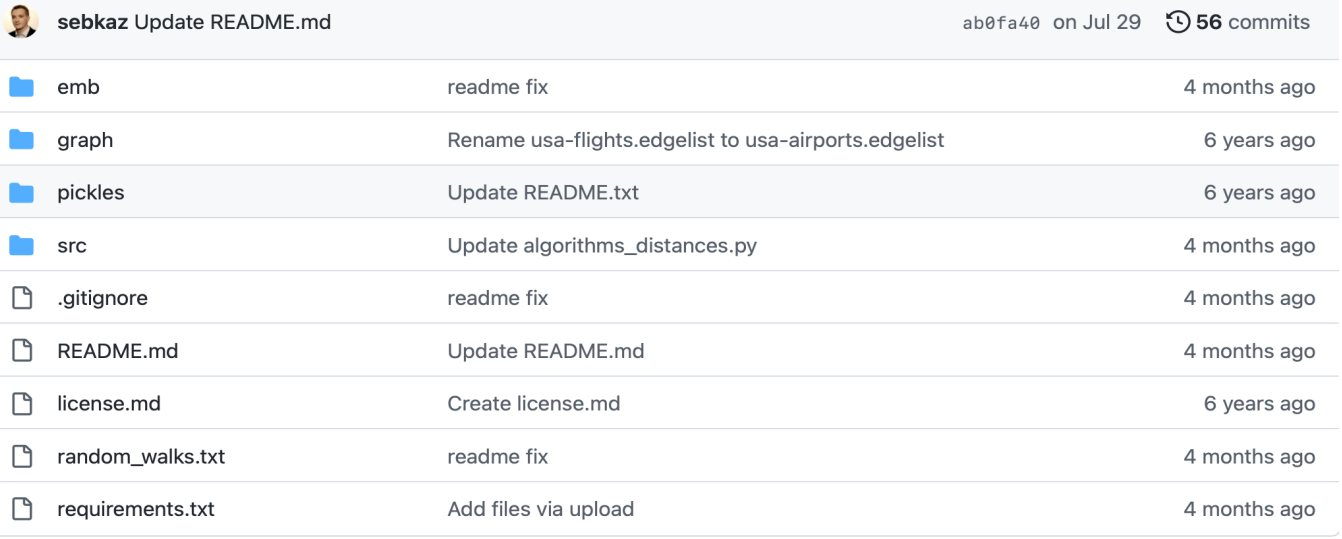
struc2vec follows the intuition that random walks through a graph can be treated as sentences in a corpus. Each node in a graph is treated as an individual word, and short random walk is treated as a sentence. In its final phase, the algorithm employs Gensim's *word2vec* algorithm to learn embeddings based on biased random walks.[3] Sequences of nodes are fed into a skip-gram or continuous bag of words model and traditional machine-learning techniques for classification can be used.[4] It is considered a useful framework to learn node embeddings based on structural equivalence.

Python Codes
1. Python/Julia graph - counter list
2. ***Node2Vec*, *Struc2Vec* embeddings**

Julia Codes
1. The Classical Node features
2. The Community-aware node features

Struc2vec - Embeddings

https://github.com/sebkaz/struc2vec/tree/master



sebkaz Update README.md — `ab0fa40` on Jul 29 — **56** commits

emb	readme fix	4 months ago
graph	Rename usa-flights.edgelist to usa-airports.edgelist	6 years ago
pickles	Update README.txt	6 years ago
src	Update algorithms_distances.py	4 months ago
.gitignore	readme fix	4 months ago
README.md	Update README.md	4 months ago
license.md	Create license.md	6 years ago
random_walks.txt	readme fix	4 months ago
requirements.txt	Add files via upload	4 months ago

README.md

struc2vec

This repository provides a reference implementation of *struc2vec* as described in the paper:

> struc2vec: Learning Node Representations from Structural Identity.
> Leonardo F. R. Ribeiro, Pedro H. P. Saverese, Daniel R. Figueiredo.
> Knowledge Discovery and Data Mining, SigKDD, 2017.

The *struc2vec* algorithm learns continuous representations for nodes in any graph. *struc2vec* captures structural equivalence between nodes.

