Графы в машинном обучении

Романов Владимир БПМИ192

Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики» (Москва)

23 ноября 2021 г.

Vertex embeddings

Определение

First-order proximity — непосредственная близость вершин

Second-order proximity — близость вершин по структуре

- Рассмотрим embedding, которые описывают локальные свойства
- Мы хотим, чтобы соседи имели близкий вектор, а далекие разный

- Формулировка напоминает аналогичную задачу для текста
- Идея: попытаемся применить SkipGram для этой задачи

DeepWalk (Постановка)

Обозначения

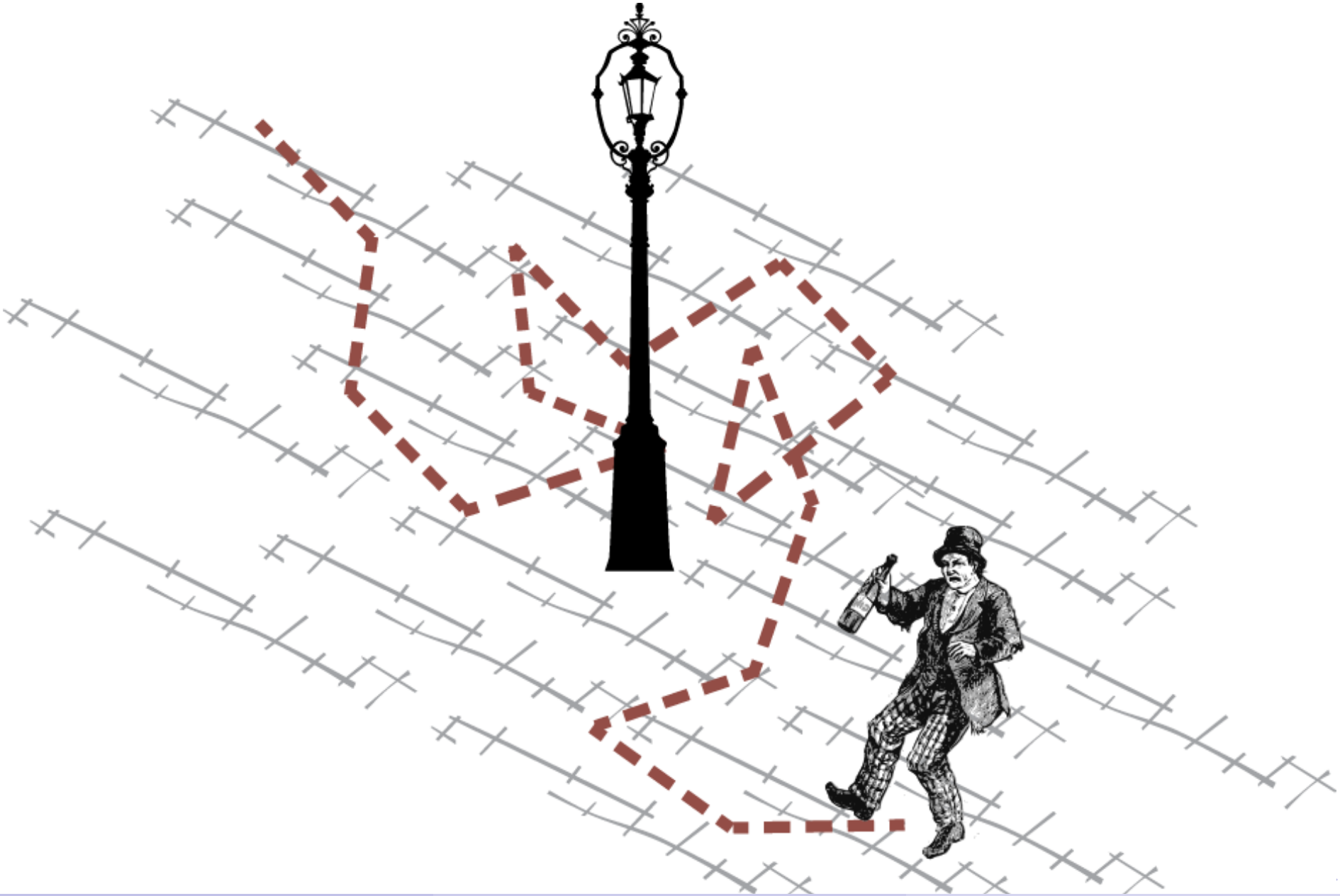
Embedding: $\Phi : V \to \mathbb{R}^d$

Loss: $\sum_{u \in N(v)} -\ln Pr\left(u \mid \Phi(v)\right)$

Алгоритм

1. Переберем вершину $s \in V$
2. Рассмотрим случайный путь $\mathcal{W}_s$ размера t
3. Прорелаксируем SkipGram пройдясь по $\mathcal{W}_s$ окном w
4. Повторим процес γ раз

