

110-1 資訊管理
期末報告
GNN-based Recommender System

組別：第 12 組

指導教授：魏治平、曹承礎

學生：朱彬祺、陳柏儒、潘躍升、蕭瑞昕、張智鈞

January 2021

目錄

1	前言	2
2	文獻回顧	3
3	研究方法	5
3.1	資料蒐集與前處理	5
3.2	推薦系統模型	5
4	實驗結果	9
5	模型解釋性	9
5.1	LIME 於圖神經網路	9
5.2	LIME 詳細流程	10
5.3	可解釋性範例結果	10
5.4	可解釋性結果分析	12
6	總結與未來展望	13
7	分工	15

1 前言

近年來深度學習的興起與應用，推動了大量模式識別和資料探勘的研究。許多過去需要手動挑選特徵的任務（圖像分類、影像處理、聲音辨識），都被如 CNN、LSTM、Autoencoder 等端到端的深度學習方式取代。

上述的深度學習方式雖然在分析歐幾里得空間的資料取得重大成功，但現實社會中許多應用場景的資料都是從非歐幾里得空間生成的，這些資料同樣需要方式進行分析，譬如在社群網路圖（Graph）中，如何去推斷一用戶與另一用戶的關係。

然而，圖的複雜程度對現今所使用的傳統機器學習的方法論可說是提出了重大挑戰，因為圖的資料往往是不規則的。每個圖上的節點（Node）不但是無序而且有不同數量的相鄰節點，導致一些傳統的方式，如 linear regression 就會在配適上遇到一些困難。另外現有常見演算法的核心假設為每一筆資料點都是獨立同分布的，然而對於圖來說，每個結點能透過一些連結（Edge）來獲取結點與結點之間的關係。為了分析上述存於較複雜結構「圖」中的資料，圖神經網路（Graph Neural Network, GNN）因運而生。

圖神經網路可大致分為四大類，分別為圖遞迴網路（recurrent graph neural networks）、圖卷積網路（convolutional graph neural networks）、圖自編碼（graph autoencoders）、時空圖網路（spatial-temporal graph neural networks）。其中根據輸出的類型可將應用大致分為：

- 節點迴歸（node regression）：如社群網路中每個人的影響力指數
- 節點分類（node classification）：如社群網路中某個人是否抽菸
- 邊迴歸（edge regression）：如社群網路中人與人之間的熟識程度
- 邊分類（edge classification）：如社群網路中人與人之間的家人或朋友關係
- 圖迴歸（graph regression）：如判斷某種化學結構的沸點
- 圖分類（graph classification）：如判斷某種化學結構是否有毒性

近年來因為串流平台與電子商務的興起，精準行銷已成為建立消費者平台忠誠度的不可或缺條件，推薦系統的表現好壞幾乎等同於平台的成功與否，而傳統的機器學習推薦系統大概可以分

為以下三類：content-based filtering 使用商品的特徵作為出發點，再根據用戶的紀錄推薦類似的商品給使用者、collaborative filtering 是以使用者的評分作為參考，找出最相似的顧客或找出最相似的商品並進而推薦商品、hybrid system 則是同時使用兩種的混合模型來作為推薦系統。

本次研究我們將使用傳統基於 model-based collaborative filtering 的 SVD 以及 k-NN 兩種推薦模型作為比較對象，來判斷利用圖神經網路是否顯著地優於過去的推薦方式。我們預計使用 MovieLens 這個資料集，透過 GNN 建立一個電影推薦系統，並加入可解釋 AI 的特性，將使用者與電影的網路圖過濾出重要的交互關係。

2 文獻回顧

圖神經網路近幾年來發展出了幾個廣泛且實用的模型，其中 Graph Convolutional Network (GCN, Kipf and Welling, 2016) 即是蒐集一點周遭鄰居的訊息，聚合後再傳遞下去，如此所有點的訊息及網路結構的資料就可以當作模型的輸入，藉此做到點、邊、圖上的分類或迴歸問題。GraphSage (Hamilton et al., 2017) 提供了一個泛化且靈活的模型基礎，使得新的資料能夠有較好的表現方式，改善 GCN 的缺點。Graph Attention Networks (GAT, Veličković et al., 2017) 進一步加入了注意力機制 (attention mechanism)，給予一個節點周遭的邊不同的權重，能夠提升模型的預測結果。