Before executing *struc2vec*, it is necessary to install the packages from the `requirements.txt` file:

Python Codes
1. Python/Julia graph - counter list
2. *Node2Vec*, *Struc2Vec* embeddings

Julia Codes
1. The Classical Node features
2. The Community-aware node features

The Classical node features

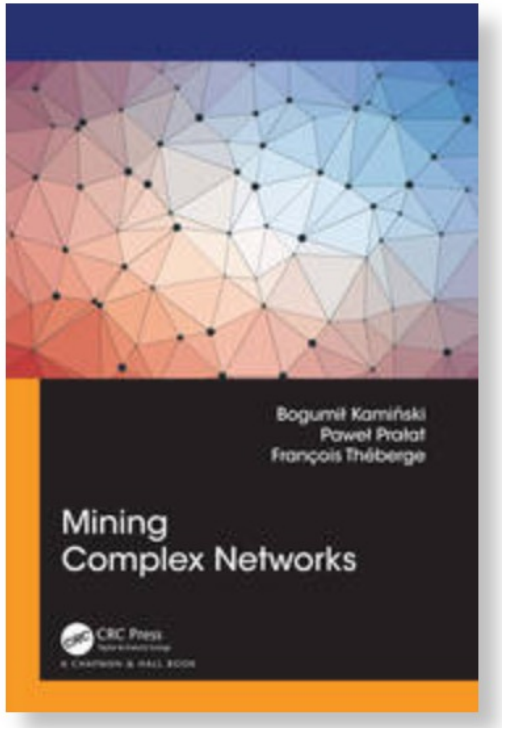


Table 3: Classical (non-community-aware) node features that are used in our experiments.

abbreviation	name	reference
`lcc`	local clustering coefficient	[50]
`bc`	betweenness centrality	[17]
`cc`	closeness centrality	[2]
`dc`	degree centrality	[30]
`ndc`	average degree centrality of neighbours	[1]
`ec`	eigenvector centrality	[6]
`eccen`	node eccentricity	[8]
`core`	node coreness	[30]
`n2v`	16-dimensional `node2vec` embedding	[19]
`s2v`	16-dimensional `struc2vec` embedding	[45]

Odrobina matematyki

DEFINITIONS:

Niech $G = (V, E)$ będzie **grafem**. V – set of nodes, E - set of edges.

Dla **podzbioru** wierzchołków $A \subseteq V$ definiujemy **liczbę krawędzi** indukowaną przez ten podzbiór:

$$e(A) = |\{e \in E : e \subseteq A| \qquad\qquad e(V) = |E|$$

Dla każdego $v \in V$ definiujemy **jego stopień** jako liczbę krawędzi, które zawierają v : $\deg(v) = |e \in E : v \in e\}|$

Suma stopni dla wierzchołków w podzbiorze A : $vol(A) = \sum_{v \in A} \deg(v)$

$A = \{A_1, A_2, \dots, A_l\}$ jest podziałem zbioru V na l podzbiorów.

Liczba sąsiadów wierzchołka v w A_i : $\deg(A_i) = |N(v) \cap A_i|$.

Modularity function

$$q_\lambda(\mathbf{A}) = \sum_{A_i \in \mathbf{A}} \frac{e(A_i)}{|E|} - \lambda \sum_{A_i \in \mathbf{A}} \left(\frac{\mathrm{vol}(A_i)}{\mathrm{vol}(V)} \right)^2 .$$

Edge contribution — Resolution limit — Tax degree

q(A) bliskie 1 - mocna struktura communities

q(A) bliskie 0 - brak struktury wewnętrznej

Community - aware node features - literature

MORE DEFINITIONS:

ANOMALY SCORE (CADA)

$$\mathrm{cd}(v) = \frac{\deg(v)}{d_{\mathbf{A}}(v)}, \qquad \text{where} \qquad d_{\mathbf{A}}(v) = \max\left\{ \deg_{A_i}(v) : A_i \in \mathbf{A} \right\};$$

NORMALIZED ANOMALY SCORE

$$\overline{\mathrm{cd}}(v) = \frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)}.$$

NORMALIZED WITHIN–MODULE DEGREE

$$z(v) = \frac{\deg_{A_i}(v) - \mu(v)}{\sigma(v)},$$

PARTICIPATION COEFFICIENT

$$p(v) = 1 - \sum_{i=1}^{\ell} \left(\frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)} \right)^2.$$

T. J. Helling et all. A community-aware approach for identifying node anomalies in complex networks. (2018)
R. Guimera, Luís A Nunes Amaral „ Functional cartography of complex metabolic networks. nature, 433(7028):895–900, 2005.

