



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ
ΣΤΗ ΒΙΟΙΑΤΡΙΚΗ**

Σύγχρονες Τεχνικές Ενσωμάτωσης Γραφημάτων

Τίτλος στην Αγγλική γλώσσα: Recent Graph Embeddings Approaches

Παπαγεωργίου-Χατζηαντωνίου Ελένη

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Υπεύθυνος

Βραχάτης Αριστείδης

Επίκουρος Καθηγητής

Λαμία, 2023



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΗ
ΒΙΟΙΑΤΡΙΚΗ**

Σύγχρονες Τεχνικές Ενσωμάτωσης Γραφημάτων

Τίτλος στην Αγγλική γλώσσα: Recent Graph Embeddings Approaches

Παπαγεωργίου-Χατζηαντωνίου Ελένη

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Υπεύθυνος

Βραχάτης Αριστείδης

Επίκουρος Καθηγητής

Λαμία, 2023

Με ατομική μου ευθύνη και γνωρίζοντας τις κυρώσεις (1), που προβλέπονται από της διατάξεις της παρ. 6 του άρθρου 22 του Ν. 1599/1986, δηλώνω ότι:

1. Δεν παραθέτω κομμάτια βιβλίων ή άρθρων ή εργασιών άλλων αυτολεξεί χωρίς να τα περικλείω σε εισαγωγικά και χωρίς να αναφέρω το συγγραφέα, τη χρονολογία, τη σελίδα. Η αυτολεξεί παράθεση χωρίς εισαγωγικά χωρίς αναφορά στην πηγή, είναι λογοκλοπή. Πέραν της αυτολεξεί παράθεσης, λογοκλοπή θεωρείται και η παράφραση εδαφίων από έργα άλλων, συμπεριλαμβανομένων και έργων συμφοιτητών μου, καθώς και η παράθεση στοιχείων που άλλοι συνέλεξαν ή επεξεργάστηκαν, χωρίς αναφορά στην πηγή. Αναφέρω πάντοτε με πληρότητα την πηγή κάτω από τον πίνακα ή σχέδιο, όπως στα παραθέματα.
2. Δέχομαι ότι η αυτολεξεί παράθεση χωρίς εισαγωγικά, ακόμα κι αν συνοδεύεται από αναφορά στην πηγή σε κάποιο άλλο σημείο του κειμένου ή στο τέλος του, είναι αντιγραφή. Η αναφορά στην πηγή στο τέλος π.χ. μιας παραγράφου ή μιας σελίδας, δεν δικαιολογεί συρραφή εδαφίων έργου άλλου συγγραφέα, έστω και παραφρασμένων, και παρουσίασή τους ως δική μου εργασία.
3. Δέχομαι ότι υπάρχει επίσης περιορισμός στο μέγεθος και στη συχνότητα των παραθεμάτων που μπορώ να εντάξω στην εργασία μου εντός εισαγωγικών. Κάθε μεγάλο παράθεμα (π.χ. σε πίνακα ή πλαίσιο, κλπ), προϋποθέτει ειδικές ρυθμίσεις, και όταν δημοσιεύεται προϋποθέτει την άδεια του συγγραφέα ή του εκδότη. Το ίδιο και οι πίνακες και τα σχέδια
4. Δέχομαι όλες τις συνέπειες σε περίπτωση λογοκλοπής ή αντιγραφής.

Ημερομηνία: 20/02/2023

Ο – Η Δηλ. Παπαγεωργίου-Χατζηαντωνίου Ελένη

(Υπογραφή)

(1) «Όποιος εν γνώσει του δηλώνει ψευδή γεγονότα ή αρνείται ή αποκρύπτει τα αληθινά με έγγραφη υπεύθυνη δήλωση του άρθρου 8 παρ. 4 Ν. 1599/1986 τιμωρείται με φυλάκιση τουλάχιστον τριών μηνών. Εάν ο υπαίτιος αυτών των πράξεων σκόπευε να προσπορίσει στον εαυτόν του ή σε άλλον περιουσιακό όφελος βλάπτοντας τρίτον ή σκόπευε να βλάψει άλλον, τιμωρείται με κάθειρξη μέχρι 10 ετών.

Σύγχρονες Τεχνικές Ενσωμάτωσης Γραφημάτων

Τίτλος στην Αγγλική γλώσσα: Recent Graph Embeddings Approaches

Παπαγεωργίου-Χατζηαντωνίου Ελένη

Τριμελής Επιτροπή:

- 1.** Βραχάτης Αριστείδης
- 2.** Πλαγιανάκος Βασίλειος
- 3.** Τασουλής Σωτήριος

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Περίληψη	9
Κεφάλαιο 1 – Εισαγωγή	10
Ορισμοί	13
Κεφάλαιο 2 – Ανάλυση γραφημάτων	15
2.1 Εισαγωγικά	15
2.2 Ενσωμάτωση γραφήματος	16
2.3 Είσοδος Ενσωμάτωσης Γραφήματος	17
2.3.1 Ομοιογενές Γράφημα	17
2.3.2 Ετερογενές Γράφημα	19
2.3.3 Γράφημα με βοηθητικές πληροφορίες	24
2.3.4 Γράφημα Κατασκευασμένο από μη Σχεσιακά Δεδομένα	27
2.4 Έξοδος Ενσωμάτωσης Γραφήματος	29
2.4.1 Ενσωμάτωση Κόμβων	31
2.4.2 Ενσωμάτωση Ακμών	31
2.4.3 Υβριδική Ενσωμάτωση	32
2.4.4 Ενσωμάτωση Ολόκληρου Γραφήματος	34
Κεφάλαιο 3 – Αλγοριθμικές προσεγγίσεις	35
3.1 Γράφημα που ενσωματώνει το ερευνητικό πλαίσιο και την εξέλιξη	35
3.2 Ταξινόμηση μεθόδων ενσωμάτωσης γραφημάτων	36
3.3 Μέθοδοι που βασίζονται στην παραγοντοποίηση	36
3.3.1 Τοπικά Γραμμική Ενσωμάτωση (LLE)	36

3.3.2 Laplacian Eigenmaps	37
3.3.3 Ενσωμάτωση γραφήματος Cauchy	38
3.3.4 Structure Preserving Embedding (SPE)	39
3.3.5 Παραγοντοποίηση γραφήματος (GF).....	39
3.3.6. GraRep	40
3.3.7 HOPE	40
3.3.8 Πρόσθετες παραλλαγές	41
3.4 Μέθοδοι τυχαίου περιπάτου	41
3.4.1 DeepWalk	44
3.4.2 Node2Vec	44
3.4.3 Εκμάθηση ιεραρχικής αναπαράστασης για δίκτυα (HARP).....	45
3.4.4 Τα Walklet	46
3.5 Μέθοδοι που βασίζονται στη βαθιά μάθηση	47
3.5.1 Δομική ενσωμάτωση σε βάθος δικτύου (SDNE)	47
3.5.2 Βαθιά νευρωνικά δίκτυα για εκμάθηση αναπαραστάσεων γραφημάτων (DNGR)	48
3.5.3 Συνελκτικά δίκτυα γραφημάτων (GCN).....	48
3.5.4 Αυτόματοι κωδικοποιητές μεταβλητών γραφημάτων (VGAE).....	49
3.6 Άλλες Μέθοδοι Ενσωμάτωσης	49
Κεφάλαιο 4 – Εφαρμογές.....	52
4.1 Συμπύεση δικτύου	52
4.2 Οπτικοποίηση	53
4.3 Ομαδοποίηση	53

4.4 Πρόβλεψη συνδέσμου	54
4.5 Ταξινόμηση κόμβων	55
Κεφάλαιο 5 – Συμπεράσματα/Μελλοντικές κατευθύνσεις.....	57
5.1 Συμπεράσματα	57
5.2 Μελλοντικές κατευθύνσεις	57
5.3 Υπολογισμός	57
5.4 Προβληματικές Ρυθμίσεις	58
5.5 Τεχνικές.....	58
5.6 Εφαρμογές	59
Βιβλιογραφία	61

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το γράφημα είναι μια αναπαράσταση δεδομένων που μας επιτρέπει να μοντελοποιήσουμε σχεδόν οποιοδήποτε πραγματικό σενάριο. Σε διάφορες εφαρμογές του πραγματικού κόσμου εμφανίζονται γραφήματα, όπως τα κοινωνικά δίκτυα, τα δίκτυα συν-εμφάνισης λέξεων και τα δίκτυα επικοινωνίας. Η ανάλυσή τους δίνει μια εικόνα για τη δομή της κοινωνίας, τη γλώσσα και τα διαφορετικά πρότυπα επικοινωνίας. Πολλές προσεγγίσεις έχουν προταθεί για την εκτέλεση της ανάλυσης. Πρόσφατα, οι μέθοδοι που χρησιμοποιούν την αναπαράσταση κόμβων γραφημάτων στο διανυσματικό χώρο έχουν κερδίσει το ενδιαφέρον της ερευνητικής κοινότητας. Σε αυτή την έρευνα, παρέχεται μια ολοκληρωμένη και δομημένη ανάλυση των διαφόρων τεχνικών ενσωμάτωσης γραφημάτων που προτείνονται στη βιβλιογραφία. Αρχικά εισάγεται η εργασία ενσωμάτωσης και οι προκλήσεις της, όπως η επεκτασιμότητα, η επιλογή διαστάσεων και τα χαρακτηριστικά που πρέπει να διατηρηθούν και οι πιθανές λύσεις τους. Στη συνέχεια παρουσιάζονται τρεις κατηγορίες προσεγγίσεων που βασίζονται σε μεθόδους παραγοντοποίησης, τυχαίους περιπάτους και βαθιά μάθηση, με παραδείγματα σε κάθε κατηγορία και ανάλυση της απόδοσής τους σε διάφορες εργασίες. Η ανάλυση ολοκληρώνεται προτείνοντας ορισμένες πιθανές εφαρμογές και μελλοντικές κατευθύνσεις.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1^ο

Εισαγωγή

Τα δίκτυα πληροφοριών γίνονται πανταχού παρόντα, σε ένα μεγάλο φάσμα εφαρμογών του πραγματικού κόσμου σε μορφές κοινωνικών δικτύων, δικτύων παραπομπών, δικτύων τηλεπικοινωνιών, βιολογικών δικτύων κλπ. Η κλίμακα αυτών των δικτύων κυμαίνεται από εκατοντάδες έως εκατομμύρια ή και δισεκατομμύρια κορυφές (Tang J. et al., 2015). Η ανάλυση των δικτύων πληροφοριών παίζει καθοριστικό ρόλο σε μια ποικιλία αναδυόμενων εφαρμογών σε πολλούς κλάδους. Για παράδειγμα, στα κοινωνικά δίκτυα, η ταξινόμηση χρηστών σε σημαντικές κοινωνικές ομάδες είναι χρήσιμη για πολλές σημαντικές εργασίες. Κάποιες από αυτές τις εργασίες είναι η αναζήτηση χρηστών, η στοχευμένη διαφήμιση και οι συστάσεις. Σε δίκτυα επικοινωνίας, η ανίχνευση κοινοτικών δομών μπορεί να βοηθήσει στην καλύτερη κατανόηση της φήμης διαδικασίας εξάπλωσης. Σε βιολογικά δίκτυα, συνάγοντας αλληλεπιδράσεις μεταξύ των πρωτεϊνών μπορεί να διευκολύνει νέες θεραπείες για ασθένειες.

Ωστόσο, η αποτελεσματική ανάλυση αυτών των δικτύων βασίζεται σε μεγάλο βαθμό στον τρόπο με τον οποίο αντιπροσωπεύονται τα δίκτυα. Συχνά, χρησιμοποιείται ένας διακριτός πίνακας γειτνίασης για την αναπαράσταση ενός δικτύου, ο οποίος καταγράφει μόνο γειτονικές σχέσεις μεταξύ κορυφών. Πράγματι, αυτή η απλή αναπαράσταση δεν μπορεί να ενσωματώσει πιο σύνθετες σχέσεις δομής υψηλότερης τάξης, όπως μονοπάτια, συχνή υποδομή κλπ. Ως αποτέλεσμα, μία τέτοια παραδοσιακή ρουτίνα συχνά κάνει πολλές αναλυτικές εργασίες, υπολογιστικά ακριβές και δυσεπίλυτες σε μεγάλη κλίμακα δικτύων. Λαμβάνοντας ως παράδειγμα την ανίχνευση κοινότητας, οι περισσότεροι υπάρχοντες αλγόριθμοι περιλαμβάνουν τον υπολογισμό του φάσματος αποσύνθεσης ενός πίνακα (Malliaros FD., Vazirgiannis M., 2013) με τουλάχιστον τετραγωνικό χρόνο πολυπλοκότητας ως προς τον αριθμό των κορυφών.

Αυτή η υπολογιστική επιβάρυνση καθιστά δύσκολο να κλιμακωθούν οι αλγόριθμοι δικτύων μεγάλης κλίμακας με εκατομμύρια κορυφές. Πρόσφατα, η εκμάθηση αναπαράστασης δικτύου (NRL) έχει προκαλέσει μεγάλο ερευνητικό ενδιαφέρον. Το NRL στοχεύει να μάθει λανθάνοντες, χαμηλών διαστάσεων αναπαραστάσεις κορυφών δικτύου, με ταυτόχρονη διατήρηση της δομής της τοπολογίας του δικτύου, του περιεχομένου κορυφής και άλλων

παράπλευρων πληροφοριών. Μετά από νέες αναπαραστάσεις κορυφής οι αναλυτικές εργασίες δικτύου μπορούν να γίνουν εύκολα και αποτελεσματικά με την εφαρμογή συμβατικής μηχανής που βασίζεται σε διανύσματα αλγορίθμων εκμάθησης στο νέο χώρο αναπαράστασης. Αυτό παρακάμπτει την αναγκαιότητα εξαγωγής πολύπλοκων αλγορίθμων που εφαρμόζονται απευθείας στο αρχικό δίκτυο. Προηγούμενες εργασίες σχετικά με την εκμάθηση αναπαράστασης δικτύου χρονολογούνται από τις αρχές της δεκαετίας του 2000, όταν οι ερευνητές πρότειναν αλγόριθμους ενσωμάτωσης γραφημάτων ως μέρος των τεχνικών μείωσης διαστάσεων.

Δίνεται ένα σύνολο i.i.d. (ανεξάρτητων και πανομοιότυπα κατανεμημένων – independent and identically distributed) σημείων δεδομένων ως είσοδος στην ενσωμάτωση γραφήματος. Οι αλγόριθμοι υπολογίζουν πρώτα την ομοιότητα μεταξύ σημείων δεδομένων ανά ζεύγη για την κατασκευή ενός γραφήματος συγγένειας, π.χ. k-γραφήματος πλησιέστερου γείτονα και, στη συνέχεια, ενσωματώνουν το γράφημα συγγένειας σε έναν νέο χώρο που έχει πολύ μικρότερη διάσταση. Η ιδέα είναι να βρεθεί μια δομή πολλαπλών χαμηλών διαστάσεων κρυμμένη στην υψηλών διαστάσεων γεωμετρία δεδομένων που αντικατοπτρίζεται από το κατασκευασμένο γράφημα, έτσι ώστε οι συνδεδεμένες κορυφές να διατηρούνται πιο κοντά στο νέο χώρο ενσωμάτωσης. Το Isomap (Tenenbaum J.B., De Silva V., Langford J.C., 2000), η γραμμική τοπική ενσωμάτωση (LLE – Locally Linear Embedding) (Roweis S.T., Saul L.K., 2002) και ο ιδιοχάρτης Laplace (Laplacian Eigenmap) (Belkin M., Niyogi P., 2002) είναι παραδείγματα αλγορίθμων που βασίζονται σε αυτή τη λογική. Ωστόσο, οι αλγόριθμοι ενσωμάτωσης γραφημάτων σχεδιάζονται σε i.i.d. δεδομένα κυρίως για λόγους μείωσης διαστάσεων. Οι περισσότεροι από αυτούς τους αλγόριθμους συνήθως έχουν τουλάχιστον τετραγωνική χρονική πολυπλοκότητα ως προς τον αριθμό των κορυφών, άρα η επεκτασιμότητα είναι ένα σημαντικό ζήτημα όταν εφαρμόζονται σε δίκτυα μεγάλης κλίμακας.

Από το 2008, σημαντικές ερευνητικές προσπάθειες έχουν γίνει για την ανάπτυξη αποτελεσματικής και κλιμακούμενης αναπαράστασης τεχνικών εκμάθησης που έχουν σχεδιαστεί άμεσα για πολύπλοκα πληροφοριακά δίκτυα. Πολλοί αλγόριθμοι NRL, π.χ., (Perozzi B., Al-Rfou R., Skiena S., 2014), (Yang C. et al., 2015), (Zhang D. et al., 2016), (Cao S., Lu W., Xu Q., 2016), έχουν προταθεί για την ενσωμάτωση υπαρκτών δικτύων, παρουσιάζοντας πολλά υποσχόμενη απόδοση για διάφορες εφαρμογές. Αυτοί οι αλγόριθμοι

ενσωματώνουν ένα δίκτυο σε ένα λανθάνον, χαμηλής διάστασης χώρο που διατηρεί την εγγύτητα της δομής και τη συνάφεια χαρακτηριστικών, έτσι ώστε οι αρχικές κορυφές του δικτύου να μπορούν να αναπαρασταθούν ως διανύσματα χαμηλής διάστασης. Προκύπτουν, λοιπόν, συμπαγείς, χαμηλών διαστάσεων διανυσματικές αναπαραστάσεις οι οποίες μπορούν στη συνέχεια να ληφθούν ως χαρακτηριστικά σε οποιαδήποτε μηχανή που βασίζεται σε διανύσματα αλγόριθμων εκμάθησης. Αυτό ανοίγει το δρόμο για ένα ευρύ φάσμα εργασιών ανάλυσης δικτύου που μπορούν να αντιμετωπιστούν εύκολα και αποτελεσματικά στον νέο διανυσματικό χώρο, όπως η ταξινόμηση κόμβων (Khu S. et al., 2007), (Bhagat S., Cormode G., Muthukrishnan S., 2011), η πρόβλεψη συνδέσμων (Lu L., Zhou T., 2011), (Gao S., Denoyer L., Gallinari P., 2011), η ομαδοποίηση (Malliaros FD., Vazirgiannis M., 2013), η σύσταση (Zhang C. et al., 2017), (Xie M. et al., 2016), η αναζήτηση ομοιότητας (Liu Z. et al., 2018) και η οπτικοποίηση (Tang J., Liu J., Mei Q., 2016). Η χρήση διανυσματικής αναπαράστασης για την αναπαράσταση πολύπλοκων δικτύων, έχει πλέον προχωρήσει σταδιακά σε πολλούς άλλους τομείς, όπως η σύσταση σημείου ενδιαφέροντος στον αστικό υπολογισμό (Xie M. et al., 2016) και αναζήτηση γραφημάτων γνώσης (Lin Y. et al., 2015) στη γνώση μηχανικών και συστημάτων βάσεων δεδομένων.

Ορισμοί

Οι ορισμοί που χρησιμοποιούνται σε αυτή την έρευνα μπορούν να βρεθούν στον Πίνακα 1.