而此次研究所採用的模型 Graph Convolutional Matrix Completion (GC-MC, Berg et al., 2017) 可以視為 GCN 的變形，對於一節點的周遭資訊透過 convolution 的方式蒐集起來，並且再透過 autoencoder 編碼解碼的方式來進行預測任務，其細節詳見於研究方法一章。

而對於 GNN 的可解釋性，在 2019 年 NIPS 的論文中，史丹佛大學的五位教授提出了 GNNExplainer 的概念 (Ying et al., 2019)，它的出現補強了過去 GNN 在解釋性方面較為缺乏的問題，此文獻希望可以提升人們對於 GNN 模型的信賴程度，讓 GNN 普及程度提升，增強 GNN 的透明度，讓它更加公平與保護隱私，也透過可解釋性輔助更多不同的決策。

近幾年也有許多研究透過注意力機制來找出圖中重要的部分，但是這些方法許多受限於特定模型格式以及資料型式，圖 1 是論文中模型的不同類型，紅色是原本的節點，綠色是重要的節點，黃色是不重要的節點，與其它可解釋方法論相比，GNNExplainer 的方法與傳

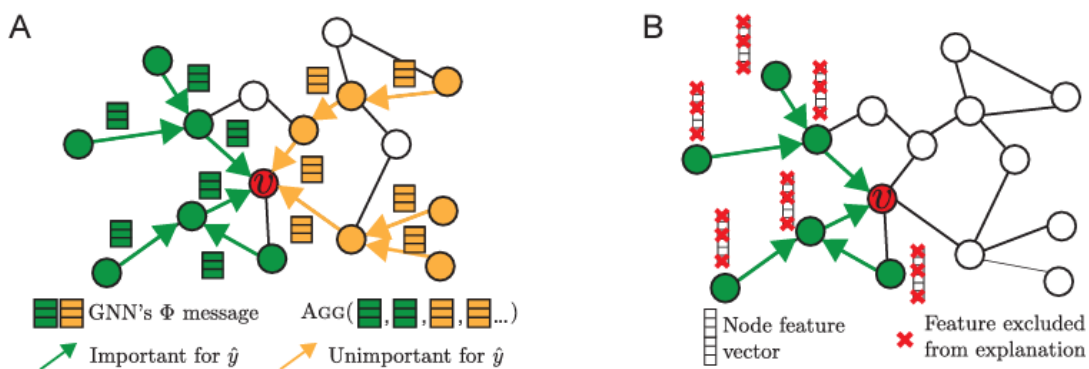


圖 1: 左圖表示重要節點，右圖表示重要特徵

統 LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations) 與 SHAP (SHapley Additive exPlanations) 類似，他們皆是不深入的研究模型內部的參數與結構，而是假設模型是一個黑盒子，利用特定資訊的變化，去探究模型對應的改變，以此來判斷特定資訊是否重要，為一個能夠適合任何不同 GNN 的可解釋方法論。

3 研究方法

在這次的研究中我們想要根據用戶與物品之間的互動關係來建構推薦系統，其中模型包括用來當作 baseline 的經典模型 SVD、k-NN 與近幾年來蓬勃發展的圖神經網路，以下簡述資料蒐集與前處理過程並介紹三個在本文中使用到的模型。

3.1 資料蒐集與前處理

我們使用公開的 MovieLens 100K Dataset¹，其中包含 943 個用戶與 1682 部電影的評分資料，其評分紀錄為 10 萬筆，每個評分為 1 至 5 的整數，且這個資料集也包含如用戶的年紀、性別、職業與電影的片名、種類等特徵資料。

3.2 推薦系統模型

3.2.1 Singular Value Decomposition (SVD)

Simon Funk 將 SVD 方法應用於 matrix factorization 並於推薦系統，並於 Netflix 所舉辦之比賽中大獲成功。其認為一用戶 u 對於一電影 i 之預測評分 \hat{r}_{ui} 可被視為：

$$\hat{r}_{ui} = \mu + b_u + b_i + q_i^T p_u$$

其中 μ 為所有評分之平均， b_u 與 b_i 為觀察到之用戶與電影對於平均之個別效果， $q_i^T p_u$ 則衡量了電影與用戶之間的交互效果，而此模型的主要目的即是想要學習 b, q, p ，即用戶與電影以向量呈現的表示方式，這與線性代數中奇異值分解的概念是一致的，然而由於我們的評分矩陣存在缺失值，無法直接應用 SVD，因此我們採用最佳化的方式來學習物品與用戶的表示方式。

$$\min_{b^*, p^*, q^*} \sum_{(u,i)} (r_{ui} - \mu - b_u - b_i - p_u^T q_i)^2 + \lambda(\|p_u\|^2 + \|q_i\|^2 + b_u^2 + b_i^2)$$