New community – aware node features

MORE MORE DEFINITIONS:

Chcemy stworzyć nowe zmienne, które biorą pod uwagę rozkłady i wielkość każdego community. Przypuśćmy, że potrafimy zmienić postać funkcji celu tak, by wykrywać wierzchołki, **które możemy traktować jako outliery**.

Jeśli ilość sąsiadów wierzchołka v wewnątrz community jest niewielka w porównaniu do oczekiwanej wartości tej ilości (na podstawie tzw. null model) wtedy możemy zdefiniować wierzchołek jako **outliera**.

NASZ CEL – zmodyfikowanie modularity function tak by wierzchołki, które są outlierami trafiały do community tylko z jednym wierzchołkiem.

$$q_{\lambda,\beta}(\mathbf{A}) = \sum_{A_i \in \mathbf{A}} \frac{e(A_i) + \delta_{|A_i|=1}\beta \operatorname{vol}(A_i)/2}{|E| + Z/2} - \lambda \left(\sum_{A_i \in \mathbf{A}} \left(\frac{\operatorname{vol}(A_i)(1 + \delta_{|A_i|=1}\beta)}{\operatorname{vol}(V) + Z} \right)^2 \right),$$

New community – aware node features

MORE MORE MORE DEFINITIONS:

Łatwiej jednak zastosować przybliżenie:

$$q_{\lambda,\beta}(\mathbf{A}) \approx \sum_{A_i \in \mathbf{A}} \frac{e(A_i) + \delta_{|A_i|=1}\beta \mathrm{vol}(A_i)/2}{|E|} - \lambda \left(\sum_{A_i \in \mathbf{A}} \left(\frac{\mathrm{vol}(A_i)}{\mathrm{vol}(V)} \right)^2 \right).$$

Pozwala to przeformułować zadanie na znalezienie wartości granicznej:

$\beta^*(v)$ dla której regularyzowana funkcja modularity wzrośnie jeśli przeniesiemy wierzchołek v z community A_i do nowego (jeden node) community.

COMMUNITY ASSOCIATION STRENGTH:

$$\beta^*(v) = 2 \left(\frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)} - \lambda \frac{\mathrm{vol}(A_i) - \deg(v)}{\mathrm{vol}(V)} \right).$$