Ορισμοί που χρησιμοποιούνται	
Ορισμοί	Περιγραφές
$ \cdot $	Η απόλυτη τιμή ενός σετ
$G=(V,E)$	Γράφημα G με σύνολο κόμβων V και σύνολο ακμών E .
$\hat{G}=(\hat{V},\hat{E})$	Ένα υπογράφημα του γραφήματος G όπου $\hat{V} \subseteq V, \hat{E} \subseteq E$
u_i, e_{ij}	Ένας κόμβος $u_i \in V$ και μία ακμή $e_{ij} \in E$ συνδέουν το u_i και το u_j
A	Ο παρακείμενος πίνακας του G
A_i	Το διάνυσμα της σειράς i του πίνακα A
A_{ij}	Η i -στη γραμμή και j -στη στήλη του πίνακα A
$f_u(u_i), f_e(e_{ij})$	Ο τύπος του κόμβου u_i και της ακμής e_{ij}
T^u, T^e	Το σύνολο τύπου κόμβων και ακμών
$N_k(u_i)$	Οι k κοντινότεροι γείτονες του κόμβου u_i
$X \in \mathbb{R}^{ V \times N}$	Πίνακας χαρακτηριστικών, κάθε σειρά X_i είναι ένα διάνυσμα N -διάστασης για το V_i
y_i, y_{ij}, y_j	Η ενσωμάτωση του κόμβου V_i της ακμής e_{ij} και της δομής $\hat{G}$
$\langle h, r, t \rangle$	Τριπλέτα γραφήματος γνώσης με κεφαλή την οντότητα h , ουρά οντότητα t και η μεταξύ τους σχέση r .
d	Η διάσταση του γραφήματος
$S_{ij}^{(1)}, S_{ij}^{(2)}$	Εγγύτητα μεταξύ πρώτης και δεύτερης τάξης μεταξύ του κόμβου u_i και u_j
c	Ένας καταρράκτης πληροφοριών
$G^c = (V^c, E^c)$	Ένα γράφημα καταρράκτη που υιοθετεί το c .

Πίνακας 1: Ορισμοί που χρησιμοποιούνται

Ορισμός 1: Ένας γράφος είναι ο $G=(V,E)$ όπου $u \in V$ είναι ένας κόμβος και $e \in E$ είναι μια ακμή. Το G συσχετίζεται με μια αντιστοίχιση συνάρτησης τύπου κόμβου $f_u: V \rightarrow T^u$ και μια συνάρτηση αντιστοίχισης τύπου ακμής $f_e: E \rightarrow T^e$.

Τα T^u και T^e υποδηλώνουν το σύνολο των κόμβων και των ακμών αντίστοιχα. Κάθε κόμβος $u_i \in V$ ανήκει σε ένα συγκεκριμένο τύπο π.χ. $f_u(u_i) \in T^u$. Παρομοίως, για τα $e_{ij} \in E$, $f_e(e_{ij}) \in T^e$.

Ορισμός 2: Ένας ομοιογενής γράφος $G_{homo} = (V, E)$ είναι ένας γράφος στον οποίο ισχύει $|T^u| = |T^e| = 1$. Όλοι οι κόμβοι του G και όλες οι ακμές ανήκουν σε έναν τύπο.

Ορισμός 3: Ένας ετερογενής γράφος $G_{hete} = (V, E)$ είναι ένας γράφος στον οποίο $|T^u| > 1$

Και/ή $|T^e| > 1$.

Ορισμός 4: Ένας γράφος γνώσης $G_{know} = (V, E)$ είναι ένας κατευθυνόμενος γράφος του οποίου οι κόμβοι είναι οντότητες και οι ακμές είναι υποκείμενα-ιδιότητες αντικειμένων τριπλών γεγονότων.



Εικόνα 1: Παράδειγμα ενός γράφου γνώσης

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2^ο

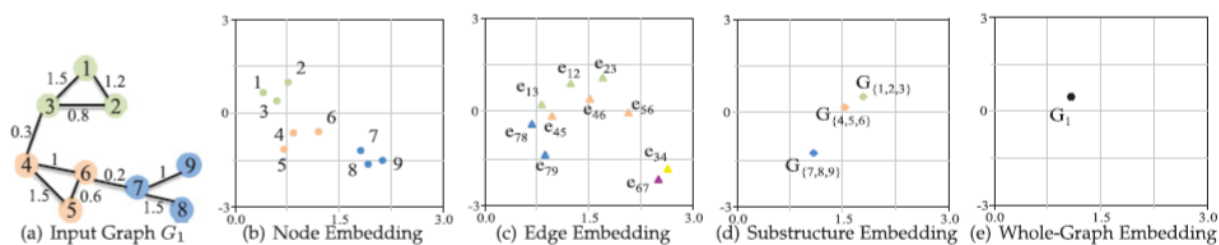
Ανάλυση γραφημάτων

2.1 Εισαγωγικά

Γραφήματα υπάρχουν φυσικά σε μια ευρεία ποικιλία σεναρίων του πραγματικού κόσμου, π.χ. κοινωνικό γράφημα/γράφημα διάχυσης στα μέσα κοινωνικής δικτύωσης, γράφημα παραπομπών σε ερευνητικούς τομείς, κ.λπ. Η ανάλυση αυτών των γραφημάτων παρέχει πληροφορίες για το πώς να γίνει καλή χρήση των πληροφοριών που κρύβονται στα γραφήματα, λαμβάνοντας έτσι σημαντική προσοχή τις τελευταίες δεκαετίες. Η αποτελεσματική ανάλυση γραφημάτων μπορεί να ωφελήσει πολλές εφαρμογές, όπως στην ταξινόμηση κόμβων (Wang X. et al., 2018), ομαδοποίηση κόμβων (Nie F., Zhu W., Li X., 2017), ανάκτηση/σύσταση κόμβου (Zhou C. et al., 2017), πρόβλεψη συνδέσμων (Wei X. et al., 2017), κ.λπ. Για παράδειγμα, αναλύοντας το γράφημα που κατασκευάστηκε με βάση τις αλληλεπιδράσεις των χρηστών σε ένα κοινωνικό δίκτυο (π.χ. retweet/ σχόλιο/ακολουθήστε στο Twitter), οι χρήστες μπορούν να ταξινομηθούν, να εντοπιστούν κοινότητες, να προταθούν φίλοι και να προβλεφθεί εάν θα συμβεί μία αλληλεπίδραση μεταξύ δύο χρηστών. Αν και η ανάλυση γραφημάτων είναι πρακτική και απαραίτητη, οι περισσότερες υπάρχουσες μέθοδοι ανάλυσης γραφημάτων υποφέρουν από τον υψηλό υπολογισμό και κόστος χώρου. Έχουν γίνει πολλές ερευνητικές προσπάθειες που αφιερώθηκαν αποτελεσματικά στη διεξαγωγή της ακριβούς ανάλυσης γραφημάτων. Κάποια παραδείγματα περιλαμβάνουν τα κατανεμημένα δεδομένα γραφήματα πλαισίου επεξεργασίας (π.χ. GraphX (Gonzalez JE. et al., 2014), GraphLab (Low Y. et al., 2012)), νέα αποθήκευση γραφημάτων με αποδοτικό χώρο που επιταχύνει την I/O (είσοδο/έξοδο – Input/Output) και υπολογιστικό κόστος (Kumbar P. Huang HH, 2016) και ούτω καθεξής.

2.2 Ενσωμάτωση γραφήματος

Εκτός από τις παραπάνω στρατηγικές, η ενσωμάτωση γραφήματος παρέχει έναν αποτελεσματικό τρόπο επίλυσης του προβλήματος της ανάλυσης γραφημάτων. Συγκεκριμένα, η ενσωμάτωση γραφήματος μετατρέπει ένα γράφημα σε ένα χώρο χαμηλών διαστάσεων στον οποίο διατηρούνται οι πληροφορίες του γραφήματος. Με την αναπαράσταση ενός γραφήματος (ή ένα σύνολο γραφημάτων) ως χαμηλών διαστάσεων διάνυσμα, οι αλγόριθμοι γραφημάτων μπορούν στη συνέχεια να εφαρμοστούν αποτελεσματικά. Η είσοδος της ενσωμάτωσης γραφήματος ποικίλλει σε διαφορετικά σενάρια, επομένως υπάρχουν διάφοροι τύποι γραφημάτων εισόδου (π.χ. ομοιογενές γράφημα, ετερογενές γράφημα, χαρακτηριστικό γράφημα, κ.λπ.). Η έξοδος της ενσωμάτωσης γραφήματος είναι ένα διάνυσμα χαμηλής διάστασης που αντιπροσωπεύει ένα μέρος του γραφήματος (ή ολόκληρο γράφημα). Δηλαδή, σύμφωνα με διαφορετικές ανάγκες, μπορεί να αντιπροσωπευτεί ένας κόμβος/ακμή/υποδομή/ολόγραμμα ως διάνυσμα χαμηλής διάστασης. Στις αρχές της δεκαετίας του 2000, υπήρχαν αλγόριθμοι ενσωμάτωσης γραφημάτων σχεδιασμένοι κυρίως για να μειώνουν την υψηλή διάσταση των μη σχεσιακών δεδομένων, υποθέτοντας ότι τα δεδομένα βρίσκονται σε πολλαπλή χαμηλή διάσταση. Δίνεται ένα σύνολο χαρακτηριστικών μη σχεσιακών υψηλών διαστάσεων δεδομένων και κατασκευάζεται ένα γράφημα ομοιότητας με βάση το ζευγάρι ομοιότητας χαρακτηριστικών. Στη συνέχεια, κάθε κόμβος στο γράφημα είναι ενσωματωμένος σε χώρο χαμηλών διαστάσεων όπου οι συνδεδεμένοι κόμβοι είναι πιο κοντά ο ένας στον άλλο.



Εικόνα 2: Ένα παράδειγμα παιχνιδιού για την ενσωμάτωση ενός γραφήματος σε δισδιάστατο χώρο με διαφορετική ευαισθησία. Το $G_{1,2,3g}$ υποδηλώνει την υποδομή που περιέχει τους κόμβους v_1, v_2, v_3 .

Το πρόβλημα της ενσωμάτωσης γραφημάτων σχετίζεται με δύο παραδοσιακά ερευνητικά προβλήματα, την ανάλυση γραφημάτων (Satish N. et al., 2014) και την

αναπαράσταση μάθησης (Bengio Y., Courville AC., Vincent P., 2013). Ειδικότερα, οι στόχοι ενσωμάτωσης γραφημάτων αναπαριστούν ένα γράφημα ως διανύσματα χαμηλών διαστάσεων ενώ διατηρούνται οι δομές γραφημάτων. Από τη μια πλευρά, η ανάλυση γραφήματος στοχεύει στην εξόρυξη χρήσιμων πληροφοριών από τα δεδομένα του γραφήματος. Από την άλλη, η εκμάθηση αναπαράστασης αποκτά αναπαραστάσεις δεδομένων που διευκολύνουν την εξαγωγή χρήσιμων πληροφοριών κατά την κατασκευή ταξινομητών ή άλλων προβλέψεων (Bengio Y., Courville AC., Vincent P., 2013). Η ενσωμάτωση γραφημάτων έγκειται στην επικάλυψη των δύο προβλημάτων και επικεντρώνεται στην εκμάθηση αναπαράστασης χαμηλών διαστάσεων.

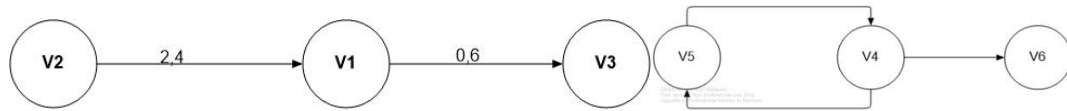
2.3 Είσοδος ενσωμάτωσης γραφήματος

Η είσοδος ενός αλγορίθμου ενσωμάτωσης γραφήματος είναι ένα γράφημα. Σε αυτήν την εργασία, διαιρείται το γράφημα εισόδου σε τέσσερις κατηγορίες, συμπεριλαμβανομένων των ομοιογενούς γραφήματος, ετερογενούς γραφήματος, γράφημα με βοηθητικές πληροφορίες και γράφημα κατασκευασμένο από μη σχεσιακά δεδομένα. Διαφορετικοί τύποι ενσωμάτωσης εισόδου φέρουν διαφορετικές πληροφορίες που πρέπει να διατηρηθούν στον ενσωματωμένο χώρο και έτσι θέτουν διαφορετικές προκλήσεις στο πρόβλημα ενσωμάτωσης γραφήματος. Για παράδειγμα, κατά την ενσωμάτωση, ένα γράφημα που περιέχει μόνο δομικές πληροφορίες, οι συνδέσεις μεταξύ των κόμβων είναι ο στόχος που πρέπει να διατηρηθεί. Ωστόσο, για ένα γράφημα με ετικέτα κόμβου ή πληροφορίες χαρακτηριστικών, οι βοηθητικές πληροφορίες παρέχουν την ιδιότητα γραφήματος από άλλη προοπτική, και ως εκ τούτου μπορεί επίσης να ληφθούν υπόψη κατά τη διάρκεια της ενσωμάτωσης. Στη συνέχεια, εισάγονται αυτοί οι τέσσερις τύποι γραφημάτων εισόδου και συνοψίζονται οι προκλήσεις που αντιμετωπίζει σε κάθε ρύθμιση εισαγωγής.

2.3.1 Ομοιογενές Γράφημα

Η πρώτη κατηγορία γραφήματος εισόδου είναι το ομοιογενές γράφημα (Ορισμός 2), στο οποίο και οι δύο, κόμβοι και ακμές, ανήκουν σε ένα μόνο τύπο αντίστοιχα. Το ομοιογενές

γράφημα μπορεί να κατηγοριοποιηθεί περαιτέρω ως σταθμισμένο και μη σταθμισμένο γράφημα, καθώς και ως κατευθυνόμενο και μη κατευθυνόμενο γράφημα. Το σταθμισμένο γράφημα είναι ένα γράφημα του οποίου οι ακμές έχουν βάρη και το κατευθυνόμενο γράφημα είναι ένα γράφημα του οποίου οι ακμές έχουν κατεύθυνση. Το μη σταθμισμένο γράφημα είναι ένα γράφημα του οποίου οι ακμές δεν έχουν βάρη και το μη κατευθυνόμενο γράφημα αντίστοιχα είναι ένα γράφημα του οποίου οι ακμές δεν έχουν κατεύθυνση.



Σχήμα 2: α) Σταθμισμένο και μη κατευθυνόμενο γράφημα και β) Κατευθυνόμενο και μη σταθμισμένο γράφημα

Το μη κατευθυνόμενο και μη σταθμισμένο ομοιογενές γράφημα είναι η πιο βασική ρύθμιση εισόδου ενσωμάτωσης γραφήματος. Κάποιες από τις μελέτες που λειτουργούν κάτω από αυτό το πλαίσιο, π.χ., (Wang X. et al., 2018), (Zhao X et al., 2013), (Perozzi B., Al-Rfou R., Skiena S., 2014), (Man T. et al., 2016), (Pimentel T., Veloso A., Ziviani N., 2017), αντιμετωπίζουν όλους τους κόμβους και τα άκρα εξίσου, καθώς μόνο στα βασικά διατίθενται δομικές πληροφορίες του γραφήματος εισόδου. Διαισθητικά, τα βάρη και οι κατευθύνσεις των άκρων προμηθεύουν περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το γράφημα και μπορεί να βοηθήσουν στην αναπαράσταση του γραφήματος με μεγαλύτερη ακρίβεια στον ενσωματωμένο χώρο. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 2α), το $v1$ θα πρέπει να ενσωματωθεί πιο κοντά στο $v2$ από $v3$ επειδή το βάρος της ακμής $e_{1,2}$ είναι μεγαλύτερο. Ομοίως, στο Σχήμα 2b) το $v4$ θα πρέπει να ενσωματωθεί πιο κοντά στο $v5$ παρά στο $v6$ καθώς το $v4$ και το $v5$ συνδέονται και προς τις δύο κατευθύνσεις. Οι παραπάνω πληροφορίες έχουν χαθεί στο μη σταθμισμένο και μη κατευθυνόμενο γράφημα. Παρατηρώντας τα πλεονεκτήματα της εκμετάλλευσης της ιδιότητας βάρους και κατεύθυνσης από τις άκρες του γραφήματος, ξεκινά η κοινότητα ενσωμάτωσης γραφήματος για να εξερευνήσει το σταθμισμένο ή/και το κατευθυνόμενο γράφημα. Μερικές έρευνες εστιάζουν σε μία μόνο ιδιότητα γραφήματος, δηλαδή σε οποιαδήποτε ακμή βάρος ή κατεύθυνση άκρων. Το σταθμισμένο γράφημα

εξετάζεται στα (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016), (Cao S., Lu W., Xu Q., 2015), (Tian T. et al., 2014), (Cao S., Lu W., Xu Q., 2016), (Ahmed A. et al., 2013), (Jin Z. et al., 2016), όπου συνδέονται κόμβοι από άκρες υψηλότερου βάρους και ενσωματώνονται πιο κοντά η μία στην άλλη.

Ωστόσο, η δουλειά τους εξακολουθεί να περιορίζεται σε μη σκηνοθετημένες γραφικές παραστάσεις. Από την άλλη, γίνεται διάκριση της κατεύθυνσης των άκρων κατά τη διαδικασία ενσωμάτωσης και διατηρούνται οι πληροφορίες κατεύθυνσης στον ενσωματωμένο χώρο. Ένα παράδειγμα του κατευθυνόμενου γραφήματος είναι το γράφημα του κοινωνικού δικτύου, π.χ., (Liu L. et al., 2016). Κάθε χρήστης έχει followership και με άλλους χρήστες. Ωστόσο, οι πληροφορίες βάρους είναι μη διαθέσιμες για τους συνδέσμους χρηστών κοινωνικής δικτύωσης. Πρόσφατα, προτάθηκε ένας γενικότερος αλγόριθμος ενσωμάτωσης γραφήματος, στον οποίο λαμβάνονται υπόψη οι ιδιότητες βάρους και κατεύθυνσης. Αυτοί οι αλγόριθμοι, λοιπόν, (π.χ., (Zhou C. et al., 2017), (Tang T. et al., 2015), (Grover A., Leskovec J., 2016)) μπορούν να επεξεργαστούν και κατευθυνόμενο και μη, καθώς και σταθμισμένο και μη σταθμισμένο γράφημα.

Μία πρόκληση είναι το πώς να αποτυπωθεί η ποικιλομορφία των μοτίβων συνδεσιμότητας που παρατηρείται σε γραφήματα. Δεδομένου ότι είναι διαθέσιμες μόνο δομικές πληροφορίες σε ομοιογενή γραφήματα, η πρόκληση ενσωμάτωσης ομοιογενούς γραφήματος έγκειται στον τρόπο διατήρησης αυτών των μοτίβων συνδεσιμότητας που παρατηρούνται στα γραφήματα εισόδου κατά την ενσωμάτωση.

2.3.2 Ετερογενές Γράφημα

Η δεύτερη κατηγορία εισόδου είναι το ετερογενές γράφημα (Ορισμός 3). Ένα ετερογενές γράφημα είναι ένα ειδικό είδος δικτύου πληροφοριών, που περιέχει είτε πολλαπλούς τύπους κόμβων είτε πολλαπλούς τύπους ακμών.

- Community-based Question Answering cQA

Οι Ιστότοποι απαντήσεων σε ερωτήσεις (Community-based Question Answering cQA) είναι μια υπηρεσία crowdsourcing η οποία βασιζόμενη στο Διαδίκτυο επιτρέπει στους χρήστες

να δημοσιεύσουν ερωτήσεις σε έναν ιστότοπο, οι οποίες στη συνέχεια απαντώνται από άλλους χρήστες (Fang H. et al., 2016). Πιο συγκεκριμένα, υπάρχουν διαφορετικοί τύποι κόμβων σε ένα γράφημα cQA, π.χ. ερώτηση, απάντηση, χρήστης. Οι υπάρχοντες μέθοδοι ενσωμάτωσης γραφήματος cQA διακρίνονται μεταξύ τους σε ότι αφορά τους συνδέσμους που εκμεταλλεύονται όπως συνοψίζονται στον Πίνακα 2, όπου (i,j,k,o,p) υποδηλώνει ότι η j απάντηση που παρέχεται από τον χρήστη k λαμβάνει περισσότερες ψήφους (δηλ. επιδοκimasίες) από την άλλη απάντηση o του χρήστη p για την ερώτηση i.