上式目標函式涵蓋了評價的預測平方誤差與 regularization 項。其中採用隨機梯度下降 (Stochastic Gradient Decent) 來進行最佳化：

¹<https://grouplens.org/datasets/movielens/>

$$b_u \leftarrow b_u + \gamma(e_{ui} - \lambda b_u)$$

$$b_i \leftarrow b_i + \gamma(e_{ui} - \lambda b_i)$$

$$p_u \leftarrow p_u + \gamma(e_{ui}q_i - \lambda p_u)$$

$$q_i \leftarrow q_i + \gamma(e_{ui}p_u - \lambda q_i)$$

其中 $e_{ui} = r_{ui} - \hat{r}_{ui}$ 、 γ 為學習率、 λ 為懲罰項權重，上式描述了每次迭代時如何更新相關向量，詳細細節可參考 Koren et al., 2009。

3.2.2 k-Nearest Neighbors Algorithm (k-NN)

參考樣本在特徵空間中的 k 個最相鄰的樣本，該點的預測評分可以視為鄰近樣本評分的線性組合。此方法在決策時，只與少量的相鄰樣本有關，因此適合應用於類域的交叉或重疊較多的待分樣本集。其用戶 u 對電影 i 的預測評分 \hat{r}_{ui} 可表示為：

$$\hat{r}_{ui} = \frac{\sum_{v \in N_i^k(u)} \text{sim}(u, v) \cdot r_{vi}}{\sum_{v \in N_i^k(u)} \text{sim}(u, v)}$$

$N_i^k(u)$ 為有評分過物品 i 且與用戶 u 相鄰的 k 個用戶集合， $\text{sim}(u, v)$ 用以衡量兩用戶的相似程度，於此我們計算兩用戶共同評分之電影的均方誤差。直觀來看預測評分即是鄰近自己 k 個用戶評分的加權平均，若與自身越相似，則其權重越大。此演算法在應用時無訓練過程，惟 k 此一超參數需要選擇過。

3.2.3 Graph Convolutional Matrix Completion (GC-MC)

給定一評分矩陣 $M \in \{0, 1, \dots, 5\}^{N_u \times N_v}$ ，其中 N_u 為用戶個數， N_v 為電影個數， M_{ij} 表示用戶 i 對電影 j 的評分 (1 至 5)，若 $M_{ij} = 0$ 表示用戶 i 沒有看過電影 j 。我們的主要任務就是預測評分矩陣為零的位置，並將這個矩陣補滿 (matrix completion)。

在推薦系統中，我們可以將用戶視為一組節點，物品視為另外一組節點，其用戶 i 對物品 j 的評分為點對點的連結 (link)，且其邊上帶有 1 至 5 的評分標籤，若用戶 i 過去沒有接觸