New community – aware node features

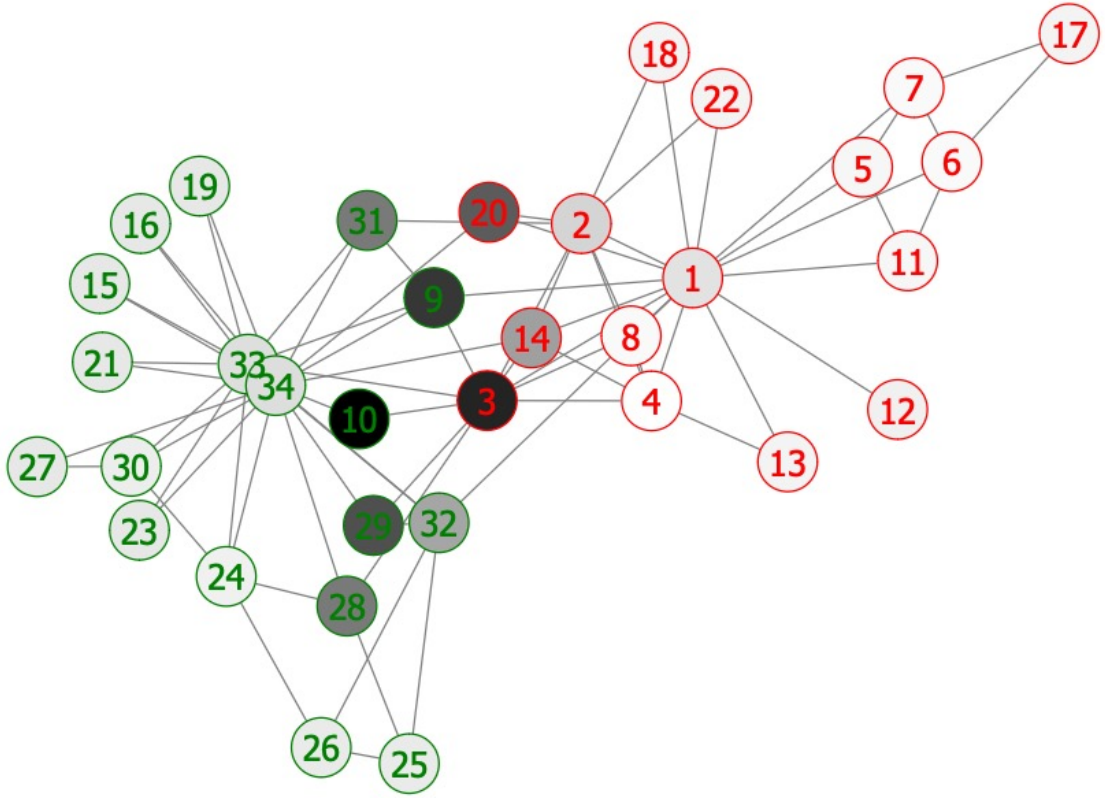


Figure 1: Communities (red and green colours) in the Karate graph. The shades of nodes correspond to their values of $\beta^*(v)$ (darker colours indicate lower values).

MORE New community – aware node features

Inna propozycja wektoryzacji!

$$q_1(v) = \left(\frac{\deg_{A_1}(v)}{\deg(v)}, \frac{\deg_{A_2}(v)}{\deg(v)}, \ldots, \frac{\deg_{A_\ell}(v)}{\deg(v)} \right) \qquad \hat{q}_1(v) = \left(\frac{\mathrm{vol}(A_1)}{\mathrm{vol}(V)}, \frac{\mathrm{vol}(A_2)}{\mathrm{vol}(V)}, \ldots, \frac{\mathrm{vol}(A_\ell)}{\mathrm{vol}(V)} \right) =: \hat{q}_1$$

Jakimi miarami możemy porównać wektory?

- L^1 *norm*: $L_1^1(v) = \sum_{i=1}^{\ell} \left| \frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)} - \frac{\mathrm{vol}(A_i)}{\mathrm{vol}(V)} \right|$
- L^2 *norm*: $L_1^2(v) = \left(\sum_{i=1}^{\ell} \left(\frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)} - \frac{\mathrm{vol}(A_i)}{\mathrm{vol}(V)} \right)^2 \right)^{1/2}$
- *Kullback–Leibler divergence* [11]: $\mathrm{kl}_1(v) = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)} \log \left(\frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)} \cdot \frac{\mathrm{vol}(V)}{\mathrm{vol}(A_i)} \right)$
- *Hellinger distance* [24]: $h_1(v) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sum_{i=1}^{\ell} \left(\left(\frac{\deg_{A_i}(v)}{\deg(v)} \right)^{1/2} - \left(\frac{\mathrm{vol}(A_i)}{\mathrm{vol}(V)} \right)^{1/2} \right)^2 \right)^{1/2}$

The Community-aware node features

Table 2: Community-aware node features used in our experiments. A combination of `WMD` and `CPC` is also used as a 2-dimensional embedding of a graph (`WMD+CPC`).

abbreviation	symbol	name	subsection
`CADA`	$\mathrm{cd}(v)$	anomaly score CADA	3.1
`CADA*`	$\overline{\mathrm{cd}}(v)$	normalized anomaly score	3.1
`WMD`	$z(v)$	normalized within-module degree	3.2
`CPC`	$p(v)$	participation coefficient	3.2
`CAS`	$\beta^*(v)$	community association strength	3.3
`CD_L11`	$L_1^1(v)$	L^1 norm for the 1st neighbourhood	3.4
`CD_L21`	$L_1^2(v)$	L^2 norm for the 1st neighbourhood	3.4
`CD_KL1`	$\mathrm{kl}_1(v)$	Kullback–Leibler divergence for the 1st neighbourhood	3.4
`CD_HD1`	$h_1(v)$	Hellinger distance for the 1st neighbourhood	3.4
`CD_L12`	$L_2^1(v)$	L^1 norm for the 2nd neighbourhood	3.4
`CD_L22`	$L_2^2(v)$	L^2 norm for the 2nd neighbourhood	3.4
`CD_KL2`	$\mathrm{kl}_2(v)$	Kullback–Leibler divergence for the 2nd neighbourhood	3.4
`CD_HD2`	$h_2(v)$	Hellinger distance for the 2nd neighbourhood	3.4

Experiment 1

Cel: Klasyczne zmienne nie wyjaśniają w zaproponowanych zmiennych.