Αλγόριθμοι εμπέδωσης γραφήματος για cQA	
GE Αλγόριθμος	Εκμεταλλεζόμενοι σύνδεσμοι
(Z. Zhao, Q. Yang, D. Cai, X. He, and Y. Zhuang)	Χρήστης-χρήστης, χρήστης – ερώτηση
(H. Lu and M. Kong)	Χρήστης-χρήστης, χρήστης – ερώτηση, ερώτηση – απάντηση
(Fang H. et al., 2016)	Χρήστης – χρήστης, ερώτηση – απάντηση, χρήστης – απάντηση
(Z. Zhao, H. Lu, V. W. Zheng, D. Cai, X. He, and Y. Zhuang)	Ασύμμετροι ακόλουθοι σύνδεσμοι χρηστών, μία διατεταγμένη πλειάδα (i,j,k,o,p)

Πίνακας 2: Αλγόριθμοι εμπέδωσης γραφήματος για cQA

Οι Ιστότοποι απαντήσεων σε ερωτήσεις κοινότητας (cQA) όπως το Yahoo Answer και το Quora είναι σημαντικές πηγές γνώσεων. Επιτρέπουν στους χρήστες να υποβάλλουν ερωτήσεις και απαντήσεις που καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα θεμάτων. Αυτοί οι ιστότοποι συχνά οργανώνουν ένα περιεχόμενο που δημιουργείται από τους χρήστες με τη μορφή ερώτησης που ακολουθείται από λίστα υποψηφίων απαντήσεων. Με την πάροδο του χρόνου, ένας μεγάλος αριθμός των ζευγών ερωτήσεων/απαντήσεων που προέρχονται από το συσσωρευμένο πλήθος, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να απαντήσει αυτόματα μια νέα ερώτηση που υποβλήθηκε. Για την πλήρη χρήση της γνώσης που είναι αποθηκευμένη στα συστήματα cQA, η εργασία επιλογής cQA έχει λάβει μεγάλη προσοχή πρόσφατα. Η εργασία επιλογής cQA στοχεύει στην

αυτόματη ανάκτηση αρχειοθετημένων απαντήσεων που σχετίζονται με μια νέα υποβληθείσα ερώτηση.

Επειδή πολλοί χρήστες τείνουν να υποβάλλουν νέες ερωτήσεις αντί να ψάχνουν στις υπάρχουσες ερωτήσεις (Nakov M., Guzman 2016), ένας μεγάλος αριθμός ερωτήσεων εμφανίζεται ξανά και μπορεί να έχουν ήδη απαντηθεί από προηγούμενο περιεχόμενο. Υπάρχουν πολλές προκλήσεις για αυτό το έργο, μεταξύ άλλων και το λεξιλογικό κενό το οποίο είναι θεμελιώδες και διαφοροποιεί αυτό το καθήκον από άλλες εργασίες ανάκτησης πληροφοριών γενικής χρήσης. Το λεξιλογικό κενό περιγράφει το φαινόμενο όπου το κείμενο σε ερωτήσεις μπορεί να οδηγήσει σε μάλλον αιτιολογικά συσχετισμένο περιεχόμενο στις απαντήσεις, παρά σημασιολογικά σχετικό περιεχόμενο όπως η συνωνυμία. Με άλλες λέξεις, μια πρόταση που μοιράζεται πολλές επικαλυπτόμενες λέξεις με την ερώτηση, μπορεί να μην είναι απαραίτητα μια σχετική απάντηση.

Για την αντιμετώπιση του προβλήματος του λεξιλογικού χάσματος, πολλές μέθοδοι μοντελοποιούν ρητά τις συσχετίσεις μεταξύ τμημάτων κειμένου σε ερωτήσεις και απαντήσεις και πλαισιώνουν αυτήν την εργασία ως πρόβλημα δυαδικής ταξινόμησης. Κάτω από αυτήν τη ρύθμιση, κάθε ζεύγος ερώτησης/απάντησης επισημαίνεται ως σχετικό ή άσχετο. Συνεπώς, η εργασία επιλογής cQA μπορεί να προσεγγιστεί προβλέποντας πρώτα τη συνάφεια/βαθμολογία εμπιστοσύνης μιας απάντησης υποψηφίου σε μια ερώτηση και, στη συνέχεια, αναβαθμίζει αυτές τις απαντήσεις για να βρει τις πιο κατάλληλες. Όταν αντιμετωπίζεται η επιλογή cQA ως καθήκον δυαδικής ταξινόμησης, ένα πρακτικό ζήτημα είναι η ανισορροπία της ετικέτας. Πρώτον, ο συνολικός αριθμός των σχετικών απαντήσεων είναι φυσικά μικρότερος από αυτόν των μη σχετικών απαντήσεων. Για παράδειγμα, μόνο στο σύνολο δεδομένων SemEval (2016) το 9,3% των συνολικών απαντήσεων είναι σχετικές. Στο SemEval (2017) σύνολο δεδομένων, ο αριθμός είναι ακόμη μικρότερος: 2,8%.

Επιπλέον, προκειμένου να χρησιμοποιούνται καλύτερα τα δεδομένα με ετικέτα και να παρέχεται περισσότερη εκπαίδευση σε ζεύγη ερώτησης/απάντησης, πολλές έρευνες αυξάνουν τα αρνητικά δείγματα με τυχαία σύζευξη μιας ερώτησης με μια απάντηση από διαφορετικό νήμα ερωτήσεων. Η υποκείμενη υπόθεση είναι ότι οι απαντήσεις από άλλες ερωτήσεις είναι απίθανο να θεωρηθούν σχετικές με την τρέχουσα ερώτηση. Ενώ μια τέτοια αύξηση δεδομένων μπορεί να προσφέρει πολύ περισσότερα δείγματα εκπαίδευσης, επίσης ενισχύει το πρόβλημα

της ανισορροπίας της ετικέτας. Εμπνευσμένο από το Generative Adversarial Nets (GANs) (Goodfellow et al. 2014), παρουσιάζεται μια αντίπαλη στρατηγική εκπαίδευσης, η οποία χρησιμοποιεί ένα γενετικό μοντέλο G για να επιλεγεί ένα μικρό υποσύνολο προκλήσεων αρνητικών δειγμάτων.

Ένας αρκετός αριθμός αρνητικών δειγμάτων, ειδικά αυτά που δημιουργούνται από τυχαία σύζευξη, μπορούν εύκολα να ταξινομηθούν (π.χ. τα θέματα των απαντήσεων είναι εντελώς άσχετα με τις ερωτήσεις), συμβάλλοντας ελάχιστα στις κλίσεις. Αντίθετα, τα δείγματα που επιλέγονται από ένα παραγωγικό μοντέλο αναμένεται να είναι πιο απαιτητικά και είναι πιο πιθανό να ξεγελάσουν το μοντέλο ταξινόμησης D και, κατά συνέπεια, να οδηγήσουν σε μεγαλύτερες κλίσεις. Με εναλλάξ βελτιστοποίηση του γενεσιουργού μοντέλου και του μοντέλου ταξινόμησης, είναι δυνατή η απόκτηση ενός πιο ισχυρού και ακριβούς ταξινομητή.

- **Δίκτυα πολυμέσων**

Ένα δίκτυο πολυμέσων είναι ένα δίκτυο που περιέχει δεδομένα πολυμέσων, π.χ. εικόνα, κείμενο κ.λπ. Για παράδειγμα, και τα δύο (Chang S. et al., 2015) και (Zhang H. et al., 2016) ενσωματώνουν τα γραφήματα που περιέχουν δύο τύπους κόμβων (εικόνα και κείμενο) και τρεις τύπους συνδέσμων (η συνύπαρξη εικόνας-εικόνας, κειμένου-κειμένου και εικόνας κειμένου). Οι Geng et al. (Geng X. et al., 2015) επεξεργάστηκαν μια κοινωνική επιμέλεια με τους χρήστες κόμβου και κόμβου εικόνας. Εκμεταλλεύτηκαν συνδέσμους εικόνας χρήστη για ενσωμάτωση χρηστών και εικόνων στον ίδιο χώρο ώστε να μπορούν να βρίσκουν απευθείας σύγκριση για σύσταση εικόνας. Στο (Wu F. et al., 2016), ένα κλικ θεωρείται γράφημα που περιέχει εικόνες και ερωτήματα κειμένου.

- **Γραφήματα Γνώσης**

Σε ένα γράφημα γνώσης (Ορισμός 4), οι οντότητες (κόμβοι) και οι σχέσεις (ακμές) είναι συνήθως διαφορετικού τύπου. Για παράδειγμα, σε μια ταινία με σχετικές γνώσεις γραφημάτων που κατασκευάστηκε από το Freebase (Bollacker K. et al., 2008), οι τύποι των οντοτήτων μπορεί να είναι «σκηνοθέτης», «ηθοποιός», «ταινία» κ.λπ. Τα είδη των σχέσεων μπορεί να είναι «παραγωγή», «σκηνοθεσία», «δράση». Έχουν γίνει πολλές προσπάθειες αφιερωμένες στην ενσωμάτωση γραφημάτων γνώσης (π.χ., (Feng J. et al., 2016), (Wu F. et al.,

2015), (Shi B., Weninger T., 2017)). Υπάρχουν επίσης και άλλα ετερογενή γραφήματα. Για παράδειγμα, (Ochi M. et al., 2016) και (Ochi M. et al., 2016) εργάζονται στο γράφημα δεδομένων κινητικότητας, στο οποίο οι κόμβοι σταθμών (s), ρόλου (r) και εταιρείας (c) συνδέονται με τρεις τύπους συνδέσμων (s-s, s-r, s-c).

Οι Zhao et al. (Zhao Y., Chang A., Sarma A.D., 2015) παρουσίασαν την ενσωμάτωση γραφήματος στη Wikipedia με τρεις τύπους κόμβων (οντότητα (e), κατηγορία (γ) και λέξη (w)) και τρεις τύπους ακμών (e-e, e-c, w-w). Εκτός από τα παραπάνω γραφήματα, υπάρχουν μερικά γενικά ετερογενή γραφήματα στα οποία οι τύποι των κόμβων και οι ακμές δεν ορίζονται συγκεκριμένα (Liu Z. et al., 2018), (Gui H. et al., 2016), (Dong Y., Chawla N.V., Swami A., 2017).

Πρόκληση

Πώς να εξερευνηθεί η k-συνέπεια μεταξύ διαφορετικών τύπων αντικειμένων και πώς να αντιμετωπιστούν οι ανισορροπίες των αντικειμένων που ανήκουν σε διαφορετικούς τύπους, αν υπάρχουν; Διαφορετικοί τύποι αντικειμένων (π.χ. κόμβοι, άκρες) ενσωματώνονται στον ίδιο χώρο ετερογενούς ενσωμάτωσης γραφήματος. Ο τρόπος με τον οποίο μπορεί να εξερευνηθεί η k-συνέπεια μεταξύ τους είναι πρόβλημα. Επιπλέον, εκεί μπορεί να υπάρχει ανισορροπία μεταξύ αντικειμένων διαφορετικών τύπων. Αυτή η ασάφεια των δεδομένων θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά την ενσωμάτωση γραφημάτων με βοηθητικές πληροφορίες. Η τρίτη κατηγορία γραφήματος εισόδου περιέχει βοηθητικές πληροφορίες ενός κόμβου/ακμής/ολόγραμμα εκτός από τις δομικές σχέσεις των κόμβων (δηλαδή, E). Γενικά, υπάρχουν πέντε διαφορετικοί τύποι βοηθητικών πληροφοριών όπως παρατίθενται στον Πίνακα 3. 3

2.3.3 Γράφημα με βοηθητικές πληροφορίες

Η τρίτη κατηγορία γραφήματος εισόδου, εκτός από τις δομικές σχέσεις των κόμβων, περιέχει βοηθητικές πληροφορίες ενός κόμβου/ακμής/ολόκληρου γραφήματος. Γενικά, υπάρχουν πέντε διαφορετικοί τύποι βοηθητικών πληροφοριών όπως παρατίθενται στον Πίνακα 3.

Σύγκριση διαφορετικών τύπων βοηθητικών πληροφοριών σε γράφους	
Βοηθητικές πληροφορίες	Περιγραφή
Ετικέτα	Κατηγορηματική τιμή κόμβου/ακμής όπως είναι η κλάση της πληροφορίας
Ιδιότητες	Κατηγορηματική ή συνεχή τιμή ενός κόμβου/ακμής , π.χ. πληροφορίες ιδιοκτησίας
Χαρακτηριστικά κόμβου	Κείμενο ή εικόνες που χαρακτηρίζουν έναν κόμβο
Πληροφορίες Μετάδοσης	Τα μονοπάτια που ακολουθεί η πληροφορία που μεταδίδεται στο γράφο
Βάση γνώσης	Κείμενο που συσχετίζεται με/ή τα γεγονότα ανάμεσα σε σενάρια γνώσης

Πίνακας 3: Σύγκριση διαφορετικών τύπων βοηθητικών πληροφοριών σε γράφους

Ετικέτα

Οι κόμβοι με διαφορετικές ετικέτες θα πρέπει να ενσωματωθούν μακριά ο ένας από τον άλλο. Για να επιτευχθεί αυτό, οι (Li J., Zhu J., Zhang B., 2016) και (Tu C. et al., 2016) βελτιστοποιούν από κοινού τη συνάρτηση στόχου ενσωμάτωσης μαζί με συνάρτηση ταξινομητή. Οι Shervashidze et al. (Shervashidze N. et al., 2011) εξέτασαν την ομοιότητα μεταξύ κόμβων με διαφορετικές ετικέτες. Οι Nikoletzos et al. (Nikolentzos G., Meledianos P., Vazirgiannis M., 2017) εξέτασαν τις ετικέτες κόμβων και τις ετικέτες ακμών κατά τον υπολογισμό διαφορετικών πυρήνων γραφήματος. Οι Guo et al. (Guo S. et al., 2015) και (Guo

S. et al., 2017) ενσωμάτωσαν ένα γράφημα γνώσης, στο οποίο η οντότητα (κόμβος) έχει σημασιολογική κατηγορία. Οι Xie et al. (Xie R. et al., 2016) ενσωμάτωσαν ένα πιο περίπλοκο γράφημα γνώσης με τις κατηγορίες οντοτήτων σε μια ιεραρχική δομή, π.χ., η κατηγορία «βιβλίο» έχει δύο υποκατηγορίες «συγγραφέας» και «γραπτό έργο».

Ιδιότητες

Σε αντίθεση με μια ετικέτα, μια τιμή ιδιότητας μπορεί να είναι διακριτή ή συνεχής. Για παράδειγμα, το (Dai H., Dai B., Song L., 2016) ενσωματώνει ένα γράφημα με διακριτή τιμή χαρακτηριστικού κόμβου (π.χ. τον ατομικό αριθμό σε ένα μόριο). Αντίθετα, το (X. Wei, L. Xu, B. Cao, and P. S. Yu, 2017) αντιπροσωπεύει το χαρακτηριστικό κόμβου ως συνεχές διάνυσμα υψηλών διαστάσεων (π.χ. χαρακτηριστικό χρήστη στα κοινωνικά δίκτυα). Οι Niepert et al. (Niepert M., Ahmed M., Kutzjov K., 2016) ασχολούνται και με τα δύο διακριτά και συνεχή χαρακτηριστικά για κόμβους και ακμές.

Χαρακτηριστικά κόμβου

Τα περισσότερα χαρακτηριστικά κόμβου είναι κείμενα, τα οποία παρέχονται είτε ως διάνυσμα χαρακτηριστικών για κάθε κόμβο είτε ως ένα έγγραφο. Για το τελευταίο, τα έγγραφα υφίστανται περαιτέρω επεξεργασία για την εξαγωγή διανυσμάτων χαρακτηριστικών με χρήση τεχνικών όπως η συλλογή λέξεων, η μοντελοποίηση θεμάτων, ή αντιμετωπίζοντας τη «λέξη» ως έναν τύπο κόμβου. Τύποι χαρακτηριστικών κόμβων, όπως τα χαρακτηριστικά εικόνας, είναι επίσης πιθανοί. Τα χαρακτηριστικά κόμβου ενισχύουν την απόδοση ενσωμάτωσης γραφήματος παρέχοντας πλούσιες και μη δομημένες πληροφορίες, οι οποίες είναι διαθέσιμες σε πολλά γραφήματα του πραγματικού κόσμου. Επιπλέον, αυτό καθιστά δυνατή την επαγωγική ενσωμάτωση γραφήματος (Yang Z., Cohen W.W., Salakhutdinov R., 2016).

Πληροφορίες Μετάδοσης

Ένα παράδειγμα διάδοσης πληροφοριών είναι ένα "retweet" στο Twitter. Στο (Li C. et al., 2017), δίνεται ένα γράφημα δεδομένων $\bar{G} = (V, E)$, ένα γράφημα καταρράκτη $G^c =$

(V^c, E^c) όπου έχει κατασκευαστεί για κάθε καταρράκτη c , όπου V^c είναι οι κόμβοι που έχουν υιοθετήσει το c και E^c είναι οι ακμές με τα δύο άκρα στο V^c . Στη συνέχεια ενσωματώνουν το G^c για την πρόβλεψη της αύξησης του μεγέθους του καταρράκτη. Οι Zhao N. et al., 2016 στοχεύουν στην ενσωμάτωση των πληροφοριών χρηστών και περιεχομένου, έτσι ώστε η ομοιότητα μεταξύ της ενσωμάτωσής τους να υποδηλώνει πιθανότητα διάχυσης. Το Topo-LSTM (Whang J. et al., 2017) δεν θεωρεί έναν καταρράκτη απλώς ως μια ακολουθία κόμβων, αλλά δυναμικά κατευθυνόμενα μη κυκλικά γραφήματα για ενσωμάτωση.

Βάση γνώσης

Οι δημοφιλείς βάσεις γνώσεων περιλαμβάνουν τα Wikipedia (Yang Z. et al., 2016), Freebase (Bollacker K. et al., 2008), YAGO (Suchanek F.M. et al., 2007), DBpedia (Bizer C. et al., 2009), κ.λπ. Για παράδειγμα στη Wikipedia, οι έννοιες είναι οντότητες που προτείνονται από χρήστες και κείμενο είναι το άρθρο που σχετίζεται με την οντότητα. Οι Yang et al. (Yang Z. et al., 2016) χρησιμοποίησαν τη βάση γνώσεων για να μάθουν ένα κοινωνικό γράφημα γνώσεων από ένα κοινωνικό δίκτυο συνδέοντας τον κάθε ένα χρήστη του κοινωνικού δικτύου σε ένα δεδομένο σύνολο εννοιών γνώσης. Οι Xiong et al. (Xiong C., Power R., Callan J., 2017) αντιπροσωπεύουν ερωτήματα και έγγραφα στο χώρο οντοτήτων (παρέχεται από μια γνωσιακή βάση) έτσι ώστε η ακαδημαϊκή μηχανή αναζήτησης να μπορεί να καταλάβει την έννοια της έρευνας σε ερωτήματα.

Άλλοι τύποι βοηθητικών πληροφοριών περιλαμβάνουν το check-in χρηστών δεδομένων (χρήστης-τοποθεσία) (Alharbi B., Zhang X., 2016), λίστα κατάταξης προτιμήσεων στοιχείων χρήστη (Zhang Q., Wang H., 2016), κ.λπ. Σημειώνεται ότι οι βοηθητικές πληροφορίες δεν είναι απλώς περιορισμένες σε έναν τύπο. Για παράδειγμα, οι (Yang Z. et al., 2016) και (Kipf T.N., Welling M., 2017) λαμβάνουν υπόψη και τα δύο label και πληροφορίες χαρακτηριστικών κόμβου. Οι Pan et al. (Pan S et al., 2016) χρησιμοποιούν τα περιεχόμενα του κόμβου και ετικέτες για να βοηθήσουν τη διαδικασία ενσωμάτωσης γραφήματος.