DeepWalk (in a nutshell)



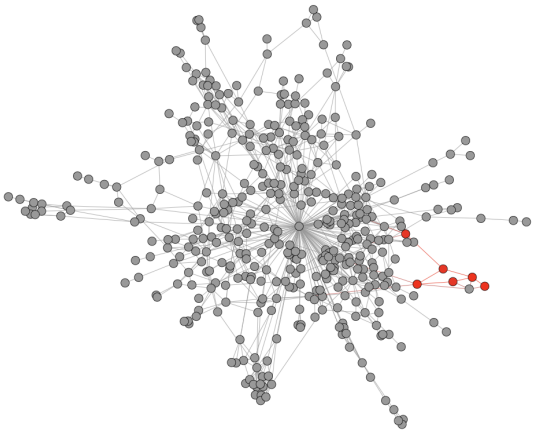
DeepWalk (Hierarchical Softmax)

Проблема: делать Softmax долго

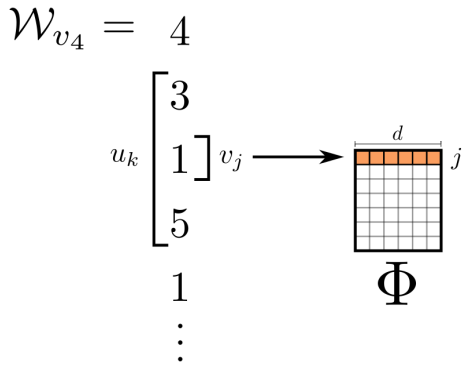
Решение: дерево отрезков (или negative sampling)

$$Pr(u \mid \Phi(v)) = \prod_{b_i \in B} Pr(b_i \mid \Phi(v))$$

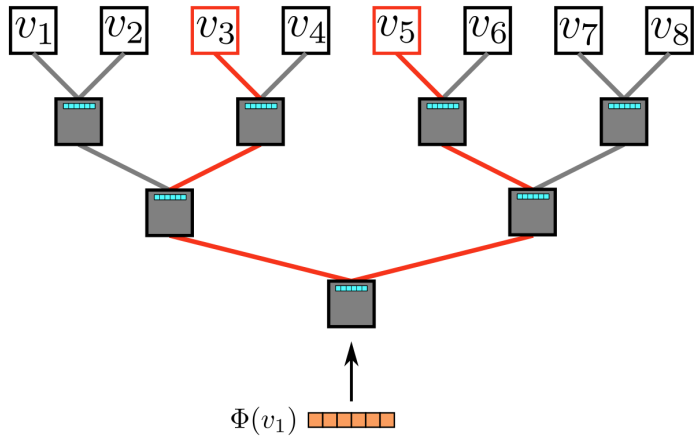
Итоговый алгоритм:



(a) Random walk generation.



(b) Representation mapping.



(c) Hierarchical Softmax.

Node2Vec (search strategy)

Обновление

Loss: $\sum_{u \in N_S(v)} -\ln Pr\left(u \mid \Phi(v)\right)$

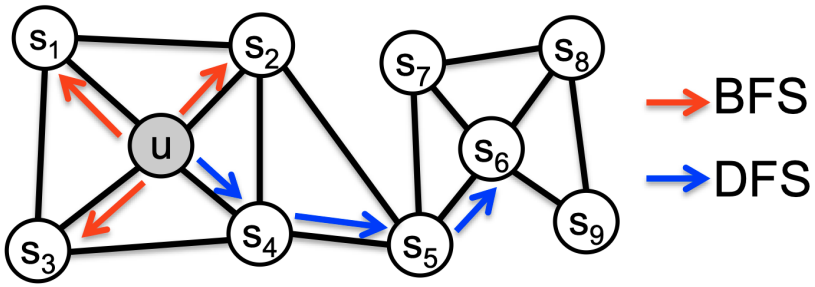


Figure 1: BFS and DFS search strategies from node u ($k = 3$).