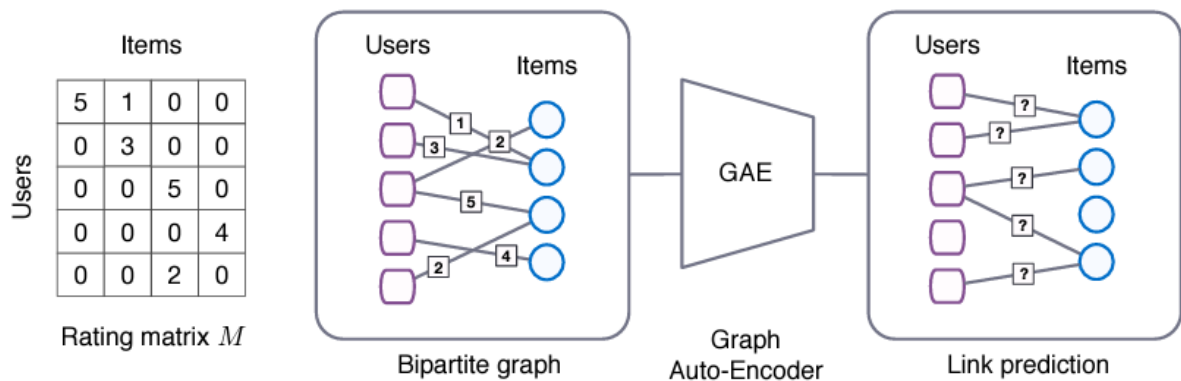


圖 2: GC-MC 流程圖

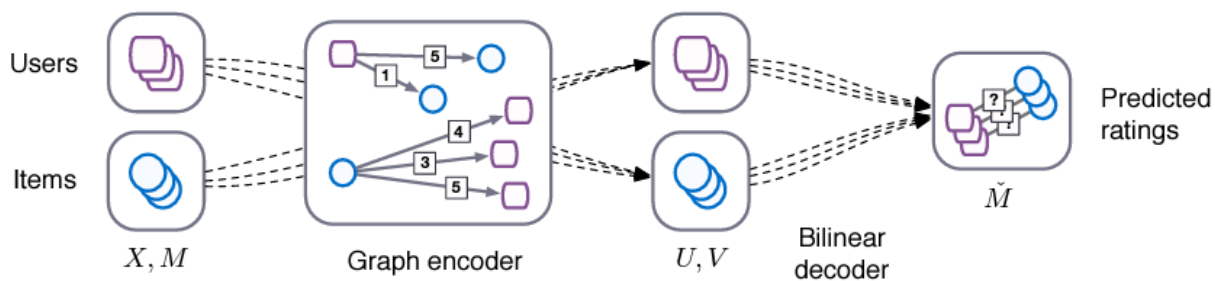


圖 3: GC-MC Autoencoder 示意圖

過物品 j ，則兩者之間不存在邊，至此可以將原先的 matrix completion 問題視為圖上的 link prediction 問題，如圖 2。

在 GC-MC 當中，主要的想法即是運用特徵資料經過 autoencoder 編碼再解碼後的 embedded vector 來做多類別的分類問題，如圖 3。接下來我們會逐一介紹具體內容。

Graph convolutional encoder

我們期望用戶與物品可以被表示成 U, V ，其中 U_i (V_j) 為用戶 i (物品 j) 的向量表示方式，且 $[U, V] = f(X, M_1, \dots, M_r)$ ， X 為做為輸入的特徵矩陣， M_r 代表邊種類為 r 的相鄰矩陣 (adjacency matrix)。

而在 graph convolution 的結構下，我們也在 encode 的過程中考慮 first-order 鄰居，於是

convolution 可以視為不同訊息的傳遞，以物品 j 對用戶 i 為例：

$$\mu_{j \rightarrow i, r} = \frac{1}{c_{ij}} W_r x_j$$

$\mu_{j \rightarrow i, r}$ 為在邊種類為 r 下的特定訊息，其中 c_{ij} 為一正規化係數， W_r 為參數矩陣， x_j 為物品 j 的特徵向量。其後我們聚集各種傳入的訊息做為一種暫時的表示方式：

$$h_i = \sigma \left[\text{accum} \left(\sum_{j \in N_{i,1}} \mu_{j \rightarrow i,1}, \dots, \sum_{j \in N_{i,R}} \mu_{j \rightarrow i,R} \right) \right]$$

$\text{accum}(\cdot)$ 可以是串接或加總， $\sigma(\cdot)$ 為 element-wise 的激活函數，而最後用戶 i 可以表示為：

$$u_i = \sigma(W h_i)$$

其中物品的最終表示方式也可以用類似的方法去計算。而我們再訓練的過程其實就是想要學習矩陣 W_1, \dots, W_R, W 。

Bilinear decoder

而在 decode 的過程中，我們即是在給定 u_i, v_j 的條件下，試圖還原其原始評分。我們透過 softmax 函式生成各種評分類型的機率：

$$p(\hat{M}_{ij} = r) = \frac{e^{u_i^T Q_r v_j}}{\sum_{s \in R} e^{u_i^T Q_s v_j}}$$

最後的預測評分為

$$\hat{M}_{ij} = g(u_i, v_j) = \mathbb{E}_{p(\hat{M}_{ij}=r)}[r] = \sum_{r \in R} r p(\hat{M}_{ij} = r)$$

模型訓練

如同大部分的分類問題，我們定義損失函數 \mathcal{L} 為負的 negative likelihood：

$$\mathcal{L} = - \sum_{i,j; \Omega_{ij}=1} \sum_{r=1}^R I[r = M_{ij}] \log p(\hat{M}_{ij} = r)$$

此外，為了降低 overfitting 的風險，我們也考慮 node dropout、mini-batching、weight sharing 等技巧，其餘細節可參考 Berg et al., 2017

