



Graph Representation Learning(GRL,网络表示学习/图特征表示学习)





motivation

网络结构在日常生活中非常**普遍**:社交网络、学术引用网络、知识图谱。随着互联网的发展,网络结构日益**复杂、庞大**。

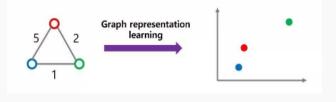
如何高效地在大规模网络上进行网络分析任务,例如节点分类、聚类、知识图谱中实体相关性计算、链接预测、社区发现等?

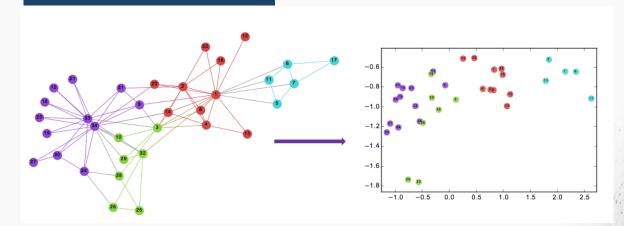
为了进行相应的网络分析任务,最重要的问题就是如何利用网络中的信息,对网络中的节点进行有效的特征表示。

网络表示的质量,对于进行后续的网络分析任务至关重要。

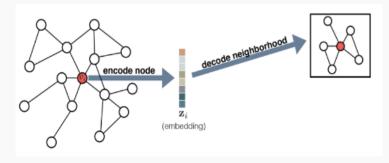
Graph Representation Learning(GRL,网络表示学习/图特征表示学习)

GRL也被称作 Network Embedding、Graph Embedding。将图中每一个节点都映射到一个低维向量空间,变成一个多维向量(向量化(Embedding)技术),并且在此空间内保持原有图的结构信息或距离信息。





Graph Representation Learning(GRL,网络表示学习/图特征表示学习)



01 优点

能将复杂的网络信息变成结构化的 多维特征,从而实现更方便的算法 应用。

传统图算法时间复杂度高且不利于 并行计算(节点相似性计算、子图 相似性计算问题)

02 >

难点

学习属性的选择、提取:不同的向量化表示方法本质上都是对网络信息的一种摘要(节点的近邻关系、角色)。规模化:现实应用中很多网络包含了大盟的节点和边,高效的向量化方法,能够在短时间内处理超大规模的网络,才比较有实际应用的可能性。

向量维度:如何确定合适的向量表示维度,是一个很难的问题,并且也是和具体场景相关的。

Random walk based Graph Representation Learning(网络表示学习代表模型)

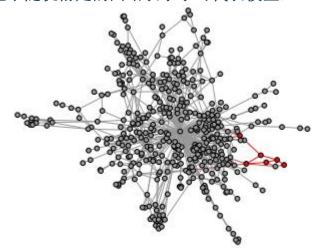
- 1. 同构网络(文章引用网络)
- 2. 异构网络(社交网络、知识图谱)





基于随机游走的网络表示学习模型: deepwalk

DeepWalk(基于随机游走的网络表示学习代表模型)

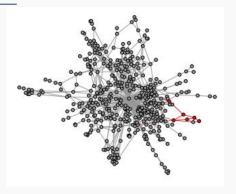


思想 对网络局部信息进行特征提取压缩,利用所提取的局部信息完成节点向量化表示

步骤 1. 在网络上每个节点进行随机游走,生成由**网络中节点**构成的**随机游走序列**。

2. 将上一步游走得到的<mark>节点序列</mark>看成句子,<mark>节点</mark>看作<mark>单词</mark>,利用自然语言处理 领域广泛使用的训练词向量的神经网络模型—— Skip-Gram,来训练网络节点 的向量表示。

DeepWalk



Algorithm 1 DeepWalk (G, w, d, γ, t)

```
Input: graph G(V, E)
    window size w
    embedding size d
    walks per vertex \gamma
    walk length t
Output: matrix of vertex representations \Phi \in \mathbb{R}^{|V| \times d}
 1: Initialization: Sample \Phi from \mathcal{U}^{|V| \times d}
 2: Build a binary Tree T from V
 3: for i = 0 to \gamma do
       \mathcal{O} = \text{Shuffle}(V)
       for each v_i \in \mathcal{O} do
          W_{v_i} = RandomWalk(G, v_i, t)
          SkipGram(\Phi, W_{v_s}, w)
 7:
       end for
 9: end for
```

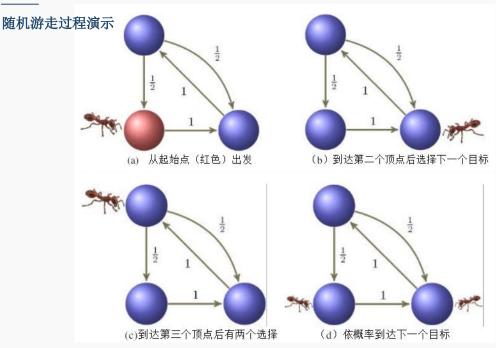
01 随机游走(Random Walk)

从当前节点均匀、随机地选择下一个节点,然后再从下个节点均匀、随机地 选择下一个节点。

可以将随机游走看作是图结构的局部结构信息,以此来表示图结构中节点的隐含信息(度、重要程度、距离其他节点的距离远近)

考虑节点 V 的前 k 个节点和后 k 个节点,很好地将网络邻居结构存入向量中。

DeepWalk



DeepWalk

02

word2Vec之Skim-gram模型

... an efficient method for learning high quality distributed vector ...

focus

利用上一步游走得到的序列,来训练网络节点的向量表示:

输入中心单词, **Output Layer** 输出其周围词出现的可能性(概率) Softmax Classifier Hidden Layer Probability that the word at a Linear Neurons randomly chosen, nearby Input Vector position is "abandon" 0 全连接 0 ... "ability" 0 0 0 ... "able" A '1' in the position corresponding to the word "ants" 0 0 0 10,000 positions ... "zone" 300 neurons sum up to 1 10,000 neurons $= [10 \ 12 \ 19]$ 训练目标: 在上下文中出现的单词概率最高

Graph Representation Learning(网络表示学习/图特征学习)

存在问题

- 1. 目前大部分向量化方法,仅利用网络结构信息,并没有利用网络节点本身的属性(比如文本、图像等多媒体信息)以及边所代表的关系信息,使得结果向量对网络信息的存储很有限。
- 2. 大部分模型是对静态网络结构的直推学习,并没有考虑网络时间演化过程中新节点的生成和旧节点的湮灭,而网络的动态特性对理解其性质也至关重要。这个弱点甚至会影响向量化在动态网络上的效果。