Πρόκληση

Πώς να ενσωματωθούν οι πλούσιες και μη δομημένες πληροφορίες έτσι ώστε οι εκμαθημένες ενσωματώσεις να αντιπροσωπεύουν και τα δύο, την τοπολογική και τη διακριτική δομή ως προς τις βοηθητικές πληροφορίες; Οι βοηθητικές πληροφορίες συμβάλουν στον καθορισμό της ομοιότητας των κόμβων εκτός από τις δομικές πληροφορίες γραφήματος. Η πρόκληση της ενσωμάτωσης γραφήματος με βοηθητικές πληροφορίες είναι ο συνδυασμός αυτών των δύο πηγών πληροφοριών για να οριστεί και να διατηρηθεί η ομοιότητα του κόμβου.

2.3.4 Γράφημα κατασκευασμένο από μη σχεσιακά δεδομένα

Η τελευταία κατηγορία γραφήματος εισόδου δεν παρέχεται, αλλά κατασκευάζεται από τα μη σχεσιακά δεδομένα εισόδου από διαφορετικές στρατηγικές. Αυτό συμβαίνει συνήθως όταν τα δεδομένα εισόδου εικάζεται ότι βρίσκονται σε πολλαπλές χαμηλές διαστάσεις.

Στις περισσότερες περιπτώσεις, η είσοδος είναι ένας πίνακας χαρακτηριστικών $X \in \mathbb{R}^{|V| \times N}$ όπου κάθε σειρά X_i είναι ένα N -διάστατο διάνυσμα χαρακτηριστικών για το i -οστο παράδειγμα εκπαίδευσης. Κατασκευάζεται ένας πίνακας ομοιότητας S με τον υπολογισμό του S_{ij} χρησιμοποιώντας την ομοιότητα μεταξύ (X_i, X_j) . Υπάρχουν συνήθως δύο τρόποι για να δημιουργηθεί ένα γράφημα από S . Ένας απλός τρόπος είναι να αντιμετωπιστεί απευθείας το S ως γειτονική μήτρα ενός άορατου γραφήματος (Hofmann T., Buhmann J.M., 1994). Ωστόσο, (Hofmann T., Buhmann J.M., 1994) αντιμετωπίζεται με βάση την Ευκλείδεια απόσταση χωρίς να θεωρεί γειτονικούς τους κόμβους κατά τον υπολογισμό του S_{ij} . Εάν το X βρίσκεται πάνω ή κοντά σε μια καμπύλη πολλαπλότητας, η απόσταση μεταξύ των X_i και X_j που υπολογίζεται πάνω από την πολλαπλότητα είναι πολύ μεγαλύτερη από την Ευκλείδεια απόστασή τους (Nishana S.S., Surendran S., 2013). Για την αντιμετώπιση αυτών των ζητημάτων, άλλες μέθοδοι (π.χ., (Han Y., Shen Y., 2016), (Yin M., Gao J., Lin Z., 2016), (Tang M., Nie F., Jain R., 2016)) κατασκευάζουν ένα γράφημα K κοντινότερου γείτονα (KNN). Υπολογίζεται το S πρώτα και μετά ο πίνακας γειτνίασης A με βάση το γράφημα KNN. Για παράδειγμα, το Isomap (Balasubramanian M., Schwartz E.L., 2002) ενσωματώνει τη γεωδαισιακή απόσταση στο A , κατασκευάζοντας αρχικά ένα γράφημα KNN από S , και στη συνέχεια βρίσκοντας τη συντομότερη διαδρομή μεταξύ δύο κόμβων ως τη γεωδαισιακή απόσταση μεταξύ τους. Για

μείωση του κόστους κατασκευής γραφήματος KNN ($O|V|^2$) (Jiang R. et al., 2016) κατασκευάζει αντίθετα ένα γράφημα αγκύρωσης, του οποίου το κόστος είναι ($O|V|$), ως προς την κατανάλωση χρόνου και χώρου. Αρχικά αποκτούν ένα σύνολο ομαδοποιημένων κέντρων ως εικονικές άγκυρες και στη συνέχεια βρίσκουν το K που είναι πλησιέστερο στις άγκυρες κάθε κόμβου για την κατασκευή του γραφήματος αγκύρωσης.

Ένας άλλος τρόπος κατασκευής γραφήματος είναι η δημιουργία ακμών μεταξύ κόμβων με βάση τη συνύπαρξη των κόμβων. Για παράδειγμα, για τη διευκόλυνση εφαρμογών που σχετίζονται με την εικόνα (π.χ. εικόνα κατάτμησης, ταξινόμηση εικόνων), ερευνητές (π.χ., (Monti F. et al., 2017), (Chen M. et al., 2015), (Defferrard M. et al., 2016)) κατασκεύασαν ένα γράφημα από κάθε εικόνα με επεξεργασία pixel ως κόμβους και τις χωρικές σχέσεις μεταξύ pixel ως ακμές. Οι Zhang et al. (Zhang C. et al., 2017) εξήγαγαν τρεις τύπους κόμβων (τοποθεσία, ώρα και μήνυμα) από την εγγραφή GTMS και επομένως σχημάτισαν έξι τύπους ακμών μεταξύ αυτών των κόμβων. Οι Ren et al. (Ren X. et al., 2016) δημιούργησαν ένα γράφημα χρησιμοποιώντας αναφορά οντότητας, τύπο στόχου και κείμενο που χαρακτηρίζονται ως κόμβοι και δημιουργούν τρία είδη ακμών: αναφορά-τύπος, αναφορά-χαρακτηριστικό και τύπος-τύπου.

Εκτός από τα παραπάνω ζεύγη ομοιότητας με βάση και τις μεθόδους που βασίζονται σε συν-εμφάνιση κόμβων, άλλες στρατηγικές κατασκευής γραφήματος έχουν σχεδιαστεί για διαφορετικούς σκοπούς. Για παράδειγμα, οι Yan S. et al., 2007 κατασκεύασαν ένα εγγενές γράφημα για τη σύλληψη του ενδοταξικού συμπαγούς, και ένα γράφημα ποινης για τον χαρακτηρισμό της διαταξικής διαχωρισιμότητας. Το πρώτο κατασκευάζεται συνδέοντας κάθε σημείο δεδομένων με τους γείτονές του στην ίδια τάξη, ενώ το τελευταίο συνδέει τα οριακά σημεία σε διαφορετικές τάξεις. Οι Gong et al. (Gong C. et al., 2014) κατασκεύασαν ένα υπογεγραμμένο γράφημα για την εκμετάλλευση των πληροφοριών της ετικέτας. Δύο κόμβοι συνδέονται με θετική ακμή εάν ανήκουν στην ίδια κατηγορία, και αρνητική ακμή αν είναι από δύο διαφορετικές κατηγορίες. Οι Sun et al. (Sun L., Ji S., Ye J., 2008) περιλαμβάνουν όλες τις περιπτώσεις με κοινή ετικέτα σε μία υπεράκρη για να συλλάβουν την κοινή τους ομοιότητα. Στο (Lin Y. et al., 2005), κατασκευάζονται δύο ανατροφοδοτήσεις γραφημάτων για να συγκεντρωθούν τα σχετικά ζεύγη και κρατάνε μακριά τα μη σχετικά μετά την ενσωμάτωση. Σε ένα θετικό γράφημα, δύο κόμβοι συνδέονται αν είναι και οι δύο σχετικοί. Στο αρνητικό

γράφημα, δύο κόμβοι συνδέονται μόνο όταν ο ένας κόμβος είναι σχετικός και ο άλλος είναι άσχετος.

Πρόκληση.

Πώς να κατασκευαστεί ένα γράφημα που κωδικοποιεί τα ζεύγη σχέσεων μεταξύ περιπτώσεων και πώς να διατηρηθεί η παραγόμενη μήτρα εγγύτητας κόμβου στον ενσωματωμένο χώρο; Η πρώτη πρόκληση αντιμετωπίζεται με την ενσωμάτωση γραφημάτων κατασκευασμένων από μη σχεσιακά δεδομένα και είναι ο τρόπος υπολογισμού των σχέσεων μεταξύ των μη σχεσιακών δεδομένων για να κατασκευαστεί ένα τέτοιο γράφημα. Μετά την κατασκευή του γραφήματος, η πρόκληση που προκύπτει είναι η ίδια όπως στα άλλα γραφήματα εισόδου, δηλαδή πώς να διατηρηθεί η εγγύτητα του κόμβου του κατασκευασμένου γραφήματος στον ενσωματωμένο χώρο.

2.4 Έξοδος ενσωμάτωσης γραφήματος

Η έξοδος της ενσωμάτωσης γραφήματος είναι ένα (σύνολο) χαμηλών διαστάσεων διανυσμάτων που αντιπροσωπεύουν (μέρος) ενός γραφήματος. Με βάση τον βαθμό ανάλυσης εξόδου, η έξοδος ενσωμάτωσης γραφήματος χωρίζεται σε τέσσερις κατηγορίες, συμπεριλαμβανομένης της ενσωμάτωσης κόμβων, της ενσωμάτωσης ακμών, την υβριδική ενσωμάτωση και ενσωμάτωση ολόκληρου γραφήματος. Διαφορετικοί τύποι ενσωμάτωσης διευκολύνουν διαφορετικές εφαρμογές. Σε αντίθεση με την είσοδο ενσωμάτωσης που είναι σταθερή και δεδομένη, η έξοδος ενσωμάτωσης βασίζεται σε εργασίες. Για παράδειγμα, η ενσωμάτωση κόμβου μπορεί να ωφελήσει μια μεγάλη ποικιλία αναλύσεων γραφημάτων που σχετίζονται με κόμβους καθηκόντων. Αντιπροσωπεύοντας κάθε κόμβο ως διάνυσμα, οι σχετικές εργασίες του κόμβου όπως ομαδοποίηση κόμβων, ταξινόμηση κόμβων, μπορούν να εκτελεστούν αποτελεσματικά τόσο από άποψη χρόνου όσο και χώρου. Ωστόσο, οι εργασίες ανάλυσης γραφημάτων δεν γίνονται πάντα σε επίπεδο κόμβου. Σε ορισμένα σενάρια, οι εργασίες μπορεί να σχετίζονται με υψηλότερο βαθμό ανάλυσης ενός γραφήματος, όπως ζεύγη κόμβων, υπογράφημα, ή ακόμα και ένα ολόκληρο γράφημα. Ως εκ τούτου, η πρώτη πρόκληση από την άποψη της εξόδου ενσωμάτωσης είναι ο τρόπος εύρεσης ενός κατάλληλου τύπου

ενσωμάτωσης εξόδου που ανταποκρίνεται στις ανάγκες εφαρμογής της συγκεκριμένης εργασίας.

Κατηγοριοποιούνται τέσσερις τύποι ενσωμάτωσης εξόδου γραφήματος, συμπεριλαμβανομένης της ενσωμάτωσης κόμβων, ενσωμάτωση άκρων, υβριδική ενσωμάτωση και ενσωμάτωση ολόκληρου γραφήματος. Διαφορετικές κατηγοριοποιήσεις εξόδου έχουν διαφορετικά κριτήρια για μία «καλή» ενσωμάτωση και αντιμετωπίζουν διαφορετικές προκλήσεις. Για παράδειγμα, μια καλή ενσωμάτωση κόμβου διατηρεί την ομοιότητα με αυτήν των γειτονικών κόμβων στον ενσωματωμένο χώρο. Αντίθετα, μία καλή ενσωμάτωση ολόκληρου γραφήματος αντιπροσωπεύει ένα ολόκληρο γράφημα ως ένα διάνυσμα έτσι ώστε να διατηρείται η ομοιότητα σε επίπεδο γραφήματος. Σε παρατηρήσεις των προκλήσεων που αντιμετωπίζονται σε ρυθμίσεις διαφορετικού προβλήματος, προτείνονται δύο εργασίες ταξινόμησης ενσωμάτωσης γραφήματος, κατηγοριοποιώντας τη λογοτεχνία ενσωμάτωσης γραφημάτων με βάση τις ρυθμίσεις προβλημάτων και τις τεχνικές ενσωμάτωσης.

Αυτές οι δύο ταξινομήσεις αντιστοιχούν σε όποιες προκλήσεις υπάρχουν στην ενσωμάτωση γραφημάτων και πώς αντιμετωπίζουν οι υπάρχουσες μελέτες αυτές τις προκλήσεις. Συγκεκριμένα, εισάγονται πρώτα διαφορετικές ρυθμίσεις του προβλήματος ενσωμάτωσης γραφήματος καθώς και προκλήσεις που αντιμετωπίζονται σε κάθε ρύθμιση. Αν και έχουν γίνει μερικές προσπάθειες για την έρευνα ενσωμάτωσης γραφήματος ((Goyal P., Ferrara E., 2017), (Nishana S.S., Surendran S., 2013), (Wang Q et al., 2017)), υπάρχουν οι εξής δύο περιορισμοί. Πρώτον, συνήθως προτείνεται μόνο μία ταξινόμηση τεχνικών ενσωμάτωσης γραφημάτων. Κανένας από αυτούς δεν ανέλυσε την εργασία ενσωμάτωσης γραφήματος από την οπτική γωνία της ρύθμισης προβλήματος, ούτε συνόψισε τις προκλήσεις σε κάθε ρύθμιση. Δεύτερον, μόνο ένας περιορισμένος αριθμός σχετικών μελετών καλύπτονται σε υπάρχουσες έρευνες ενσωμάτωσης γραφημάτων.

Για παράδειγμα, το (Goyal P., Ferrara E., 2017) εισάγει κυρίως δώδεκα αντιπροσωπευτικά γραφήματα ενσωμάτωσης αλγορίθμων και (Wang Q et al., 2017) εστιάζει στη γνώση μόνο ενσωμάτωσης γραφήματος. Επιπλέον, δεν υπάρχει ανάλυση σχετικά με τη γνώση πίσω από κάθε τεχνική ενσωμάτωσης γραφήματος. Μια ολοκληρωμένη ανασκόπηση της υπάρχουσας εργασίας ενσωμάτωσης γραφήματος και μια υψηλού επιπέδου αφαίρεση της

διορατικότητας για κάθε τεχνική ενσωμάτωσης μπορεί να ενισχύσει τις μελλοντικές έρευνες στο πεδίο.

2.4.1 Ενσωμάτωση κόμβου

Ως η πιο κοινή ρύθμιση εξόδου ενσωμάτωσης, η ενσωμάτωση κόμβου αντιπροσωπεύει κάθε κόμβο ως διάνυσμα σε χώρο χαμηλής διάστασης. Οι κόμβοι που είναι «κοντά» στο γράφημα είναι ενσωματωμένοι και υπάρχουν παρόμοιες διανυσματικές αναπαραστάσεις. Οι διαφορές μεταξύ των διαφόρων μεθόδων ενσωμάτωσης γραφημάτων βρίσκονται στον τρόπο με τον οποίο ορίζεται η «εγγύτητα» μεταξύ δύο κόμβων. Η εγγύτητα πρώτης τάξης και η εγγύτητα δεύτερης τάξης είναι δύο κοινά υιοθετούμενες μετρήσεις για κατά ζεύγη υπολογισμό ομοιότητας κόμβου. Σε ορισμένες εργασίες, η εγγύτητα υψηλότερης τάξης διερευνάται επίσης σε κάποιο βαθμό. Για παράδειγμα, οι (Cao S., Lu W., Xu Q., 2015) συλλαμβάνουν το k -βήμα ($k = 1, 2, 3 \dots$) στις σχέσεις μεταξύ γειτόνων στην ενσωμάτωση τους και οι (Wang X., et al., 2017; Cavallari S. et al., 2017) θεωρούν ότι δύο κόμβοι ανήκουν στην ίδια κοινότητα που είναι πιο κοντά ενσωματωμένοι.

Πρόκληση

Πώς να οριστεί η εγγύτητα κόμβου κατά ζεύγη σε διάφορους τύπους γραφήματος εισόδου και ποιος ο τρόπος κωδικοποίησης της εγγύτητας στις ενσωματώσεις; Οι προκλήσεις της ενσωμάτωσης κόμβων προέρχονται κυρίως από τον καθορισμό της εγγύτητας του κόμβου στην είσοδο της γραφικής παράστασης.

2.4.2 Ενσωμάτωση ακμών

Σε αντίθεση με την ενσωμάτωση κόμβων, η ενσωμάτωση ακμών στοχεύει στην αντιπροσώπευση μιας ακμής ως διάνυσμα χαμηλής διάστασης. Στην ενσωμάτωση ακμών είναι χρήσιμα τα ακόλουθα δύο σενάρια. Πρώτον, η ενσωμάτωση γραφήματος γνώσης (π.χ., (Bordes A. et al., 2011), (Bordes A. et al., 2013), (Bordes A. et al., 2014)) δίνει την ενσωμάτωση τόσο για κόμβους όσο και για ακμές. Κάθε ακμή είναι ένα τρίδυμο $\langle h; r; t \rangle$ (Ορισμός 4). Η ενσωμάτωση μαθαίνει να διατηρεί το r μεταξύ h και t στον ενσωματωμένο

χώρο, έτσι ώστε η οντότητα/σχέση που λείπει να μπορεί να προβλεφθεί σωστά δεδομένου των άλλων δύο στοιχείων σε $\langle h, r, t \rangle$. Δεύτερον, κάποιες εργασίες (π.χ. (Grover A., Leskovec J., 2016), (Zhao N. et al., 2016)) ενσωματώνουν ένα ζεύγος κόμβων ως χαρακτηριστικό διανυσμάτων, κάνοντας το ζεύγος κόμβων συγκρίσιμο με άλλους κόμβους ή προβλέποντας την ύπαρξη σύνδεσης μεταξύ δύο κόμβων.

Για παράδειγμα, το (Zhao N. et al., 2016) προτείνει μια δυνατότητα περιεχομένου-κοινωνικής επιρροής για την πρόβλεψη πιθανότητας αλληλεπίδρασης χρήστη-χρήστη δεδομένου του περιεχομένου. Ενσωματώνει και τα δύο ζεύγη χρηστών και περιεχομένου στον ίδιο χώρο. Οι Grover και Leskovec (Grover A., Leskovec J., 2016) ενσωματώνουν ένα ζεύγος κόμβων χρησιμοποιώντας μια προσέγγιση bootstrapping πάνω από την ενσωμάτωση του κόμβου, για να διευκολυνθεί η πρόβλεψη εάν υπάρχει σύνδεση μεταξύ δύο κόμβων σε ένα γράφημα. Συνοπτικά, τα πλεονεκτήματα της ενσωμάτωσης ακμών (/ζεύγη κόμβων) σε μια σχετική ανάλυση γραφήματος, είναι πρόβλεψη συνδέσμων, πρόβλεψη οντότητας/σχέσης γραφήματος κ.λπ.

Πρόκληση

Πώς να οριστεί η ομοιότητα σε επίπεδο ακμής και πώς να μοντελοποιηθεί η ασύμμετρη ιδιότητα των ακμών εάν υπάρχει; Η εγγύτητα ακμής είναι διαφορετική από την εγγύτητα κόμβου καθώς μια ακμή περιέχει ένα ζεύγος κόμβων και συνήθως υποδηλώνει τον κόμβο ως σχέση κατά ζεύγη. Επιπλέον, σε αντίθεση με τους κόμβους, οι ακμές μπορεί να είναι κατευθυνόμενες. Αυτή η ασύμμετρη ιδιότητα θα πρέπει να κωδικοποιείται στις μαθημένες αναπαραστάσεις ακμών.