4 實驗結果

根據 MovieLens 100K 的資料集，我們將資料切成 90 % 訓練集與 10 % 測試集，不考慮額外的特徵（如使用者的年齡與職業、電影的種類與標題等），並且以測試集的 RMSE 來衡量模型表現，下表 1 呈現了實驗結果。

Model	ML-100K
SVD	0.9276
k-NN	0.9760
GC-MC	0.9112

表 1: RMSE 於 MovieLens 100K 測試集表現

從結果上來看，GC-MC 相較於其他模型確實有較好的表現，

5 模型解釋性

5.1 LIME 於圖神經網路

在 2016 年“Why Should I Trust You?”論文中 (Ribeiro et al., 2016)，提出了局部可解釋性模型—LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations)，如下圖所示，假設我們建立了一個準確的複雜模型去區分不同的類別，雖然預測效果很好但我們很難解釋為什麼這樣去做區分，而 LIME 方法就是為了解決上述問題，希望在該個體的附近建立一個簡單可解釋的模型（下圖 4 中的虛線；例如：線性模型或是決策樹），作為此個體的解釋模型。而可解釋模型在該個體附近的預測準確度必須與原模型相當，但在離該個體較遠的區域其預測力就會大幅下降，這就是所謂的「局部 (local)」忠實性。

應用在圖神經網路中，本專案想要根據過去歷史用戶對電影做評分的关系中，預測個別用戶對不同電影的推薦分數，我們挑選我們感興趣的用戶對某部電影評分的預測，並且擷取這個圖神經網路與此評分連結相關的其他評分連結，人相同或是電影相同的連結，利用 LIME 的機制多種嘗試把這些相關評分的連結的排列組合，看看不同的連結存在與否對於我們預測值的變化，藉以

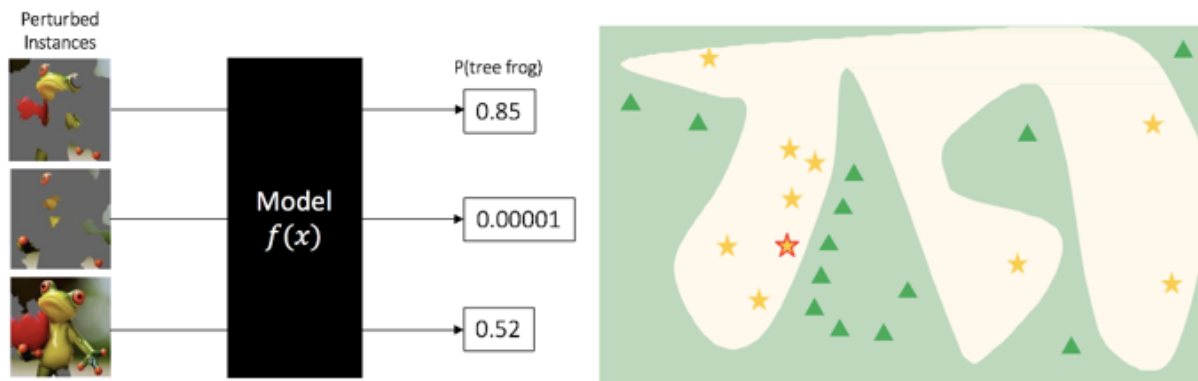


圖 4: LIME 示意圖

了解那些連結對於預測上來說是重要的，以增加我們圖神經網路的可信度以及解釋性，也協助做後續更多相關的決策。

5.2 LIME 詳細流程

1. 選擇感興趣的用戶對某部電影的評分
2. 擷取局部資訊，找出相同用戶或是相同電影的歷史評分，並且我們假設評分是 3 代表沒有意義的評分，所以不擷取評分是 3 的評分關係
3. 選擇我們需要擾動的樣本數，利用 $\text{Binomial}(n = \text{擾動樣本數}, p = 0.5)$ 的分配來進行這些連結的抽樣，抽樣的數量就是我們決定擾動的樣本數
4. 把這些不同排列組合的結果當作 X ，不同的預測結果當作 Y
5. 迴歸係數越大的連結代表對於預測上這幾個連結較為重要

5.3 可解釋性範例結果

1. 鐵達尼號

如下圖 6 所示，針對用戶 (id = 33) 對電影 (id = 313) 5 分的評分中，我們的模型預測出 4.06 的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 23、性別男、職業學生)，該電影有以下