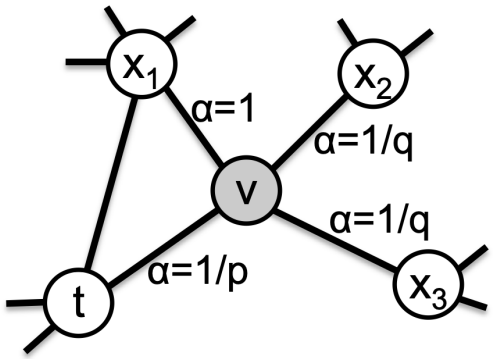


Figure 2: Illustration of the random walk procedure in *node2vec*. The walk just transitioned from t to v and is now evaluating its next step out of node v. Edge labels indicate search biases α.

Node2Vec (proximity)

Примеры кластеризации с разными параметрами q

Рис.: $p = 1, q = 0.5$

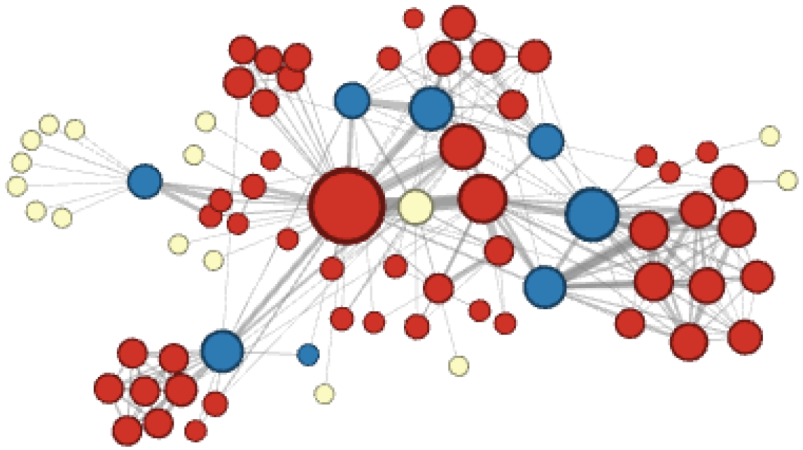
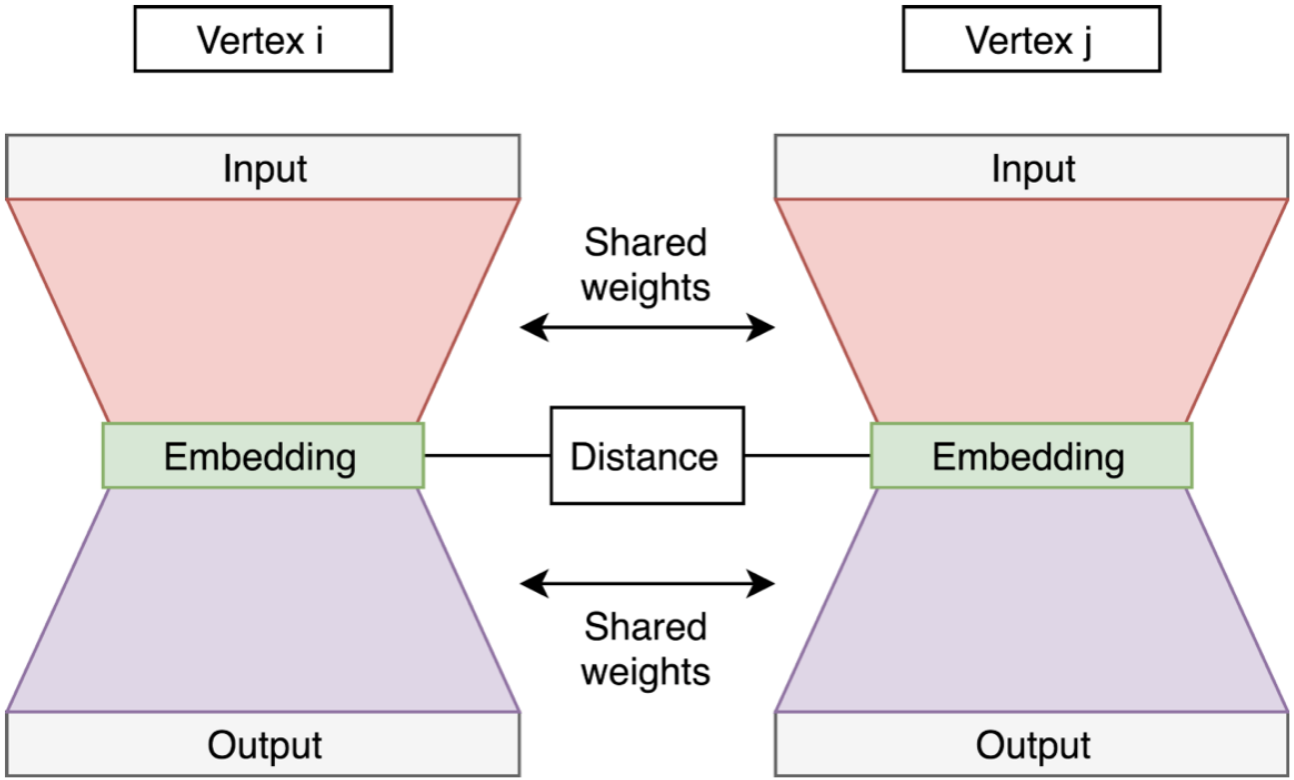