2.4.3 Υβριδική ενσωμάτωση

Η υβριδική ενσωμάτωση είναι η ενσωμάτωση ενός συνδυασμού διαφορετικών τύπων στοιχείων γραφήματος, π.χ. κόμβος + ακμή (δηλαδή, υποδομή), κόμβος + κοινότητα. Η ενσωμάτωση υποδομής έχει μελετηθεί σε αρκετές εργασίες. Για παράδειγμα, το (Liu Z. et al., 2018) ενσωματώνει τη δομή του γραφήματος μεταξύ δύο πιθανώς απομακρυσμένων κόμβων

για την υποστήριξη σημασιολογικής αναζήτησης εγγύτητας. Οι Yanardag και Vishwanathan (Yanardag P., Vishwanathan S., 2015) μαθαίνουν την ενσωμάτωση υπογραφών έτσι ώστε να οριστούν οι πυρήνες γραφημάτων για την ταξινόμηση γραφημάτων. Οι Bordes et al. χρησιμοποίησαν μια βάση γνώσεων για να εμπλουτίσουν τις πληροφορίες σχετικά με την απάντηση. Ενσωματώνουν και τη διαδρομή και το υπογράφημα από την οντότητα ερώτησης στην οντότητα απάντησης.

Σε σύγκριση με την ενσωμάτωση υπο-γράφων, η ενσωμάτωση κοινότητας έχει προσελκύσει περιορισμένη προσοχή. Οι Wang et al. (Wang X., et al., 2017) προτείνουν να εξεταστεί μια εγγύτητα με επίγνωση της κοινότητας για τον κόμβο ενσωμάτωσης, έτσι ώστε η ενσωμάτωση ενός κόμβου να είναι παρόμοια με την ενσωμάτωση της κοινότητας. Το ComE (Cavallari S. et al., 2017) επιλύει επίσης τον κόμβο ενσωμάτωσης, και την ανίχνευση και ενσωμάτωση κοινότητας μαζί. Αντί να εκπροσωπεί μια κοινότητα ως ένα διάνυσμα, ορίζει κάθε κοινότητα που ενσωματώνεται ως πολυμεταβλητή Gaussian κατανομής, δείχνοντας έτσι την κατανομή των κόμβων των μελών. Η ενσωμάτωση υποδομής ή κοινότητας μπορεί επίσης να προκύψει με τη συγκέντρωση της μεμονωμένης ενσωμάτωσης κόμβου και ακμής μέσα σε αυτή.

Ωστόσο, ένα τέτοιο είδος «έμμεσης» προσέγγισης δεν είναι βελτιστοποιημένο για να αντιπροσωπεύει τη δομή. Εξάλλου, η ενσωμάτωση κόμβου και η ενσωμάτωση κοινότητας μπορεί ενισχύουν το ένα τον άλλον. Η καλύτερη ενσωμάτωση κόμβου μαθαίνεται ενσωματώνοντας την εγγύτητα υψηλού επιπέδου με επίγνωση της κοινότητας, ενώ οι καλύτερες κοινότητες εντοπίζονται όταν είναι πιο ακριβής η δημιουργία ενσωμάτωσης κόμβου.

Πρόκληση

Πώς να δημιουργηθεί η υποδομή στόχος και πώς να ενσωματωθούν διαφορετικοί τύποι στοιχείων γραφήματος σε έναν κοινό χώρο; Σε αντίθεση με άλλους τύπους εξόδου ενσωμάτωσης, ο στόχος ενσωμάτωσης σε υβριδική ενσωμάτωση (π.χ. υπογράφημα, κοινότητα) δεν δίδεται. Ως εκ τούτου, η πρώτη πρόκληση είναι το πώς να δημιουργηθεί τέτοιου είδους ενσωματωμένης δομής στόχου. Επιπλέον, διαφορετικοί τύποι στόχων (π.χ. κοινότητα,

κόμβος) μπορούν να ενσωματωθούν ταυτόχρονα σε έναν κοινό χώρο. Η αντιμετώπιση της ετερογένειας των τύπων στόχων ενσωμάτωσης είναι ένα πρόβλημα.

2.4.4 Ενσωμάτωση ολόκληρου γραφήματος

Ο τελευταίος τύπος εξόδου είναι η ενσωμάτωση ενός ολόκληρου γραφήματος συνήθως για μικρά γραφήματα, όπως πρωτεΐνες, μόρια κ.λπ. Σε αυτή την περίπτωση, ένα γράφημα αναπαρίσταται ως ένα διάνυσμα και δύο παρόμοια γραφήματα είναι ενσωματωμένα πιο κοντά.

Η ενσωμάτωση ολόκληρου γραφήματος ωφελεί το έργο της ταξινόμησης γραφημάτων παρέχοντας μια απλή και αποτελεσματική λύση για τον υπολογισμό των ομοιοτήτων μεταξύ γραφημάτων (Shervashidze N. et al., 2011), (Niepert M., Ahmed M., Kutzjov K., 2016). Για τη δημιουργία μιας ισορροπίας μεταξύ του χρόνου ενσωμάτωσης (αποτελεσματικότητα) και την ικανότητα διατήρησης πληροφοριών (εκφραστικότητα), οι (Leskovec J., Krevl A., 2014) σχεδιάζουν ένα ιεραρχικό πλαίσιο ενσωμάτωσης γραφήματος. Πιστεύουν, ότι η ακριβής κατανόηση των πληροφοριών ολόκληρου του γραφήματος απαιτούν την επεξεργασία των υποδομών σε διαφορετικές κλίμακες. Ένα γράφημα πυραμίδα σχηματίζεται όταν κάθε επίπεδο είναι ένα συνοπτικό γράφημα σε διαφορετικές κλίμακες. Το γράφημα ενσωματώνεται σε όλα τα επίπεδα και στη συνέχεια συνδέεται σε ένα διάνυσμα. Οι Li et al. (Li C. et al., 2017) έμαθαν την ενσωμάτωση για έναν ολόκληρο γράφημα καταρράκτη και, στη συνέχεια, εκπαιδύσαν έναν πολυστρωματικό νευρώνα Perceptron για να προβλέψει την αύξηση του μεγέθους του γραφήματος καταρράκτη στο μέλλον.

Πρόκληση

Πώς να αποτυπωθούν οι ιδιότητες ενός ολόκληρου γραφήματος και πώς να γίνει μια αντιστάθμιση μεταξύ εκφραστικότητας και αποτελεσματικότητας; Η ενσωμάτωση ολόκληρου γραφήματος απαιτεί την καταγραφή της ιδιότητας ενός ολόκληρου γραφήματος και επομένως είναι πιο χρονοβόρα σε σύγκριση με άλλους τύπους ενσωμάτωσης. Η βασική πρόκληση της ενσωμάτωσης ολόκληρου γραφήματος είναι πώς να γίνει μια επιλογή ανάμεσα στην εκφραστική δύναμη της μαθημένης ενσωμάτωσης και την αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου ενσωμάτωσης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Αλγοριθμικές προσεγγίσεις

Την τελευταία δεκαετία, έχει γίνει αρκετή έρευνα στον τομέα της ενσωμάτωσης γραφημάτων. Η έρευνα έγινε με έμφαση στο σχεδιασμό νέων αλγορίθμων ενσωμάτωσης. Πιο πρόσφατα, οι ερευνητές προώθησαν κλιμακωτούς αλγόριθμους ενσωμάτωσης που μπορούν να εφαρμοστούν σε γραφήματα με εκατομμύρια κόμβους και ακμές.

3.1 Γράφημα που ενσωματώνει το ερευνητικό πλαίσιο και την εξέλιξη

Στις αρχές της δεκαετίας του 2000, οι ερευνητές ανέπτυξαν αλγόριθμους ενσωμάτωσης γραφημάτων ως μέρος τεχνικών μείωσης διαστάσεων. Κατασκεύαζαν ένα γράφημα ομοιότητας για ένα σύνολο n σημείων, D διαστάσεων με βάση τη γειτονιά, και στη συνέχεια ενσωμάτωναν τους κόμβους του γραφήματος σε ένα διανυσματικό χώρο d , όπου $d \ll D$. Η ιδέα για την ενσωμάτωση γραφημάτων ήταν να κρατηθούν οι συνδεδεμένοι κόμβοι πιο κοντά ο ένας στον άλλο στον διανυσματικό χώρο. Οι Laplacian Eigenmaps (Belkin M., Niyogi P., 2002) και το Locally Linear Embedding (L.L.E.) (Roweis S.T., Saul L.K., 2000) είναι παραδείγματα αλγορίθμων που βασίζονται σε αυτόν τον λόγο. Ωστόσο, η επεκτασιμότητα είναι ένα σημαντικό ζήτημα σε αυτήν την προσέγγιση, της οποίας η χρονική πολυπλοκότητα είναι $O(|V|^2)$.

Από το 2010, η έρευνα για την ενσωμάτωση γραφημάτων έχει μεταφερθεί στην απόκτηση κλιμακούμενων τεχνικών ενσωμάτωσης γραφημάτων που αξιοποιούν την αραιότητα των πραγματικών δικτύων. Για παράδειγμα, η παραγοντοποίηση γραφήματος (Ahmed A. et al., 2013) χρησιμοποιεί μια κατά προσέγγιση παραγοντοποίηση του πίνακα γειτνίασης ως ενσωμάτωση. Η LINE (Tang J. et al., 2015) επεκτείνει αυτήν την προσέγγιση και επιχειρεί να διατηρήσει τόσο την πρώτη όσο και τη δεύτερη εγγύτητα. Το HOPE (Ou M. et al., 2016) επεκτείνει το LINE ώστε να προσπαθήσει να διατηρήσει την εγγύτητα υψηλής τάξης αποσυνθέτοντας τον πίνακα ομοιότητας αντί για τον πίνακα γειτνίασης χρησιμοποιώντας μια γενικευμένη αποσύνθεση ενιαίας τιμής (SVD). Το SDNE (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016) χρησιμοποιεί αυτόματους κωδικοποιητές για να ενσωματώσει κόμβους

γραφημάτων και να εντοπίσει εξαιρετικά μη γραμμικές εξαρτήσεις. Οι νέες κλιμακούμενες προσεγγίσεις έχουν χρονική πολυπλοκότητα $O(|E|)$.

3.2 Ταξινόμηση μεθόδων ενσωμάτωσης γραφημάτων

Προτείνεται μια ταξινόμηση προσεγγίσεων ενσωμάτωσης. Οι μέθοδοι ενσωμάτωσης κατηγοριοποιούνται σε τρεις ευρείες κατηγορίες: 1. Βασισμένη σε παραγοντοποίηση, 2. Βασισμένη σε τυχαίο περίπατο και 3. βασισμένη σε βαθιά μάθηση. Παρακάτω εξηγούνται τα χαρακτηριστικά καθεμιάς από αυτές τις κατηγορίες και παρέχεται μια περίληψη μερικών αντιπροσωπευτικών προσεγγίσεων για κάθε κατηγορία.

3.3 Μέθοδοι που βασίζονται στην παραγοντοποίηση

Οι αλγόριθμοι που βασίζονται στην παραγοντοποίηση αντιπροσωπεύουν τις συνδέσεις μεταξύ κόμβων με τη μορφή πίνακα και τον παραγοντοποιούν για να ληφθεί η ενσωμάτωση. Οι πίνακες που χρησιμοποιούνται για την αναπαράσταση των συνδέσεων περιλαμβάνουν, μεταξύ άλλων, τον πίνακα γειτνίασης κόμβων, τον πίνακα Laplace, τον πίνακα πιθανοτήτων μετάβασης κόμβου και τον πίνακα ομοιότητας Katz. Οι προσεγγίσεις για την παραγοντοποίηση του αντιπροσωπευτικού πίνακα ποικίλλουν με βάση τις ιδιότητες του πίνακα. Εάν ο λαμβανόμενος πίνακας είναι θετικός ημικαθορισμένος, π.χ. στον πίνακα Laplace, μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει την αποσύνθεση ιδιοτιμών. Για μη δομημένους πίνακες, μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει μεθόδους gradient descent για να αποκτήσει την ενσωμάτωση σε γραμμικό χρόνο.

3.3.1 Τοπικά Γραμμική Ενσωμάτωση (Locally Linear Embeddings LLE)

Πολλά προβλήματα στην επεξεργασία πληροφοριών συνεπάγονται κάποια μορφή μείωσης της διάστασης. Εδώ περιγράφουμε την τοπικά γραμμική ενσωμάτωση LLE (Roweis S.T., Saul L.K., 2000), έναν αλγόριθμο μάθησης χωρίς επίβλεψη που υπολογίζει, σε χαμηλή

διάσταση και με διατήρηση της γειτονιάς, ενσωματώσεις δεδομένων υψηλών διαστάσεων. Προσπαθεί να ανακαλύψει μη γραμμική δομή σε δεδομένα υψηλών διαστάσεων εκμεταλλευόμενη τις τοπικές συμμετρίες των γραμμικών ανακατασκευών. Συγκεκριμένα, το LLE χαρτογραφεί τις εισόδους του σε ένα ενιαίο παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων χαμηλότερης διάστασης και οι βελτιστοποιήσεις του - αν και είναι ικανές να δημιουργούν εξαιρετικά μη γραμμικές ενσωματώσεις - δεν περιλαμβάνουν τοπικά ελάχιστα. Υποθέτει ότι κάθε κόμβος είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των γειτόνων του στον χώρο ενσωμάτωσης. Αν υποθέσουμε ότι το στοιχείο μήτρας γειτονιάς W_{ij} του γραφήματος G , αντιπροσωπεύει το βάρος του κόμβου j στην αναπαράσταση του κόμβου i . Ορίζουμε το

$$Y_i \approx \sum_j W_{ij} Y_j \quad , \quad \forall i \in V$$

Επομένως, μπορούμε να λάβουμε την ενσωμάτωση $Y^{N \times d}$ ελαχιστοποιώντας το

$$\Phi(Y) = \sum_i |Y_i - \sum_j W_{ij} Y_j|^2$$

Για την αφαίρεση των εκφυλιστικών λύσεων, η διακύμανση της ενσωμάτωσης περιορίζεται ως $\frac{1}{N} Y^T Y = I$. Για να αφαιρεθεί περαιτέρω η μεταφραστική ανομοιομορφη ποικιλότητα, η ενσωμάτωση επικεντρώνεται γύρω από το μηδέν: $\sum_i Y_i = 0$. Το παραπάνω περιορισμένο πρόβλημα βελτιστοποίησης μπορεί να αναχθεί σε ένα πρόβλημα ιδιοτιμής, του οποίου η λύση είναι να ληφθούν τα κάτω $d + 1$ ιδιοδιανύσματα του αραιού πίνακα $(I - W^T)(I - W)$ και να απορριφθεί το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στη μικρότερη ιδιοτιμή.

3.3.2 Laplacian Eigenmaps

Η μέθοδος Laplacian Eigenmaps είναι άλλη μια μέθοδος μη γραμμικής μείωσης της διάστασης. Προτάθηκε το 2003 από τους Mikhail Belkin και Partha Niyogi. Η Laplacian Eigenmaps κατασκευάζει ενσωματώσεις με βάση τις ιδιότητες του πίνακα Laplacian. Εκείνη την εποχή, ο πίνακας Laplacian χρησιμοποιήθηκε ευρέως για προβλήματα ομαδοποίησης (Spectral Clustering), αλλά η Laplacian Eigenmaps ήταν ο πρώτος αλγόριθμος που χρησιμοποίησε τον πίνακα Laplacian για μείωση διαστάσεων. Με αυτή τη μέθοδο στοχεύουν να κρατήσουν την ενσωμάτωση δύο κόμβων κοντά όταν το βάρος W_{ij} είναι υψηλό. Τα

δεδομένα εισόδου είναι ένας πίνακας W ομοιοτήτων ανά ζεύγη μεταξύ n αντικειμένων δεδομένων. Θεωρούμε το W ως τα βάρη ακμών σε ένα γράφημα με n κόμβους. Σκοπός είναι η ενσωμάτωση των κόμβων του γραφήματος σε μονοδιάστατο χώρο με συντεταγμένες $(x_1, \dots, x_n)$. Εάν τα i, j είναι παρόμοια (δηλαδή, το w_{ij} είναι μεγάλο), θα πρέπει να είναι δίπλα στον ενσωματωμένο χώρο, δηλαδή, το $(x_i - x_j)^2$ να είναι μικρό. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί ελαχιστοποιώντας την ακόλουθη αντικειμενική συνάρτηση

$$\begin{aligned}\varphi(Y) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} |Y_i - Y_j|^2 W_{ij} \\ &= \text{tr}(Y^T L Y)\end{aligned}$$

όπου L είναι η Laplace του γραφήματος G . Η αντικειμενική συνάρτηση υπόκειται στον περιορισμό $Y^T D Y = I$ για να εξαλείψει την ασήμαντη λύση. Η λύση σε αυτό μπορεί να ληφθεί λαμβάνοντας τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στις d μικρότερες ιδιοτιμές της κανονικοποιημένης Laplace, $L_{norm} = D^{-1/2} L D^{-1/2}$.

3.3.3 Ενσωμάτωση γραφήματος Cauchy

Οι Laplacian Eigenmaps χρησιμοποιούν μια συνάρτηση τετραγωνικής ποινής στην απόσταση μεταξύ των ενσωματώσεων. Έτσι, η αντικειμενική συνάρτηση δίνει έμφαση στη διατήρηση της ανομοιότητας μεταξύ των κόμβων περισσότερο από την ομοιότητά τους. Αυτό μπορεί να δώσει ενσωματώσεις που δεν διατηρούν την τοπολογία, η οποία μπορεί να οριστεί ως η ισότητα μεταξύ της σχετικής τάξης των βαρών των ακμών (W_{ij}) και της αντίστροφης σειράς των αποστάσεων στον ενσωματωμένο χώρο ($|Y_i - Y_j|^2$). Η ενσωμάτωση γραφήματος Cauchy (Luo D. et al., 2011) αντιμετωπίζει αυτό το πρόβλημα αντικαθιστώντας την τετραγωνική συνάρτηση $|Y_i - Y_j|^2$ με $\frac{|Y_i - Y_j|^2}{|Y_i - Y_j|^2 + \sigma^2}$

Κατά την αναδιάταξη, η αντικειμενική συνάρτηση που θα μεγιστοποιηθεί γίνεται $\varphi(Y) = \sum_{i,j} \frac{W_{ij}}{|Y_i - Y_j|^2 + \sigma^2}$, με περιορισμούς $Y^T Y = I$ και $\sum_i Y_i = 0$ για κάθε i . Ο νέος στόχος είναι μια αντίστροφη συνάρτηση της απόστασης και έτσι δίνει έμφαση σε παρόμοιους κόμβους παρά σε ανόμοιους κόμβους. Οι συγγραφείς προτείνουν διάφορες παραλλαγές,

συμπεριλαμβανομένων Gaussian, Exponential και Linear ενσωματώσεων με ποικίλη σχετική έμφαση στην απόσταση μεταξύ των κόμβων.