Na podstawie **klasycznych zmiennych:** razem z Node2Vec i Struc2Vec
dla każdego grafu zbudowaliśmy modele przewidujące **ciągłą zmienną celu**.

Modele ML - Regresja:
Regresja liniowa, Ridge, Random forest, XGBoost, Lightgbm

Miary weryfikujące jakość modeli:
Kendall corr, spearmann corr, R^2.

Experiment 1. Results

ABCD+o
max Kendall correlation

target	$\xi = 0.3$	$\xi = 0.4$	$\xi = 0.5$	$\xi = 0.6$
CADA	0.3305	0.2541	0.2292	0.1766
CADA*	0.3613	0.2877	0.2772	0.1713
CPC	0.3540	0.3568	0.3231	0.3106
CAS	0.4205	0.3584	0.3138	0.2167
CD_L21	0.4539	0.4043	0.3823	0.3313
CD_L22	0.6265	0.5589	0.5009	0.4492
CD_L11	0.5935	0.5571	0.5834	0.5648
CD_L12	0.6503	0.5799	0.5464	0.5188
CD_KL1	0.6991	0.6411	0.5918	0.4929
CD_HD1	0.6809	0.6334	0.6170	0.5584
CD_KL2	0.7453	0.6602	0.6090	0.5471
CD_HD2	0.7546	0.7119	0.6815	0.6352
WMD	0.7670	0.7288	0.6915	0.6387

Empirical Graphs
max Kendall correlation

target	Amazon	Facebook	Grid	LastFM	Reddit
CADA	0.5830	0.5666	0.2156	0.4815	0.6826
CADA*	0.6058	0.5828	0.2174	0.5058	0.6867
CPC	0.6338	0.5992	0.2193	0.5175	0.7193
CAS	0.6538	0.6257	0.2999	0.5594	0.7306
CD_L21	0.7052	0.6464	0.3496	0.5698	0.7574
CD_L22	0.7554	0.7355	0.3557	0.6295	0.7941
CD_L11	0.7251	0.7041	0.6978	0.6220	0.7735
CD_L12	0.7794	0.7785	0.6447	0.6884	0.7810
CD_KL1	0.7176	0.7516	0.7394	0.6289	0.7755
CD_HD1	0.7383	0.7482	0.7168	0.6459	0.7853
CD_KL2	0.7706	0.7826	0.7292	0.6853	0.8097
CD_HD2	0.8212	0.8173	0.6930	0.7369	0.8221
WMD	0.8447	0.8456	0.8488	0.8531	0.7638

Eksperyment 2

Cel: Zweryfikowanie użyteczności nowych zmiennych dla zadania klasyfikującego wierzchołki grafów.