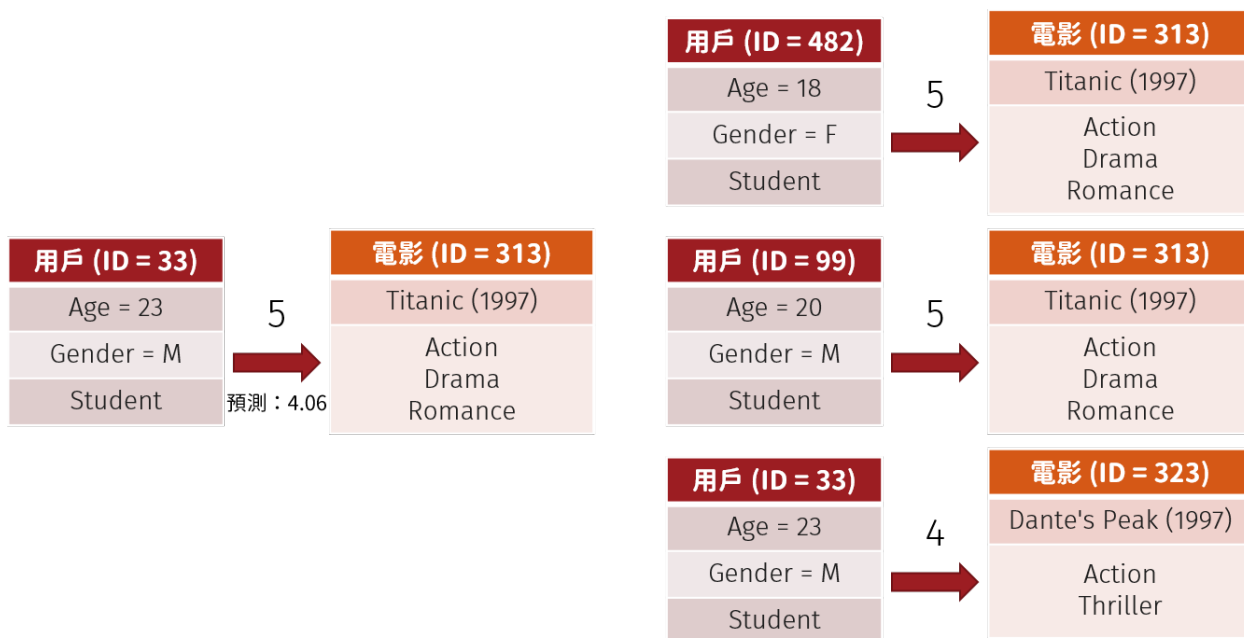


圖 5: LIME 結果：Titanic

的特徵 (名稱 Titanic 1997、電影類型 Action、Drama、Romance)，並且與這個評分局部相關的總共有 253 個評分，我們選擇 10000 個擾動的粒子數，對這 253 個評分進行 $\text{Binomial}(n = \text{擾動樣本數}, p = 0.5)$ 分配機率抽樣，將這些 0 / 1 的排列組合當作 X ，對應的預測評分當作 Y ，並且從迴歸係數我們可以得到重要的連結。

我們挑選前三個重要的評分關係來分析，第一個用戶 (id = 482) 對電影 (id = 313) 五分的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 18、性別女、職業學生)，該電影有以下的特徵 (名稱 Titanic 1997、電影類型 Action、Drama、Romance)，以及第二個：用戶 (id = 99) 對電影 (id = 313) 五分的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 20、性別男、職業學生)，該電影有以下的特徵 (名稱 Titanic 1997、電影類型 Action、Drama、Romance)，最後第三個是用戶 (id = 33) 對電影 (id = 323) 四分的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 23、性別男、職業學生)，該電影有以下的特徵 (名稱 Dante's Peak 1997、電影類型 Action、Thriller)，我們也對前五十個重要連結的進行統計，這些連結的電影類別大部分是 Action、Thriller、Adventure、Drama，而用戶的職業大部分是 student、programmer、scientist、administrator。

2. 玩具總動員

如下圖 6 所示，針對用戶 ($id = 15$) 對電影 ($id = 1$) 1 分的評分，我們的模型預測出 2.62 的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 49、性別女、教育工作者)，該電影有以下的特徵 (名稱 Toy Story 1995、電影類型 Animation、Children、Comedy)，與這個評分局部相關的總共有 345 個評分，我們選擇 10000 個擾動的粒子數，對這 253 個評分進行 $\text{Binomial}(n = \text{擾動樣本數}, p = 0.5)$ 分配機率抽樣，將這些 0 / 1 的排列組合當作 X ，對應的預測評分當作 Y ，並且從迴歸係數我們可以得到重要的連結。