3.3.4 Structure Preserving Embedding (SPE)

To Structure Preserving Embedding (Shaw B., Jebara T., 2009) είναι μια άλλη προσέγγιση που επεκτείνει τους Laplacian Eigenmaps. Το SPE στοχεύει να ανακατασκευάσει ακριβώς το γράφημα εισόδου. Η ενσωμάτωση αποθηκεύεται ως θετικός ημικαθορισμένος πίνακας πυρήνα K και ορίζεται ένας αλγόριθμος συνδεσιμότητας G_{ij} που αναδομεί το γράφημα από το K . Ο πυρήνας K επιλέγεται έτσι ώστε να μεγιστοποιεί το $\text{tr}(KW)$ που προσπαθεί να ανακτήσει την φασματική ενσωμάτωση κατάταξης-1. Η επιλογή του αλγορίθμου συνδεσιμότητας επιφέρει περιορισμούς σε αυτήν την αντικειμενική συνάρτηση. Για παράδειγμα, εάν το σύστημα συνδεσιμότητας είναι να συνδέσει κάθε κόμβο με γείτονες που βρίσκονται μέσα σε μια μπάλα ακτίνας e , ο περιορισμός $(K_{ii} + K_{jj} - 2K_{ij})(W_{ij} - 1/2) \leq \epsilon$ παράγει έναν πυρήνα που μπορεί να ανακατασκευάσει τέλεια το αρχικό γράφημα. Για τη διαχείριση του θορύβου στο γράφημα, προστίθεται μια χαλαρή μεταβλητή. Για ξ -συνδεσιμότητα, η βελτιστοποίηση γίνεται έτσι $\max \text{tr}(KW) - \sum_{(i,j) \in E} (K_{ii} + K_{jj} - 2K_{ij})(W_{ij} - 1/2) \leq \epsilon$, όπου ξ είναι η μεταβλητή slack και το C ελέγχει τη χαλαρότητα.

3.3.5 Παραγοντοποίηση γραφήματος (GF)

Από όσα έχουν γίνει γνωστά, η παραγοντοποίηση γραφήματος (Ahmed A. et al., 2013) ήταν η πρώτη μέθοδος για την απόκτηση ενός γραφήματος ενσωματωμένου σε χρόνο $O(|E|)$. Για να ληφθεί η ενσωμάτωση, το GF παραγοντοποιεί τον πίνακα γειτνίασης του γραφήματος, ελαχιστοποιώντας την ακόλουθη συνάρτηση απώλειας

$$\varphi(Y, \lambda) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} W_{ij} \|Y_i - Y_j\|^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_i \|Y_i\|^2,$$

όπου λ είναι ένας συντελεστής τακτοποίησης. Σημειώνεται ότι το άθροισμα βρίσκεται πάνω από τις παρατηρούμενες ακμές σε αντίθεση με όλες τις πιθανές ακμές. Αυτή είναι μια

προσέγγιση προς όφελος της επεκτασιμότητας και ως εκ τούτου μπορεί να εισάγει θόρυβο στη λύση. Καθώς ο πίνακας γειτνίασης συχνά δεν είναι θετικός ημιορισμένος, το ελάχιστο της συνάρτησης απώλειας είναι μεγαλύτερο από 0 ακόμη και αν η διάσταση της ενσωμάτωσης είναι $|V|$.

3.3.6 GraRep

Το GraRep είναι ένα νέο μοντέλο για την εκμάθηση αναπαραστάσεων κορυφών γραφημάτων με βάρη. Αυτό το μοντέλο μαθαίνει διανύσματα χαμηλών διαστάσεων για να αναπαραστήσει κορυφές που εμφανίζονται σε ένα γράφημα και ενσωματώνει καθολικές δομικές πληροφορίες του γραφήματος στη διαδικασία εκμάθησης. Ορίζει την πιθανότητα μετάβασης κόμβου ως $T = D^{-1}W$ και διατηρεί την εγγύτητα k -τάξης ελαχιστοποιώντας το $\|X^k - Y_s^k Y_t^{kT}\|_F^2$ όπου το X^k προέρχεται από το T^k (αναφορά (Cao S., Lu W., Xu Q., 2015) για λεπτομερή παραγωγή). Στη συνέχεια συνενώνει το Y_s^k για όλα τα k για να σχηματίσουν το Y_s . Σημειώνεται ότι αυτό είναι παρόμοιο με το HOPE που ελαχιστοποιεί το $\|S - Y_s Y_t^T\|_F^2$ όπου το S είναι ένας κατάλληλος πίνακας ομοιότητας. Το μειονέκτημα του GraRep είναι η επεκτασιμότητα, καθώς το T^k μπορεί να έχει $O(|V|^2)$ μη μηδενικές καταχωρήσεις.

3.3.7 HOPE

Το HOPE (High-Order Proximity preserved Embedding) (Ou M. et al., 2016) διατηρεί την εγγύτητα υψηλότερης τάξης ελαχιστοποιώντας το $\|S - Y_s Y_t^T\|_F^2$, όπου S είναι ο πίνακας ομοιότητας. Οι συγγραφείς πειραματίστηκαν με διαφορετικά μέτρα ομοιότητας, συμπεριλαμβανομένου του δείκτη Katz, του Rooted Page Rank, του Common Neighbors και του Adamic-Adar score. Αντιπροσώπευαν κάθε μέτρο ομοιότητας ως $S = M_g^{-1} M_l$, όπου τόσο το M_g όσο και το M_l είναι αραιά. Αυτό επιτρέπει στο HOPE να χρησιμοποιήσει τη γενικευμένη αποσύνθεση μοναδικής τιμής (SVD) (Van Loaf C.F., 1976) για να επιτύχει την ενσωμάτωση αποτελεσματικά.

3.3.8 Πρόσθετες παραλλαγές

Για το σκοπό της μείωσης διαστάσεων δεδομένων υψηλών διαστάσεων, αναπτύχθηκαν διάφορες άλλες μέθοδοι ικανές να εκτελούν ενσωμάτωση γραφήματος. Οι Yan et al. (Yan S. et al., 2007) ερευνήσαν μια λίστα τέτοιων μεθόδων, συμπεριλαμβανομένων των Principal Component Analysis (PCA) (Jolliffe I.T., 1986), Linear Discriminant Analysis (LDA) (Martinez A.M., Kak A.C., 2001), ISOMAP (Tenenbaum J.B., De Silva V., Langford J.C., 2000), Πολυδιάστατη Κλιμάκωση (MDS) (Kruskal J.B., Wish M., 1978), Ιδιότητες διατήρησης τοποθεσίας (LPP) (He H., Niyogi P., 2004) και Ιδιοχάρτες πυρήνα (Brand M., 2003). Οι Matrinex et al. (Martinez A.M., Kak A.C., 2008) πρότειναν ένα γενικό πλαίσιο, μη αρνητικής ενσωμάτωσης γραφήματος, που παράγει μη αρνητικές ενσωματώσεις για αυτούς τους αλγόριθμους.

Ένας αριθμός πρόσφατων τεχνικών έχει επικεντρωθεί στην από κοινού εκμάθηση της δομής του δικτύου και των πρόσθετων πληροφοριών κόμβου που είναι διαθέσιμες για το δίκτυο. Η Augmented Relation Embedding (ARE) (Lin Y., Liu T., Chen H., 2005) ενισχύει το δίκτυο με χαρακτηριστικά βασισμένα στο περιεχόμενο για εικόνες και τροποποιεί το γράφημα-Laplace ώστε να συλλάβει τέτοιες πληροφορίες. Το DeepWalk που σχετίζεται με κείμενο (TADW) (Yang C. et al., 2015) εκτελεί παραγοντοποίηση μήτρας στον πίνακα ομοιότητας κόμβων αποσυνδέοντας την αναπαράσταση χρησιμοποιώντας τη μήτρα χαρακτηριστικών κειμένου. Το Heterogeneous Network Embedding (HNE) (Chang S. et al., 2015) μαθαίνει την αναπαράσταση για κάθε τρόπο λειτουργίας του δικτύου και στη συνέχεια τα ενοποιεί σε έναν κοινό χώρο χρησιμοποιώντας γραμμικούς μετασχηματισμούς. Άλλα έργα (Tu C., Zhang W., Liu Z., Sun M., 2016) εκτελούν παρόμοιους μετασχηματισμούς μεταξύ διαφόρων χαρακτηριστικών κόμβων και μαθαίνουν την ενσωμάτωση αρθρώσεων.

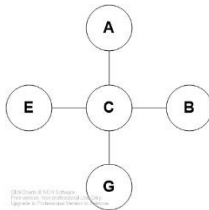
3.4 Μέθοδοι τυχαίου περίπατου

Οι τυχαίοι περίπατοι (Random Walks) έχουν χρησιμοποιηθεί για την προσέγγιση πολλών ιδιοτήτων στο γράφημα, συμπεριλαμβανομένης της κεντρικότητας κόμβου (Newman M.E., 2005) και της ομοιότητας (Fouss F. et al., 2007). Είναι ιδιαίτερα χρήσιμοι όταν κάποιος μπορεί είτε να παρατηρήσει μόνο εν μέρει το γράφημα, είτε το γράφημα είναι πολύ μεγάλο για

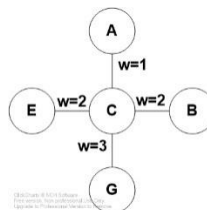
να το μετρήσει στο σύνολό του. Κάποιοι μέθοδοι εξαγωγής τυχαίων περιπάτων παρουσιάζονται παρακάτω.

- **Πρώτης τάξης τυχαίοι περίπατοι**

Ο τυχαίος περίπατος πρώτης τάξης δεν έχει μνήμη και συνεπώς κοιτάζει μόνο την τρέχουσα κατάσταση του, ο αλγόριθμος δηλαδή δεν γνωρίζει ποιος κόμβος ήταν στο προηγούμενο βήμα. Επομένως, η πιθανότητα επιστροφής σε προηγούμενο κόμβο ή οποιονδήποτε άλλο κόμβο είναι ίση. Δεν υπάρχει προηγμένη μαθηματική έννοια πίσω από τον υπολογισμό της πιθανότητας. Ο κόμβος C έχει τέσσερις γείτονες, επομένως η πιθανότητα διέλευσης σε οποιονδήποτε από αυτούς είναι 25% ($1/4$).

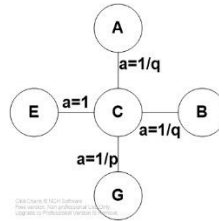


Ας υποθέσουμε ότι το γράφημά είναι σταθμισμένο, που όπως είπαμε και στο δεύτερο κεφάλαιο, αυτό σημαίνει ότι κάθε σχέση έχει μια ιδιότητα που αποθηκεύει το βάρος της. Στην περίπτωση αυτή, τα βάρη περιλαμβάνονται στον υπολογισμό της πιθανότητας διέλευσης μιας συγκεκριμένης σύνδεσης και είναι ίση με το βάρος της διαιρούμενο με το άθροισμα όλων των γειτονικών βαρών. Για παράδειγμα, η πιθανότητα διέλευσης από τον κόμβο C στον κόμβο E είναι 2 διαιρούμενη με 8 (25%) και η πιθανότητα διέλευσης από τον κόμβο C στον κόμβο G είναι 37,5%.



- Δεύτερης τάξης τυχαίοι περίπατοι

Οι περίπατοι δεύτερης τάξης λαμβάνουν υπόψιν τόσο την τρέχουσα όσο και την προηγούμενη κατάσταση, δηλαδή σε αυτή την περίπτωση ο αλγόριθμος έχει μνήμη και γνωρίζει ποιος κόμβος ήταν στο προηγούμενο βήμα. Έτσι όταν ο αλγόριθμος υπολογίζει τις πιθανότητες διέλευσης, μπορεί και λαμβάνει επίσης υπόψιν το πού βρισκόταν στο προηγούμενο βήμα.



Έστω ότι ο περίπατος μόλις πέρασε από τον κόμβο G στον κόμβο C στο προηγούμενο βήμα και τώρα αξιολογεί την επόμενη κίνησή του. Η πιθανότητα ανάδρομης πορείας και άμεσης επίσκεψης ενός κόμβου που έχει ήδη επισκεφτεί στη διαδρομή ελέγχεται από την παράμετρο επιστροφής p . Η ρύθμιση μιας υψηλής τιμής στην παράμετρο p διασφαλίζει μικρότερες πιθανότητες επίσκεψης ενός κόμβου που έχει ήδη επισκεφτεί. Αντίθετα, εάν η τιμή της παραμέτρου p είναι χαμηλή, οι πιθανότητες ανάδρομης πορείας είναι υψηλότερες, διατηρώντας τον τυχαίο περίπατο πιο κοντά στον κόμβο εκκίνησης.

Η παράμετρος q αποτελεί επίσης ένα μέσον ελέγχου της διαδρομής που θα ακολουθήσει ο τυχαίος περίπατος. Η ρύθμιση μιας υψηλής τιμής στην παράμετρο q ($q > 1$) ωθεί τον τυχαίο περίπατο να μετακινηθεί προς τους κόμβους που βρίσκονται κοντά στον κόμβο του προηγούμενου βήματος. Πηγαίνοντας στην προηγούμενη εικόνα, εάν ορίσουμε μια υψηλή τιμή για την παράμετρο q , ο τυχαίος περίπατος από τον κόμβο C θα τείνει να ακολουθήσει διαδρομή προς κόμβους πιο κοντά στον κόμβο G. Τέτοιοι περίπατοι αποκτούν μια τοπική άποψη του υποκείμενου γραφήματος σε σχέση με τον αρχικό κόμβο στη διαδρομή και έχουν κατά προσέγγιση αναζήτηση σε πλάτος (Breadth - First Search). Αντίθετα, εάν η τιμή του q είναι χαμηλή ($q < 1$), ο περίπατος έχει μεγαλύτερη τάση να επισκέπτεται κόμβους πιο μακριά από τον κόμβο G. Αυτή η στρατηγική ενθαρρύνει την εξερεύνηση μακριά από τον αρχικό κόμβο και συνεπώς προσεγγίζει την αναζήτηση σε βάθος (Depth - First Search).

Έχουν προταθεί τεχνικές ενσωμάτωσης που χρησιμοποιούν τυχαίους περιπάτους σε γραφήματα για τη λήψη αναπαραστάσεων κόμβων: Το DeepWalk και το node2vec είναι δύο παραδείγματα.

3.4.1 DeepWalk

Ο αλγόριθμος DeepWalk (Perozzi B., Al-Rfou R., Sjienna S., 2014) διατηρεί την εγγύτητα υψηλότερης τάξης μεταξύ των κόμβων μεγιστοποιώντας την πιθανότητα παρατήρησης των τελευταίων k κόμβων και των επόμενων k κόμβων στον τυχαίο περίπατο με κέντρο στο v_i , δηλαδή μεγιστοποιώντας το $\log \Pr(v_{i-k}, \dots, v_{i-1}, v_{i+1}, \dots, v_{i+k} | Y_i)$, όπου $2k + 1$ είναι το μήκος του τυχαίου περιπάτου. Ο αλγόριθμος δημιουργεί πολλαπλούς τυχαίους περιπάτους ο καθένας μήκους $2k + 1$ και αυτά τα μοτίβα στη συνέχεια μαθαίνονται και κωδικοποιούνται από νευρωνικά δίκτυα για να αποδώσουν τις τελικές ενσωματώσεις. Για την επίτευξη αυτού ο DeepWalk υιοθετεί ένα μοντέλο νευρωνικής γλώσσας (SkipGram) για την ενσωμάτωση γραφήματος. Το SkipGram στοχεύει στη μεγιστοποίηση της πιθανότητας συνεμφάνισης μεταξύ των λέξεων που εμφανίζονται σε έναν πίνακα w . Πιο συγκεκριμένα το DeepWalk λαμβάνει πρώτα δείγματα ενός συνόλου μονοπατιών από το γράφημα εισόδου χρησιμοποιώντας τυχαίο περίπατο όπως εξηγήσαμε παραπάνω. Κάθε διαδρομή που λαμβάνεται από το γράφημα αντιστοιχεί σε μια πρόταση από το συνολικό έργο, όπου ένας κόμβος αντιστοιχεί σε μια λέξη. Στη συνέχεια, το SkipGram εφαρμόζεται στα μονοπάτια για να μεγιστοποιηθεί η πιθανότητα τήρησης της γειτονιάς ενός κόμβου με την προϋπόθεση της ενσωμάτωσής του. Με αυτόν τον τρόπο, οι κόμβοι με παρόμοιες γειτονιές (που έχουν μεγάλες τιμές εγγύτητας δεύτερης τάξης) έχουν παρόμοια ενσωμάτωση.

3.4.2 node2vec

Παρόμοια με τον αλγόριθμο DeepWalk (Perozzi B., Al-Rfou R., Sjienna S., 2014), υλοποιείται και η τεχνική Node2Vec. Η Node2Vec ακολουθεί τον εξής τρόπο: οι κόμβοι που είναι μεταξύ τους “κοντά” στον γράφο αναπαρίστανται με N -διάστατα σημεία στο N -διάστατο χώρο που θα βρίσκονται επίσης “κοντά”. Διατηρούνται δηλαδή τα γειτονικά σημεία κατά τη

μετάβαση από τη μια μορφή αναπαράστασης των δεδομένων (γράφος) στην άλλη (σημεία στο χώρο). Η τεχνική αυτή αποτελεί εξέλιξη της τεχνικής DeepWalk. Αρχικά με τυχαίους περιπάτους πάνω στο γράφο γίνεται δειγματοληψία του γράφου. Ξεκινώντας από ένα τυχαίο κόμβο, έστω U_i , σχηματίζεται ένα μονοπάτι μήκους L διασχίζοντας τον γράφο από κόμβο σε κόμβο με τυχαία σειρά. Το αποτέλεσμα είναι μια αλληλουχία κόμβων $U_1, U_2, \dots, U_n$. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται ώστε να δημιουργηθούν k μονοπάτια για κάθε έναν κόμβο. Οι παράμετροι L και k είναι υψηλής σημασίας. Όσο αυξάνεται το k , δηλαδή όσο περισσότερα μονοπάτια δημιουργούνται, τόσο περισσότερο εξερευνάται ο γράφος. Όσο αυξάνεται το L , δηλαδή όσο αυξάνει το μήκος κάθε περιπάτου, τόσο πιο μακρινοί κόμβοι λαμβάνονται ως γειτονικοί. Το node2vec (Grover A., Leskovec J., 2016) διατηρεί την εγγύτητα υψηλότερης τάξης μεταξύ των κόμβων μεγιστοποιώντας την πιθανότητα εμφάνισης επόμενων κόμβων σε τυχαίους περιπάτους σταθερού μήκους. Η μέθοδος Node2vec δείχνει ότι το DeepWalk δεν είναι αρκετά εκφραστικό για να καταγράψει την ποικιλία των μοτίβων συνδεσιμότητας σε ένα δίκτυο. Η κρίσιμη διαφορά από το DeepWalk είναι ότι το node2vec χρησιμοποιεί προκατειλημμένους-τυχαίους περιπάτους που παρέχουν μια αντιστάθμιση μεταξύ των αναζητήσεων γραφήματος "breadth-first" (BFS) και "depth-first" (DFS), και ως εκ τούτου παράγει υψηλότερης ποιότητας και πιο ενημερωτικές ενσωματώσεις από το DeepWalk. Η επιλογή της σωστής ισορροπίας επιτρέπει στο node2vec να διατηρήσει τη δομή της κοινότητας καθώς και τη δομική ισοδυναμία μεταξύ των κόμβων. Πιο συγκεκριμένα, όπως αναφέρθηκε παραπάνω η τεχνική Node2Vec δειγματοληπτεί τον γράφο, και επιστρέφει έναν πίνακα $N \times k$, όπου κάθε γραμμή αντιστοιχεί σε κάθε κόμβο. Για να το πετύχει αυτό χρησιμοποιεί παραμέτρους για τον αριθμό περιπάτων από κάθε κόμβο, για το μήκος κάθε περιπάτου και τις παραμέτρους p και q που αναφέραμε παραπάνω.