Рис.: $p = 1, q = 2$

Structural Deep Network Embedding (SDNE)

Хотим в embedding также «хранить» знания о структуре (second-order proximity)



Какие задачи мы можем решить?

Возможные формулы оценки:

Operator	Symbol	Definition
Average	$\boxplus$	$[f(u) \boxplus f(v)]_i = \frac{f_i(u)+f_i(v)}{2}$
Hadamard	$\boxdot$	$[f(u) \boxdot f(v)]_i = f_i(u) * f_i(v)$
Weighted-L1	$\|\cdot\|_{\bar{1}}$	$\|f(u) \cdot f(v)\|_{\bar{1}i} = \|f_i(u) - f_i(v)\|$
Weighted-L2	$\|\cdot\|_{\bar{2}}$	$\|f(u) \cdot f(v)\|_{\bar{2}i} = \|f_i(u) - f_i(v)\|^2$

Примеры задач:

- node-classification
- node-clastering
- graph-visualization
- link-prediction

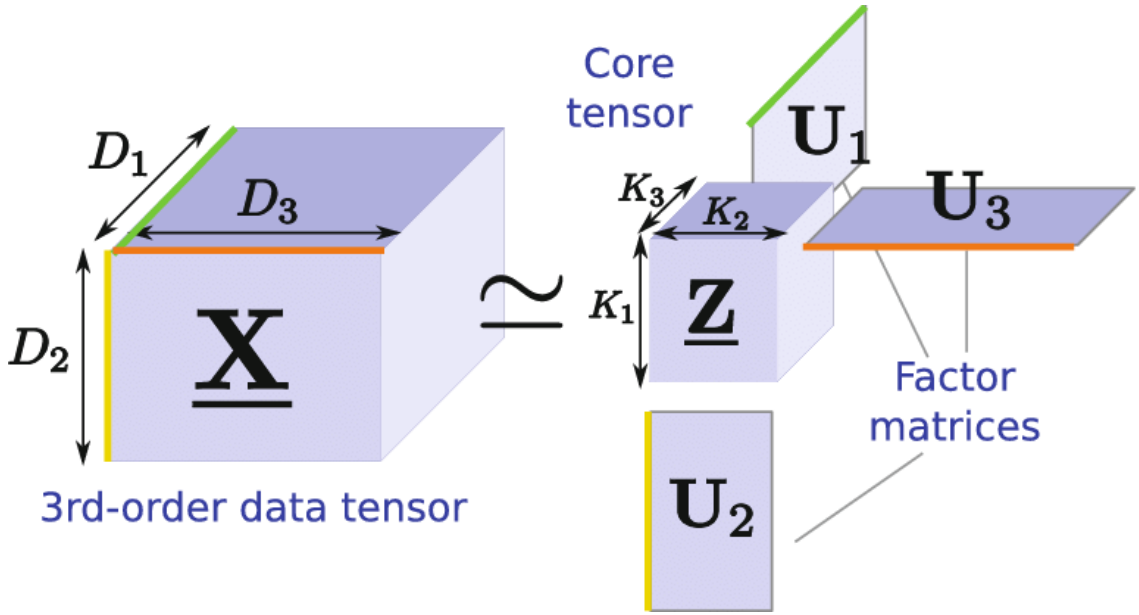
Усложнение link-prediction

Постановка:

- Есть граф (V, E)
- Каждое ребро принадлежит одному из классов (R)
- Хотим найти $\phi(v_1, r, v_2)$, которая будет предсказывать, есть ли ребро (v_1, v_2) класса r

Мы хотим предсказать трехмерный бинарный тензор $\mathbb{R}^{|V|\times|E|\times|V|}$

TuckER (decomposition)