我們挑選前三個重要的評分關係來分析，第一個用戶 ($id = 15$) 對電影 ($id = 310$) 四分的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 49、性別女、教育工作者)，該電影有以下的特徵 (名稱 Rainmaker, The 1997 電影類型 Drama)，以及第二個用戶 ($id = 730$) 對電影 ($id = 1$) 四分的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 31、性別女、職業研究家)，該電影有以下的特徵 (名稱 Toy Story 1995 電影類型 Animation、Children、Comedy)，最後第三個是：用戶 ($id = 417$) 對電影 ($id = 1$) 四分的評分，該用戶有以下的特徵 (年齡 37、性別男、職業律師)，該電影有以下的特徵 (名稱 Toy Story 1995、電影類型 Animation、Children、Comedy)，我們也對前五十個重要連結的進行統計，這些連結的電影類別大部分是：Comedy、Drama、Action、Thriller，而用戶的職業大部分是：educator、student、scientist、other。

5.4 可解釋性結果分析

透過 LIME 的方法，我們可以加以理解我們有興趣的連結，他預測對應分數的原因，以及與它較相關的歷史評分，並且從可解釋的結果可以發現，與我們預測的評分相關的重要連結，其中大部分的特徵正好跟我們本身的用戶或是電影相關，正好可以驗證我們的可解釋結果，值得注意的是這些特徵再訓練我們的圖神經網路的時候，是沒有特別加進去的，這代表了我們的圖神經網路從用戶對電影歷史的評分紀錄中，學習到了他們的關聯性，就這些評分紀錄將我們的用戶或電影做了對應的分組，這也很符合我們的常理判斷，我們每個人的喜好內容可以會跟年齡、性別、職業或是過去看過的電影類別相關，加強了我們模型的可信度，補足了過去圖神經網路較缺乏的可解釋性，也增加了實際在商業上應用的可能，也可以透過這些可解釋結果，進行更深入的分析