3.4.3 Εκμάθηση ιεραρχικής αναπαράστασης για δίκτυα (HARP)

Το DeepWalk και το node2vec αρχικοποιούν τις ενσωματώσεις κόμβων τυχαία για την εκπαίδευση των μοντέλων. Τέτοιες αρχικοποιήσεις μπορούν να παραμείνουν στο τοπικό βέλτιστο, καθώς η αντικειμενική τους συνάρτηση είναι μη κυρτή. Το HARP (Hierarchical Representation Learning for Networks) (Chen H., Perozzi B., Hu S., Skiena S., 2017) εισάγει μια στρατηγική για τη βελτίωση της λύσης και την αποφυγή τοπικών βέλτιστων με καλύτερη

προετοιμασία βάρους. Για το σκοπό αυτό, το HARP δημιουργεί ιεραρχία κόμβων συγκεντρώνοντας κόμβους στο προηγούμενο επίπεδο ιεραρχίας χρησιμοποιώντας μείωση γραφήματος. Στη συνέχεια, δημιουργεί την ενσωμάτωση του πιο ελαχιστοποιημένου γραφήματος και αρχικοποιεί τις ενσωματώσεις κόμβων του βελτιωμένου γραφήματος (ένα προς τα πάνω στην ιεραρχία) με τη μαθημένη ενσωμάτωση. Διαδίδει τέτοιες ενσωματώσεις μέσω της ιεραρχίας για να αποκτήσει τις ενσωματώσεις του αρχικού γραφήματος. Έτσι, το HARP μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με μεθόδους που βασίζονται σε τυχαίο περίπατο, όπως το Deep-Walk και το node2vec, για την απόκτηση καλύτερων λύσεων στη λειτουργία βελτιστοποίησης.

3.4.4 Τα Walklet

Τα DeepWalk και node2vec διατηρούν έμμεσα την εγγύτητα υψηλότερης τάξης μεταξύ των κόμβων δημιουργώντας πολλαπλούς τυχαίους περιπάτους που συνδέουν κόμβους σε διάφορες αποστάσεις λόγω της στοχαστικής φύσης τους. Από την άλλη πλευρά, οι προσεγγίσεις που βασίζονται στην παραγοντοποίηση όπως το GF και το HOPE διατηρούν ρητά τις αποστάσεις μεταξύ των κόμβων μοντελοποιώντας τις στην αντικειμενική τους συνάρτηση. Τα Walklet (Perozzi B., Kulkarni V., Skiena S., 2016) συνδυάζουν αυτήν την ιδέα της ρητής μοντελοποίησης με τυχαίους περιπάτους. Το μοντέλο τροποποιεί τη στρατηγική τυχαίου περιπάτου που χρησιμοποιείται στο DeepWalk παρακάμπτοντας ορισμένους σύντομους τυχαίους περιπάτους στις κορυφές ενός γραφήματος. Παρακάμπτοντας βήματα σε κάθε τυχαίο περίπατο, η μέθοδος δημιουργεί ένα σώμα ζευγών κορυφών που είναι προσβάσιμα μέσω μονοπατιών σταθερού μήκους. Αυτό το σώμα μπορεί στη συνέχεια να χρησιμοποιηθεί για την εκμάθηση μιας σειράς λανθάνοντων αναπαραστάσεων, καθεμία από τις οποίες καταγράφει διαδοχικές σχέσεις υψηλότερης τάξης από τον πίνακα γειτνίασης. Τα Walklet υπερτερούν των νέων μεθόδων που βασίζονται στην παραγοντοποίηση νευρικής μήτρας. Συγκεκριμένα, ξεπερνάνε το DeepWalk έως και 10% και το LINE κατά 58% σε προκλητικές εργασίες ταξινόμησης πολλαπλών ετικετών. Τέλος, το Walklet είναι ένας διαδικτυακός αλγόριθμος και μπορεί εύκολα να κλιμακωθεί σε γραφήματα με εκατομμύρια κορυφές και ακμές.

3.5 Μέθοδοι που βασίζονται στη βαθιά μάθηση (Deep Learning)

Η Βαθιά Μάθηση (Deep Learning) είναι μία τεχνική μηχανικής μάθησης, στην οποία «επίπεδα» απλών μονάδων επεξεργασίας συνδέονται το ένα πίσω από το άλλο με αποτέλεσμα τη δημιουργία ενός δικτύου. Έτσι, η είσοδος στο σύστημα διέρχεται διαδοχικά μέσα από κάθε μονάδα. Η συγκεκριμένη τεχνική επινοήθηκε με σκοπό την επεξεργασία των οπτικών πληροφοριών στον εγκέφαλο. Στη συνέχεια, με την αυξανόμενη έρευνα για τη βαθιά μάθηση δημιουργήθηκε ένας κατακλυσμός μεθόδων που βασίζονται σε βαθιά νευρωνικά δίκτυα και εφαρμόζονται σε γραφήματα (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016). Οι μέθοδοι βαθιάς μάθησης έχουν χρησιμοποιηθεί για τη μείωση των διαστάσεων (Bengio Y., Courville A., Vincent P., 2013) λόγω της ικανότητάς τους να μοντελοποιούν μη γραμμική δομή στα δεδομένα. Πρόσφατα, το SDNE (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016) και DNGR (Cao S., Lu W., Xu Q. 2016) χρησιμοποίησαν αυτήν την ικανότητα της βαθιάς αυτόματης κωδικοποίησης για να δημιουργήσουν ένα μοντέλο ενσωμάτωσης που μπορεί να καταγράψει τη μη γραμμικότητα στα γραφήματα.

3.5.1 Δομική ενσωμάτωση σε βάθος δικτύου (Structural Deep Network Embedding SDNE)

Οι Wang et al. (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016) πρότειναν τη χρήση βαθύ αυτόματου κωδικοποιητή για τη διατήρηση της πρώτης και δεύτερης εγγύτητας του δικτύου. Αυτό το πέτυχαν βελτιστοποιώντας από κοινού τις δύο γειτνιάσεις. Η προσέγγιση χρησιμοποιεί μη γραμμικές συναρτήσεις για να αποκτήσει την ενσωμάτωση. Το μοντέλο αποτελείται από δύο μέρη: χωρίς επίβλεψη και υπό επίβλεψη. Το πρώτο μέρος αποτελείται από έναν αυτόματο κωδικοποιητή που στοχεύει στην εύρεση μιας ενσωμάτωσης για έναν κόμβο που μπορεί να ανακατασκευάσει τη γειτονιά του. Το δεύτερο βασίζεται στους Ιδιοχάρτες Laplace (Belkin M., Niyogi P., 2002) που εφαρμόζουν ποινή όταν παρόμοιες κορυφές χαρτογραφούνται μακριά η μία από την άλλη στον χώρο ενσωμάτωσης.

3.5.2 Βαθιά νευρωνικά δίκτυα για εκμάθηση αναπαραστάσεων γραφημάτων (Deep neural networks for learning graph representations DNGR)

Το DNGR συνδυάζει τυχαία πλοήγηση με βαθύ αυτόματο κωδικοποιητή. Το μοντέλο αποτελείται από 3 στοιχεία: τυχαίος περίπατος, υπολογισμός θετικής σημειακής αμοιβαίας πληροφόρησης (PPMI) και αυτόματο κωδικοποιητή με στοίβαξη αποθορυβοποίησης. Το μοντέλο τυχαίας περιήγησης χρησιμοποιείται στο γράφημα εισόδου για τη δημιουργία ενός πιθανοτικού πίνακα συν-συμβάντος, ανάλογο με τον πίνακα ομοιότητας στο HOPE. Ο πίνακας μετατρέπεται σε μια μήτρα PPMI και εισάγεται σε έναν αυτόματο κωδικοποιητή αποθορυβοποίησης στοιβαγμένο για να ληφθεί η ενσωμάτωση. Η εισαγωγή της μήτρας PPMI διασφαλίζει ότι το μοντέλο αυτόματου κωδικοποιητή μπορεί να καταγράψει εγγύτητα υψηλότερης τάξης. Επιπλέον, η χρήση στοιβαγμένων αυτόματων κωδικοποιητών αποθορυβοποίησης βοηθά στην δύναμη του μοντέλου παρουσία θορύβου στο γράφημα καθώς και στην αποτύπωση της υποκείμενης δομής που απαιτείται για εργασίες όπως η πρόβλεψη συνδέσμων και η ταξινόμηση κόμβων.

3.5.3 Συνελικτικά δίκτυα γραφημάτων (GCN)

Οι μέθοδοι που βασίζονται σε βαθύ νευρωνικό δίκτυο που συζητήθηκαν παραπάνω, συγκεκριμένα οι SDNE και DNGR, λαμβάνουν ως είσοδο την καθολική γειτονιά κάθε κόμβου (μια σειρά PPMI για το DNGR και μήτρα γειτνίασης για το SDNE). Αυτό μπορεί να είναι υπολογιστικά ακριβό και ακατάλληλο για μεγάλα αραιά γραφήματα. Τα συνελικτικά δίκτυα γραφήματος (GCN) (Kipf T.N., Welling M., 2016) αντιμετωπίζουν αυτό το πρόβλημα ορίζοντας έναν τελεστή συνέλιξης στο γράφημα. Το μοντέλο συγκεντρώνει επαναληπτικά τις ενσωματώσεις γειτόνων για έναν κόμβο και χρησιμοποιεί μια συνάρτηση της λαμβανόμενης ενσωμάτωσης και της ενσωμάτωσής της σε προηγούμενη επανάληψη για να αποκτήσει τη νέα ενσωμάτωση. Η συνάθροιση της ενσωμάτωσης μόνο τοπικής γειτονιάς την καθιστά επεκτάσιμη και οι πολλαπλές επαναλήψεις επιτρέπουν στη μαθημένη ενσωμάτωση ενός κόμβου να χαρακτηρίζει την παγκόσμια γειτονιά.

Αρκετές πρόσφατες εργασίες (Bruna J. et al., 2013) έχουν προτείνει μεθόδους που χρησιμοποιούν συνέλιξη σε γραφήματα για τη λήψη ημι-εποπτευόμενης ενσωμάτωσης, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη λήψη μη εποπτευόμενης ενσωμάτωσης ορίζοντας μοναδικές ετικέτες για κάθε κόμβο. Οι προσεγγίσεις ποικίλλουν ως προς την κατασκευή των συνελκτικών φίλτρων, τα οποία μπορούν να κατηγοριοποιηθούν ευρέως σε χωρικά και φασματικά φίλτρα. Τα χωρικά φίλτρα λειτουργούν απευθείας στο αρχικό γράφημα και τη μήτρα γειτνίασης ενώ τα φασματικά φίλτρα λειτουργούν στο φάσμα του γραφήματος-Laplace.

3.5.4 Αυτόματοι κωδικοποιητές μεταβλητών γραφημάτων (VGAE)

Οι Kipf et al. (Kipf T.N., Welling M., 2016) αξιολόγησαν την απόδοση των μεταβλητών αυτόματων κωδικοποιητών (Kingma D.P., Welling M., 2013) στο έργο της ενσωμάτωσης γραφήματος. Το μοντέλο χρησιμοποιεί έναν κωδικοποιητή συνελκτικού δικτύου (GCN) και έναν αποκωδικοποιητή εσωτερικού προϊόντος. Η είσοδος είναι ο πίνακας γειτνίασης και βασίζεται στο GCN για να μάθει τις εξαρτήσεις υψηλότερης τάξης μεταξύ των κόμβων. Εμπειρικά δείχνουν ότι η χρήση μεταβλητών αυτόματων κωδικοποιητών μπορεί να βελτιώσει την απόδοση σε σύγκριση με μη πιθανολογικούς αυτοκωδικοποιητές.

3.6 Άλλες μέθοδοι ενσωμάτωσης

Η LINE (Tang J. et al., 2015) ορίζει ρητά δύο συναρτήσεις, μία για εγγύτητα πρώτης και μια για εγγύτητα δεύτερης τάξης και ελαχιστοποιεί τον συνδυασμό των δύο. Η συνάρτηση για την εγγύτητα πρώτης τάξης είναι παρόμοια με αυτή της παραγοντοποίησης γραφήματος (GF) (Ahmed A. et al., 2013) καθώς και οι δύο στοχεύουν να κρατήσουν κοντά τον πίνακα γειτνίασης και το γινόμενο κουκκίδων των ενσωματώσεων. Η διαφορά είναι ότι το GF το κάνει αυτό ελαχιστοποιώντας άμεσα τη διαφορά των δύο. Αντίθετα, η LINE ορίζει δύο κοινές κατανομές πιθανοτήτων για κάθε ζεύγος κορυφών, η μία χρησιμοποιώντας μήτρα γειτνίασης και η άλλη χρησιμοποιώντας την ενσωμάτωση. Στη συνέχεια, το LINE ελαχιστοποιεί την απόκλιση Kullback-Leibler (KL) αυτών των δύο κατανομών. Οι δύο κατανομές και η αντικειμενική συνάρτηση είναι οι εξής :

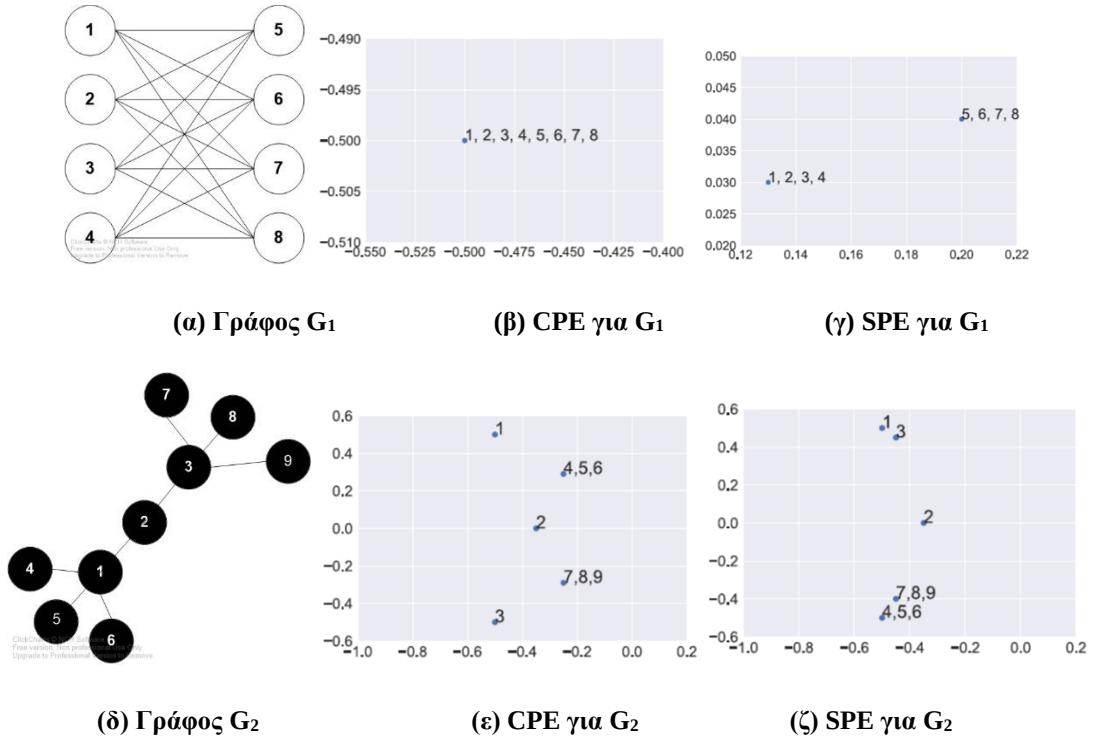
$$p_1(V_i, V_j) = \frac{1}{1 + \exp(-\langle Y_i, Y_j \rangle)}$$

$$\hat{p}(V_i, V_j) = \frac{W_{ij}}{\sum_{(i,j) \in E} W_{ij}}$$

$$O_1 = KL(\hat{p}_1, p_1)$$

$$O_1 = - \sum_{(i,j) \in E} W_{ij} \log p_1(V_i, V_j)$$

Οι συγγραφείς ορίζουν ομοίως τις κατανομές πιθανοτήτων και την αντικειμενική συνάρτηση για την εγγύτητα δεύτερης τάξης.



Σχήμα 3 : Παραδείγματα που επεξηγούν την επίδραση του τύπου της ομοιότητας που διατηρείται. Εδώ, το CPE και το SPE σημαίνουν Community Preserving Embedding και Structural-equivalence Preserving Embedding , αντίστοιχα.

Οι ενσωματώσεις μπορούν να ερμηνευθούν ως αναπαραστάσεις που περιγράφουν δεδομένα γραφήματος. Έτσι, οι ενσωματώσεις μπορούν να δώσουν πληροφορίες για τις ιδιότητες ενός δικτύου. Αυτό παρουσιάζεται στο Σχήμα 3. Θεωρείται ένα πλήρες διμερές γράφημα G . Ένας αλγόριθμος ενσωμάτωσης που προσπαθεί να κρατήσει δύο συνδεδεμένους κόμβους κοντά (δηλαδή, να διατηρήσει τη δομή της κοινότητας), θα αποτύχει να καταγράψει τη δομή του γραφήματος όπως φαίνεται στο Σχ.3(β). Ωστόσο, ένας αλγόριθμος που ενσωματώνει δομικά ισοδύναμους κόμβους μαζί μαθαίνει μια ερμηνεύσιμη ενσωμάτωση όπως φαίνεται στο Σχ.3(γ).

Ομοίως, στο 1 (γ) θεωρείται ένα γράφημα με δύο αστρικά στοιχεία συνδεδεμένα μέσω ενός διανομέα. Οι κόμβοι 1 και 3 είναι δομικά ισοδύναμοι (συνδέονται με τους ίδιους κόμβους) και συγκεντρώνονται μαζί στο Σχ.3(ζ), ενώ στο Σχ.3(ε) απέχουν πολύ μεταξύ τους. Οι παραπάνω κατηγορίες αλγορίθμων μπορούν να περιγραφούν ως προς την ικανότητά τους να εξηγούν τις ιδιότητες των γραφημάτων. Οι μέθοδοι που βασίζονται σε παραγοντοποίηση δεν είναι ικανές να μάθουν μια αυθαίρετη συνάρτηση, π.χ., να εξηγήσουν τη συνδεσιμότητα δικτύου. Έτσι, εκτός εάν περιλαμβάνονται ρητά στην αντικειμενική τους λειτουργία, δεν μπορούν να μάθουν τη δομική ισοδυναμία. Σε μεθόδους που βασίζονται σε τυχαίο περίπατο, το μείγμα των ισοδυναμιών μπορεί να ελεγχθεί σε κάποιο βαθμό μεταβάλλοντας τις παραμέτρους τυχαίας περιπάτου.

Οι μέθοδοι βαθιάς μάθησης μπορούν να μοντελοποιήσουν ένα ευρύ φάσμα συναρτήσεων ακολουθώντας το καθολικό θεώρημα της προσέγγισης (Hornik K., Stinchcombe M., White H., 1990) : δεδομένου αρκετών παραμέτρων, μπορούν να μάθουν το μείγμα κοινότητας και δομικής ισοδυναμίας, για να ενσωματώσουν τους κόμβους έτσι ώστε το σφάλμα ανακατασκευής να ελαχιστοποιείται. Τα βάρη του αυτόματου κωδικοποιητή μπορούν να ερμηνευθούν ως αναπαράσταση της δομής του γραφήματος. Για παράδειγμα, το Σχ.3(γ) απεικονίζει την ενσωμάτωση που μαθαίνει το SDNE για το πλήρες διμερές γράφημα G_1 . Ο αυτόματος κωδικοποιητής αποθήκευσε τη διμερή δομή σε βάρη και πέτυχε τέλεια ανακατασκευή. Δεδομένης της ποικιλίας των ιδιοτήτων των γραφημάτων του πραγματικού κόσμου, η χρήση γενικών μη γραμμικών μοντέλων που καλύπτουν μια μεγάλη κατηγορία συναρτήσεων είναι μια πολλά υποσχόμενη κατεύθυνση που δικαιολογεί περαιτέρω εξερεύνηση.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Εφαρμογές

Ως αναπαραστάσεις γραφημάτων, οι ενσωματώσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε μια ποικιλία εργασιών. Αυτές οι εφαρμογές μπορούν να ταξινομηθούν ευρέως ως εξής: συμπίεση δικτύου, οπτικοποίηση, ομαδοποίηση, πρόβλεψη συνδέσμων και ταξινόμηση κόμβων.