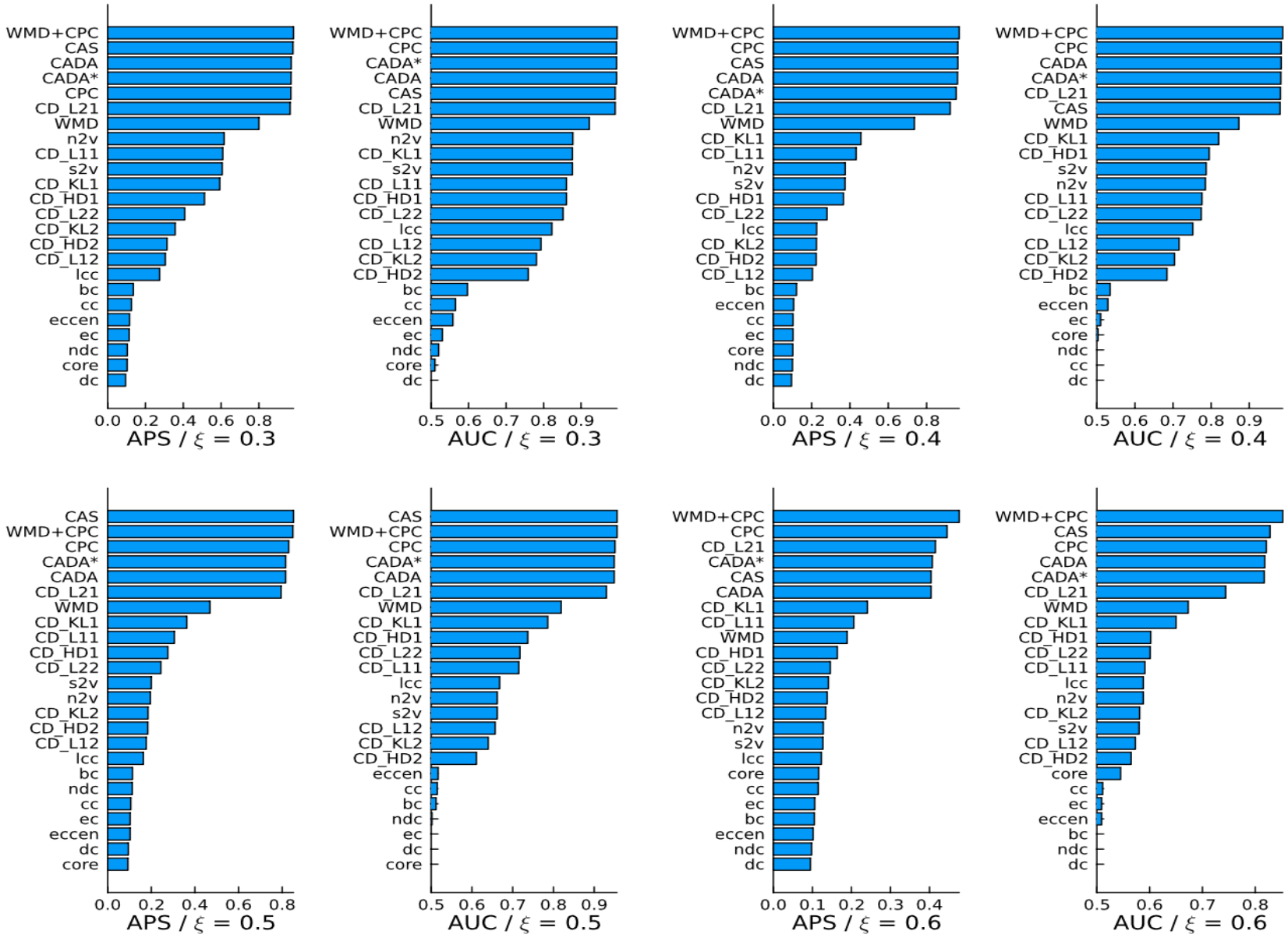
Na podstawie **każdej zmiennej:** klasycznej, nowej oraz grupie zmiennych Node2Vec i Struc2Vec dla każdego grafu zbudowaliśmy modele przewidujące **binarną zmienną celu**.