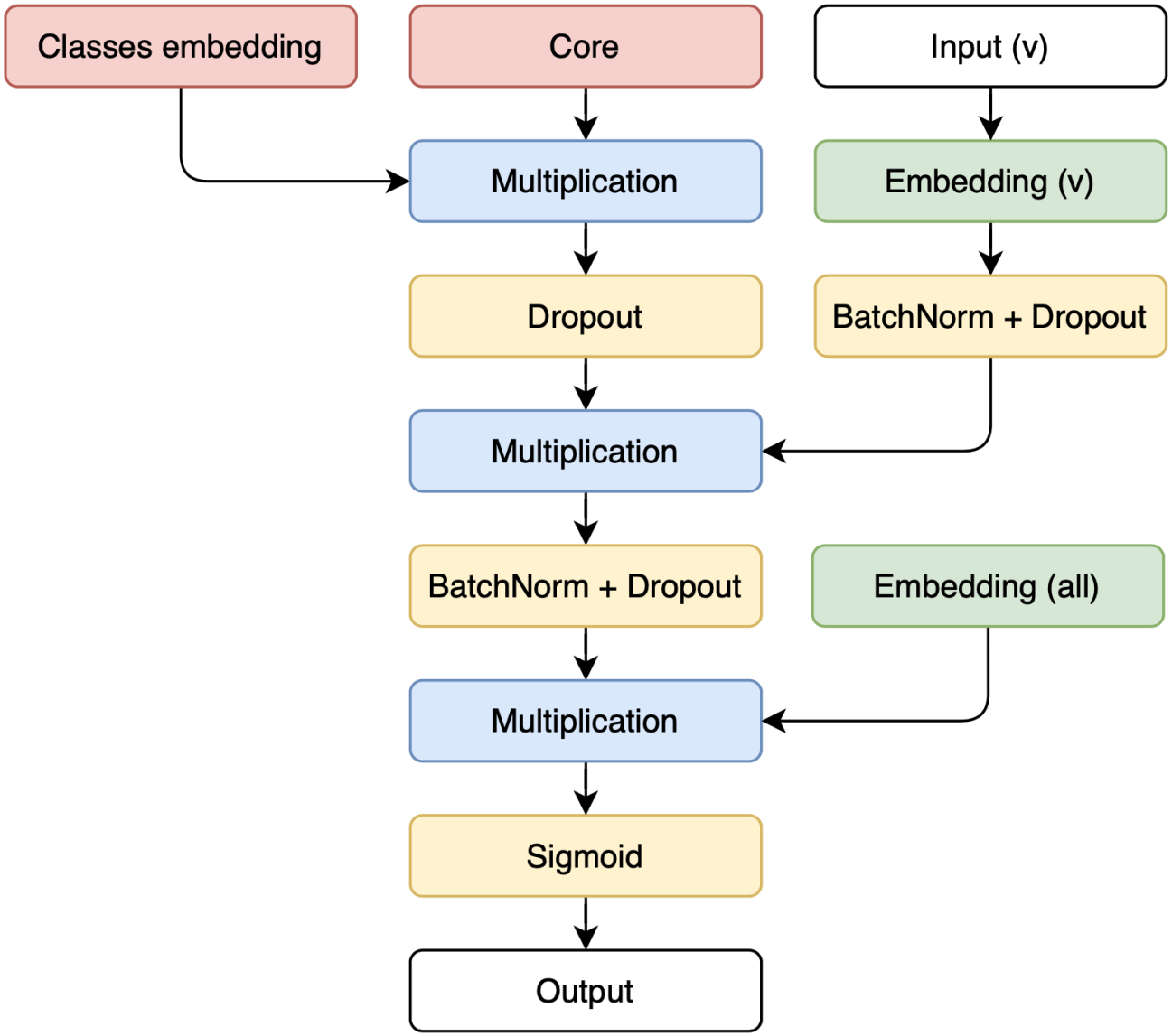


$$X_{ijk} = \sum_{\alpha=1}^{K_1} \sum_{\beta=1}^{K_2} \sum_{\gamma=1}^{K_3} Z_{\alpha\beta\gamma} U^{(1)}_{i\alpha} U^{(2)}_{j\beta} U^{(3)}_{k\gamma}$$

TuckER (model)

- Попытаемся воспользоваться полученными embeddings для вершин
- Первая идея: обучить модель для каждого класса
- Вторая идея: обучим для классов свои embeddings, параллельно обучая ядро свертки

TuckER (model)



Список литературы

- DeepWalk: https://arxiv.org/pdf/1403.6652.pdf
- Node2Vec: https://arxiv.org/pdf/1607.00653.pdf
- SDNE: https://www.kdd.org/kdd2016/papers/files/rfp0191-wangAemb.pdf
- TuckER: https://arxiv.org/pdf/1901.09590.pdf