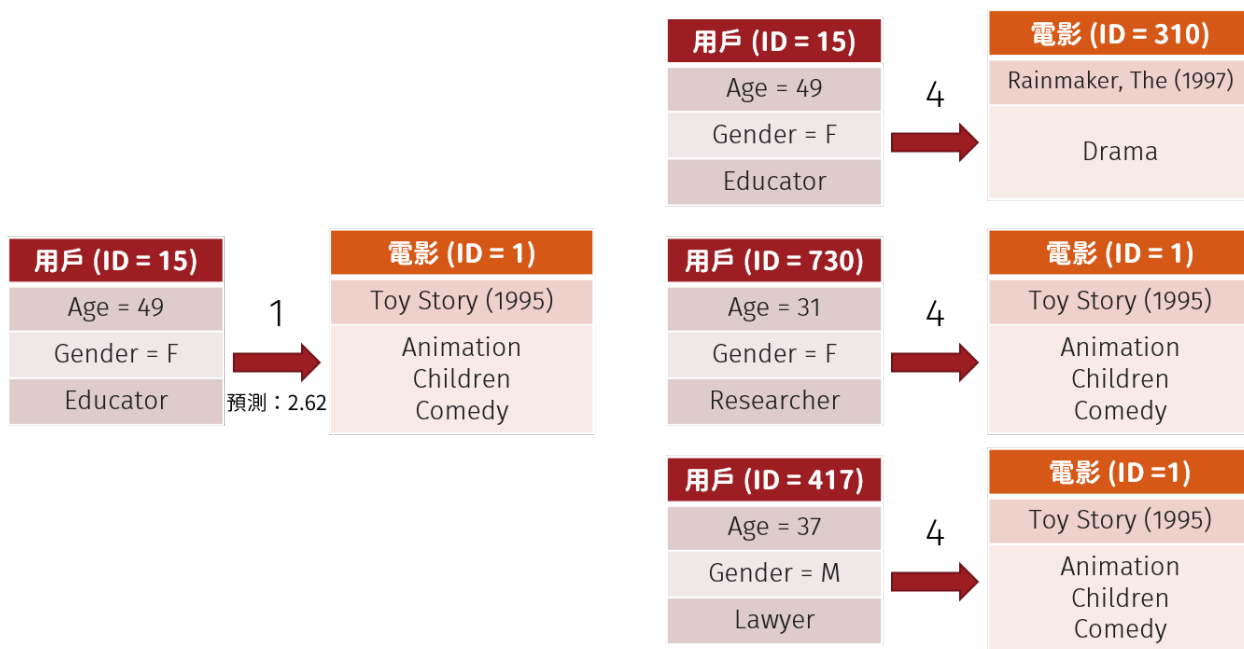


圖 6: LIME 結果：Toy Story

以輔助決策。

6 總結與未來展望

在這次的專案中，我們介紹了圖神經網路，並嘗試於推薦系統中比較圖神經網路 (GC-MC) 與傳統 collaborative filtering (SVD, k-NN) 的推薦表現，於 MovieLens-100K 的資料集中，可以發現圖神經網路的確有較好的表現。另外一點值得一提的是，GNN 其實有著很大的潛力，畢竟在資料面它可以很直接地引入更多的特徵，在模型結構面除了可以去加深層數之外，也可以拓展原本用戶與物品的互動紀錄，加入如使用者之間的社群網路、電影之間的知識圖譜等資料，透過 heterogeneous graph 來改善模型表現，這一點是在傳統的模型中較難去實現的，由於 GNN 仍還在很早期的發展階段，我們認為 GNN 應該很有潛力做為未來處理非結構化資料的手段之一，而此一運用於推薦系統上的實作是我們的第一步嘗試。

而模型的可解釋性則可以為我們提供商業上的洞見，包括在過去到底哪些物品與用戶是關鍵的指標，以及在未來若有新用戶或新物品出現時，他們可能會有如何的表現，而我們的模型除了

去模擬之外，也期望透過可解釋性加強其預測的信效度，相關的從業人員如行銷或商業分析部門也就更願意運用我們的預測結果做為未來的決策輔助。

除此之外，我們原先其實是想使用 GNNExplainer (Ying et al., 2019) 作為可解釋 GNN 的理論基礎，但是因為 GNN 相關的套件並沒有很廣泛，同時網路上只可見 GNNExplainer 用於 node classification 與 graph classification 等問題上的公開程式碼，並不見 link prediction 等相關的應用，雖然理論上我們認為這一套方法可行，然而卻在實作上遇到了很大的困難，使得我們最後運用其他較不理論的方法來為模型提供可解釋性。但我們同時也在這件事情上學到，正因為此領域還正在很初期的階段，網路上的資源不多，於是若我們在日後實做出來此版本的模型，那也就填補了一部分實作上的落差。為此，我們希望在未來可以基於一些 GNN 框架實作不同類型的 GNNExplainer，並且公開程式碼，我們認為這也會是一件意義非凡的事。

總結以上，我們嘗試了圖神經網路於推薦系統中，並且期望透過增加可解釋性，帶給我們商業上的洞見並輔助進行決策。

7 分工

學號	姓名	工作
R10725002	朱彬祺	SVD、投影片製作
R10725008	陳柏儒	GC-MC、書面撰寫、投影片製作
R10725054	蕭瑞昕	kNN、投影片製作
R09725051	張智鈞	可解釋圖神經網路、書面撰寫
R10725050	潘躍升	可解釋圖神經網路

參考文獻

- Berg, R. v. d., Kipf, T. N., & Welling, M. (2017). Graph convolutional matrix completion. *arXiv preprint arXiv:1706.02263*.
- Hamilton, W. L., Ying, R., & Leskovec, J. (2017). Inductive representation learning on large graphs. *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*, 1025–1035.
- Kipf, T. N., & Welling, M. (2016). Semi-supervised classification with graph convolutional networks. *arXiv preprint arXiv:1609.02907*.
- Koren, Y., Bell, R., & Volinsky, C. (2009). Matrix factorization techniques for recommender systems. *Computer*, 42(8), 30–37.
- Ribeiro, M. T., Singh, S., & Guestrin, C. (2016). ” why should i trust you?” explaining the predictions of any classifier. *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining*, 1135–1144.
- Veličković, P., Cucurull, G., Casanova, A., Romero, A., Lio, P., & Bengio, Y. (2017). Graph attention networks. *arXiv preprint arXiv:1710.10903*.
- Ying, R., Bourgeois, D., You, J., Zitnik, M., & Leskovec, J. (2019). Gnnexplainer: Generating explanations for graph neural networks. *Advances in neural information processing systems*, 32, 9240.