Modele ML - Klasyfikacja:
Regresja logistyczna, Random forest, XGBoost, Lightgbm

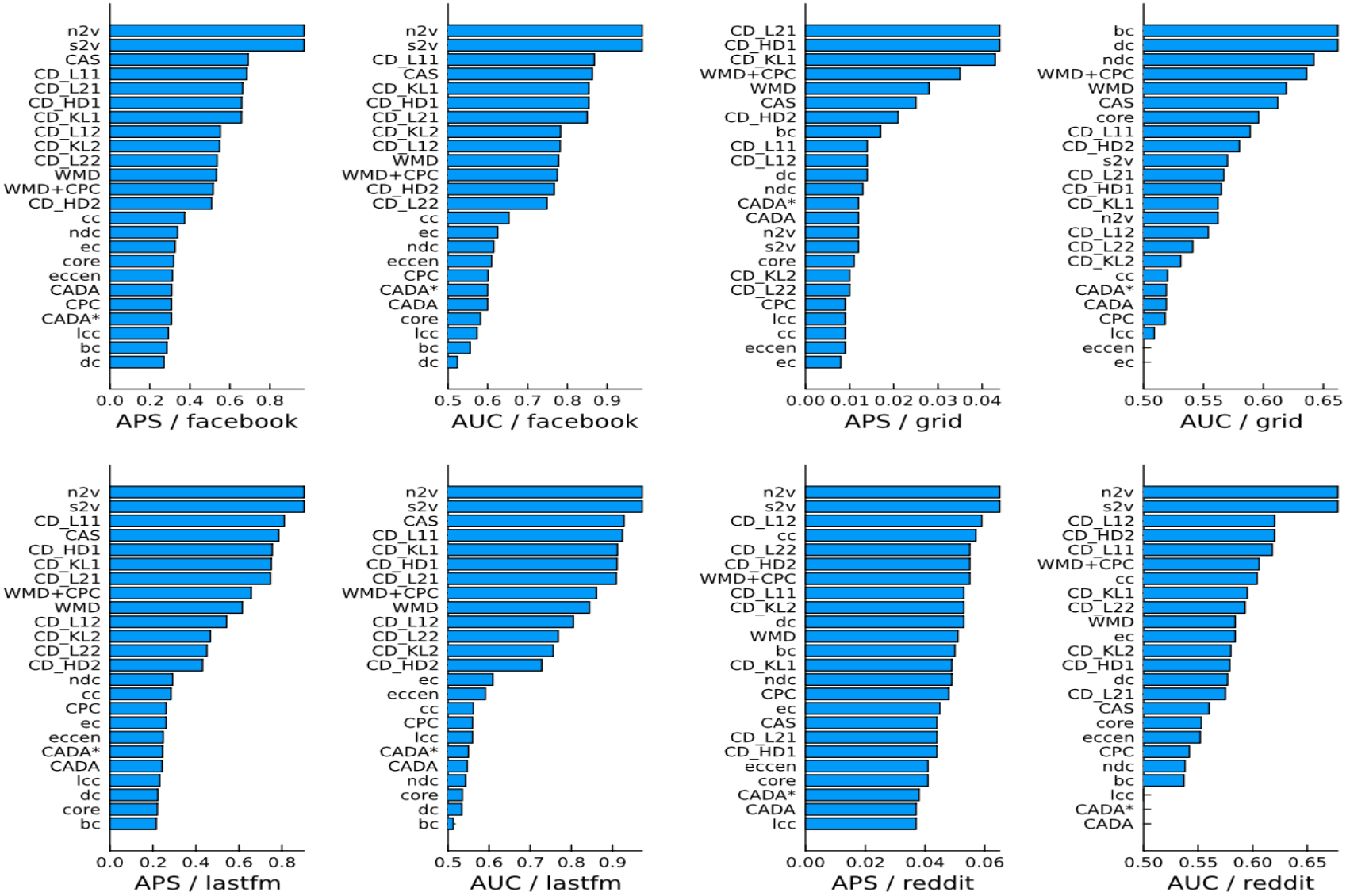
Miary weryfikujące jakość modeli:
ROC AUC score, Average Precision score.

Oczekiwany wynik:
Nowe zmienne najlepiej wyjaśniają binarną zmienną celu

Experiment 2. Results ABCD+o



Experiment 2. Results Empirical Graphs



Podsumowanie

1. **Community-aware features** są użyteczne w zadaniach klasyfikacji wierzchołków danych grafowych.
   - potwierdziliśmy hipotezę dla sztucznych danych (ABCD+o) realizujących zadanie wyszukiwania ***outlierów,*** dla których nowe zmienne przewyższają swoją jakością klasyczne zmienne grafowe i embeddingi.
   - dla empirycznych danych grafowych, nowe zmienne tylko czasami były najlepszymi zmiennymi, ale rekomendujemy ich dodanie dla modeli predykcyjnych (i cytowanie pracy).
2. **Community-aware features** moją ***względnie małą złożoność obliczeniową*** w porównaniu z embeddingami i zmiennymi klasycznymi.
3. Bardzo ***łatwa interpretowalność*** nowych zmiennych.
4. Zaproponowane przez nas nowe zmienne (CAS i distribution-based) ogólnie sprawdzając się lepiej niż community-aware features proponowane wcześniej w literaturze.

DATA
SCIENCE
SUMMIT

Dziękuję za uwagę!

https://dssconf.pl/user.html#!/lecture/DSS23-2313/rate

www.dssconf.pl

23-24.11.2023

PGE Narodowy +
Online

ORGANIZATORZY: ACADEMIC PARTNERS Data Science Warsaw Wydział Matematyki i Nauk Informacyjnych POLITECHNIKA WARSZAWSKA