4.1 Συμπίεση δικτύου

Οι Feder et al. (Feder T., Motwani R., 1991) εισήγαγαν την έννοια της συμπίεσης δικτύου (γνωστή και ως απλοποίηση γραφήματος). Για ένα γράφημα G , όρισαν μια συμπίεση G^* που έχει μικρότερο αριθμό ακμών. Ο στόχος ήταν να αποθηκευτεί το δίκτυο πιο αποτελεσματικά και να εκτελεστούν οι αλγόριθμοι ανάλυσης γραφημάτων πιο γρήγορα. Έλαβαν το γράφημα συμπίεσης χωρίζοντας το αρχικό γράφημα σε κλίκες δύο σημείων και αντικαθιστώντας τις από δέντρα, μειώνοντας έτσι τον αριθμό των ακμών. Με τα χρόνια, πολλοί ερευνητές έχουν χρησιμοποιήσει μεθόδους που βασίζονται στη συγκέντρωση (Pardalos P.M., Xue J., 1994) για τη συμπίεση γραφημάτων. Η κύρια ιδέα σε αυτή τη γραμμή εργασίας είναι η εκμετάλλευση της δομής συνδέσμου του γραφήματος για την ομαδοποίηση κόμβων και ακμών.

Οι Navlakha et al. (Navlakha S., Rastogi R. Shrivastava N., 2008) χρησιμοποίησαν το ελάχιστο μήκος περιγραφής (MDL) (Rissanen J., 2018) από τη θεωρία πληροφοριών για τη σύνοψη ενός γραφήματος σε περίληψη γραφήματος και διόρθωση ακμών. Παρόμοια με αυτές τις αναπαραστάσεις, η ενσωμάτωση γραφήματος μπορεί επίσης να ερμηνευτεί ως περίληψη του γραφήματος. Οι Wang et al. (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016) και Ou et al. (Ou M. et al., 2016) δοκίμασαν αυτή την υπόθεση ανακατασκευάζοντας το αρχικό γράφημα από την ενσωμάτωση και αξιολογώντας το σφάλμα ανακατασκευής. Δείχνουν ότι μια αναπαράσταση χαμηλών διαστάσεων για κάθε κόμβο (της τάξης των 100 δευτερολέπτων) αρκεί για την ανακατασκευή του γραφήματος με υψηλή ακρίβεια.

4.2 Οπτικοποίηση

Η εφαρμογή οπτικοποίησης γραφημάτων μπορεί να χρονολογείται από το 1736 όταν ο Euler τη χρησιμοποίησε για να λύσει το «Konigsberger Bruckenproblem» (Jungnickel D., Schade T., 2005). Τα τελευταία χρόνια, η οπτικοποίηση γραφημάτων έχει βρει εφαρμογές σε μηχανική λογισμικού (Gansner E.R., North S.C., 2000) , ηλεκτρικά κυκλώματα (Battista Di G. et al., 1994) , βιολογία (Theocharidis A. et al., 2009) και κοινωνιολογία (Freeman L.C., 2000) . Οι Battista et al. (Battista Di G. et al., 1994) και Eades et al. (Eades P., Xuemin L., 1989) ερεύνησαν μια σειρά μεθόδων που χρησιμοποιούνται για τη σχεδίαση γραφημάτων και όρισαν αισθητηριακά κριτήρια για το σκοπό αυτό. Οι Herman et al. (Herman I., Melancon G., Marshall M.S., 2000) το γενίκευσαν αυτό και το είδαν από μια οπτική οπτικοποίησης πληροφοριών. Μελέτησαν και συνέκριναν διάφορες παραδοσιακές διατάξεις που χρησιμοποιούνται για τη σχεδίαση γραφημάτων, συμπεριλαμβανομένων διατάξεων που βασίζονται σε δέντρα, τρισδιάστατα και υπερβολικές διατάξεις. Καθώς η ενσωμάτωση αντιπροσωπεύει ένα γράφημα σε ένα διανυσματικό χώρο, τεχνικές μείωσης διαστάσεων όπως η ανάλυση κύριου στοιχείου (PCA) (Pearson K., Liii, xx) και t-κατανομημένη ενσωμάτωση στοχαστικού γείτονα (t-SNE) μπορούν να εφαρμοστούν σε αυτό για την οπτικοποίηση του γραφήματος.

Οι συγγραφείς του DeepWalk (Perozzi B., Al-Rfou R., Sjienna S., 2014) απεικόνισαν την ικανή προσέγγιση της ενσωμάτωσης οπτικοποιώντας το δίκτυο Karate Club του Zachary. Οι συντάκτες του LINE (Tang J. et al., 2015) οπτικοποίησαν το δίκτυο συν-συγγραφέων του DBLP και έδειξαν ότι το LINE είναι σε θέση να συγκεντρώνει συγγραφείς στο ίδιο πεδίο. Οι συγγραφείς του SDNE (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016) το εφάρμοσαν στο δίκτυο ομοιότητας εγγράφων 20-Newsgroup για να αποκτήσουν ομάδες εγγράφων με βάση θέματα.

4.3 Ομαδοποίηση

Η ομαδοποίηση γραφημάτων (γνωστή και ως κατάτμηση δικτύου) μπορεί να είναι δύο τύπων: (α) ομαδοποίηση σύμφωνα με τις δομές και (β) ομαδοποίηση σύμφωνα με τα χαρακτηριστικά. Το πρώτο μπορεί περαιτέρω να χωριστεί σε δύο κατηγορίες, δηλαδή ομαδοποίηση σύμφωνα με την κοινότητα και δομικά ισοδύναμη ομαδοποίηση. Οι μέθοδοι που

βασίζονται σε δομές (Newman M.E., Girvan M., 2004) στοχεύουν στην εύρεση πυκνών υπογραφημάτων με μεγάλο αριθμό ακμών εντός συστάδας και χαμηλό αριθμό ακμών μεταξύ συστάδων. Η ομαδοποίηση δομικής ισοδυναμίας (Xu X., Yuruk N., Feng Z., Schweiger T.A., 2007), αντίθετα, έχει σχεδιαστεί για να αναγνωρίζει κόμβους με παρόμοιους ρόλους (όπως γέφυρες και ακραίες τιμές). Οι μέθοδοι που βασίζονται σε χαρακτηριστικά (Zhou Y., Cheng H., Yu J.X., 2009) χρησιμοποιούν ετικέτες κόμβων, εκτός από τις παρατηρούμενες συνδέσεις, σε κόμβους συμπλέγματος.

Οι White et al. (White S., Smyth P., 2005) χρησιμοποίησαν το k-means στην ενσωμάτωση για να ομαδοποιήσουν τους κόμβους και να οπτικοποιήσουν τις συστάδες που ελήφθησαν σε σύνολα δεδομένων Wordnet και NCAA επαληθεύοντας ότι τα συμπλέγματα που ελήφθησαν έχουν διαισθητική ερμηνεία. Οι πρόσφατες μέθοδοι για την ενσωμάτωση δεν έχουν αξιολογήσει ρητά τα μοντέλα τους σε αυτήν την εργασία και επομένως είναι ένα πολλά υποσχόμενο πεδίο έρευνας στην κοινότητα ενσωμάτωσης γραφημάτων.

4.4 Πρόβλεψη συνδέσμου

Τα δίκτυα κατασκευάζονται από τις παρατηρούμενες αλληλεπιδράσεις μεταξύ οντοτήτων, οι οποίες μπορεί να είναι ελλιπείς ή ανακριβείς. Η πρόκληση συχνά έγκειται στον εντοπισμό ψευδών αλληλεπιδράσεων και στην πρόβλεψη πληροφοριών που λείπουν. Η πρόβλεψη συνδέσμων αναφέρεται στο έργο της πρόβλεψης είτε των αλληλεπιδράσεων που λείπουν είτε των συνδέσμων που μπορεί να εμφανιστούν στο μέλλον σε ένα εξελισσόμενο δίκτυο. Η πρόβλεψη συνδέσμων είναι διάχυτη στη βιολογική ανάλυση δικτύου, όπου η επαλήθευση της ύπαρξης συνδέσμων μεταξύ των κόμβων απαιτεί δαπανηρές πειραματικές δοκιμές. Ο περιορισμός των πειραμάτων σε συνδέσμους που ταξινομούνται σύμφωνα με τη πιθανότητα παρουσίας έχει αποδειχθεί ότι είναι πολύ οικονομικός.

Στα κοινωνικά δίκτυα, η πρόβλεψη συνδέσμων χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη πιθανών φιλιών, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για σύσταση και να οδηγήσει σε μια πιο ικανοποιητική εμπειρία χρήστη. Οι Liben–Nowell et al. (Liben-Nowell D., Kleinberg J., 2007), Lu et al. (83) και Hasan et al. (Hasan Al M., Zaki M.J., 2011) ερεύνησαν την πρόσφατη πρόοδο σε αυτό το πεδίο και κατηγοριοποίησαν τους αλγόριθμους σε (α) σύμφωνα με την ομοιότητα

(τοπικό και παγκόσμιο) (Katz L., 1953), (β) σύμφωνα με τη μέγιστη πιθανότητα (Clauset A., Moore C., Newman M.E., 2008) και (γ) πιθανοτικές μέθοδοι (Yu K., et al., 2006) . Οι ενσωματώσεις καταγράφουν την εγγενή δυναμική του δικτύου είτε ρητά είτε σιωπηρά, επιτρέποντας έτσι στην εφαρμογή να συνδέσει την πρόβλεψη. Οι Wang et al. (Wang D., Cui P., Zhu W., 2016) και Ou et al. (Ou M. et al., 2016) προβλέπουν συνδέσμους από τις αναπαραστάσεις του μαθημένου κόμβου σε δημόσια διαθέσιμη συνεργασία και κοινωνικά δίκτυα.

Επιπλέον, οι Grover et al. (Grover A., Leskovec J., 2016) πραγματοποίησαν εφαρμογές σε δίκτυα βιολογίας. Έδειξαν ότι σε αυτά τα σύνολα δεδομένων οι σύνδεσμοι που προβλέπονται με χρήση ενσωματώσεων είναι πιο ακριβείς από τις παραδοσιακές μεθόδους πρόβλεψης συνδέσμων που βασίζονται στην ομοιότητα που περιγράφονται παραπάνω.

4.5 Ταξινόμηση κόμβων

Συχνά στα δίκτυα, επισημαίνεται ένα κλάσμα κόμβων. Στα κοινωνικά δίκτυα, οι ετικέτες μπορεί να υποδεικνύουν ενδιαφέροντα, πεποιθήσεις ή δημογραφικά στοιχεία. Στα γλωσσικά δίκτυα, ένα έγγραφο μπορεί να φέρει ετικέτα με θέματα ή λέξεις-κλειδιά, ενώ οι ετικέτες των οντοτήτων στα δίκτυα βιολογίας μπορεί να βασίζονται στη λειτουργικότητα. Λόγω διαφόρων παραγόντων, οι ετικέτες μπορεί να είναι άγνωστες για μεγάλα κλάσματα κόμβων. Για παράδειγμα, στα κοινωνικά δίκτυα πολλοί χρήστες δεν παρέχουν τα δημογραφικά τους στοιχεία λόγω ανησυχιών σχετικά με το απόρρητο. Οι ετικέτες που λείπουν μπορούν να συναχθούν χρησιμοποιώντας τους επισημασμένους κόμβους και τους συνδέσμους στο δίκτυο. Το έργο της πρόβλεψης αυτών των ετικετών που λείπουν είναι επίσης γνωστό ως ταξινόμηση κόμβων. Οι Bha-gat et al. (Bhagat S., Gormode G., Muthukrishnan S., 2011) ερεύνησαν τις μεθόδους αυτές. Ταξινόμησαν τις προσεγγίσεις σε δύο κατηγορίες, δηλαδή, σύμφωνα με την εξαγωγή χαρακτηριστικών και σύμφωνα με τον τυχαίο περίπατο.

Τα μοντέλα που βασίζονται σε χαρακτηριστικά (Neville J., Jensen D., 2000) δημιουργούν χαρακτηριστικά για κόμβους που βασίζονται στα στατιστικά στοιχεία της γειτονιάς τους και του τοπικού δικτύου και στη συνέχεια εφαρμόζουν έναν ταξινομητή όπως η Logistic Regression (Hosmer Jr D.W., Lemeshow S., Sturdivant E.X., 2013) και ο Naive

Bayes (McCallum A., Nigam K et al., 1998) για να προβλέψουν τις ετικέτες. Τα μοντέλα βασισμένα σε τυχαία βόλτα (Azran A., 2007) διαδίδουν τις ετικέτες με τυχαίους περιπάτους. Οι ενσωματώσεις μπορούν να ερμηνευθούν ως αυτόματα εξαγόμενα χαρακτηριστικά κόμβου με βάση τη δομή του δικτύου και, επομένως, εμπίπτουν στην πρώτη κατηγορία. Πρόσφατη εργασία (Perozzi B., Al-Rfou R., Sjienna S., 2014) έχει αξιολογήσει την προγνωστική δύναμη της ενσωμάτωσης σε διάφορα δίκτυα συμπεριλαμβανομένων της γλώσσας, κοινωνικά, βιολογίας και συνεργατικών γραφημάτων. Αυτό δείχνει ότι οι ενσωματώσεις μπορούν να προβλέψουν τις ετικέτες που λείπουν με υψηλή ακρίβεια.

Κεφάλαιο 5^ο

Συμπεράσματα/Μελλοντικές κατευθύνσεις

5.1 Συμπεράσματα

Σε αυτή την έρευνα, πραγματοποιήθηκε μια ολοκληρωμένη ανασκόπηση της βιβλιογραφίας στην ενσωμάτωση γραφημάτων. Παρέχεται ένας επίσημος ορισμός στο πρόβλημα της ενσωμάτωσης και εισαγωγής γραφήματος, καθώς και μερικές βασικές έννοιες. Το πιο σημαντικό, προτείνονται δύο ταξινομίες ενσωμάτωσης γραφημάτων, κατηγοριοποίηση υπαρχόντων εργασιών με βάση τις ρυθμίσεις προβλημάτων και τις τεχνικές ενσωμάτωσης αντίστοιχα. Όσον αφορά την ταξινόμηση των προβλημάτων, εισάγονται τέσσερις τύποι ενσωμάτωσης εισόδου και τέσσερις τύποι ενσωμάτωσης εξόδου, συνοψίζοντας τις προκλήσεις που αντιμετωπίζονται σε κάθε ρύθμιση.

Για την ταξινόμηση της τεχνικής ενσωμάτωσης, εισάγονται οι εργασίες σε κάθε κατηγορία και συγκρίνονται ως προς τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματά τους. Μετά από αυτό, συνοψίζονται οι εφαρμογές που επιτρέπει η ενσωμάτωση γραφήματος. Τέλος, προτείνονται τέσσερις υποσχόμενες μελλοντικές έρευνες/κατευθύνσεις στο πεδίο της ενσωμάτωσης γραφημάτων όσον αφορά τον υπολογισμό της αποτελεσματικότητας, ρυθμίσεις προβλημάτων, τεχνικές και εφαρμογή σεναρίων.

5.2 Μελλοντικές κατευθύνσεις

Σε αυτή την ενότητα, συνοψίζονται τέσσερις μελλοντικές κατευθύνσεις για το πεδίο ενσωμάτωσης γραφήματος, συμπεριλαμβανομένης της υπολογιστικής αποδοτικότητας, ρυθμίσεις προβλημάτων, τεχνικές και σενάρια εφαρμογών.

5.3 Υπολογισμός.

Η βαθιά αρχιτεκτονική, που παίρνει τη γεωμετρική είσοδο (π.χ. γράφημα), αντιμετωπίζει το πρόβλημα χαμηλής απόδοσης. Παραδοσιακά μοντέλα βαθιάς μάθησης (σχεδιασμένα για τους Ευκλείδειους τομείς) χρησιμοποιούν τη σύγχρονη GPU για τη βελτιστοποίηση της αποτελεσματικότητάς τους υποθέτοντας ότι τα δεδομένα εισόδου είναι σε 1D ή 2D πλέγμα. Ωστόσο, τα γραφήματα δεν έχουν τέτοιου είδους δομή πλέγματος και ως εκ

τούτου η βαθιά αρχιτεκτονική σχεδιασμένη για ενσωμάτωση γραφήματος, χρειάζεται να αναζητήσει εναλλακτικές λύσεις για τη βελτίωση της αποτελεσματικότητας του μοντέλου. Οι Bronstein et al. (Bronstein M.M. et al., 2016) πρότειναν ότι η επεξεργασία των υπολογιστικών παραδειγμάτων που αναπτύχθηκαν για γραφήματα μεγάλης κλίμακας, μπορεί να υιοθετηθεί για να διευκολυνθεί η βελτίωση της αποτελεσματικότητας σε μοντέλα βαθιάς μάθησης για ενσωμάτωση γραφημάτων.

5.4 Προβληματικές ρυθμίσεις.

Το δυναμικό γράφημα είναι μια πολλά υποσχόμενη ρύθμιση για ενσωμάτωση γραφήματος. Τα γραφήματα δεν είναι πάντα στατικά, ειδικά σε σενάρια πραγματικής ζωής, π.χ., κοινωνικά γραφήματα στο Twitter, γραφήματα παραπομπών στο DBLP. Τα γραφήματα μπορεί να είναι δυναμικά από την άποψη της δομής γραφήματος ή τις πληροφορίες κόμβου/ακμής. Από τη μία μεριά, η δομή του γραφήματος μπορεί να εξελιχθεί με την πάροδο του χρόνου, δηλ. νέοι κόμβοι/ακμές εμφανίζονται ενώ κάποιοι παλιοί κόμβοι/ακμές εξαφανίζονται. Από την άλλη πλευρά, οι κόμβοι/ακμές μπορούν να περιγραφούν με ορισμένες χρονικά μεταβαλλόμενες πληροφορίες. Η υπάρχουσα ενσωμάτωση γραφήματος εστιάζει κυρίως στην ενσωμάτωση του στατικού γραφήματος και οι ρυθμίσεις της δυναμικής ενσωμάτωσης γραφημάτων παραβλέπονται.

Σε αντίθεση με την ενσωμάτωση στατικών γραφημάτων, οι τεχνικές για δυναμικά γραφήματα πρέπει να είναι κλιμακούμενες και καλύτερα να είναι σταδιακές για την αποτελεσματική αντιμετώπιση των δυναμικών αλλαγών. Αυτό κάνουν οι περισσότερες από τις υπάρχουσες μεθόδους ενσωμάτωσης γραφημάτων, οι οποίες υποφέρουν από το πρόβλημα χαμηλής απόδοσης, κάνοντας τις πλέον ακατάλληλες. Η σχεδίαση αποτελεσματικών μεθόδων ενσωμάτωσης γραφημάτων στους δυναμικούς τομείς παραμένει ανοιχτό ερώτημα.

5.5 Τεχνικές.

Η επίγνωση της δομής είναι σημαντική για την ακμή ενσωμάτωσης γραφήματος με βάση την ανακατασκευή. Οι βασισμένες μέθοδοι ενσωμάτωσης γραφημάτων στην τρέχουσα ανακατασκευή έργων βασίζονται κυρίως μόνο στις ακμές. Οι μονές ακμές παρέχουν μόνο τοπικές πληροφορίες γειτονιάς για τον υπολογισμό εγγύτητας της πρώτης και δεύτερης τάξης. Η συνολική δομή ενός γραφήματος (π.χ. μονοπάτια, δέντρο, μοτίβα υπογραφών)

παραλείπεται. Διαισθητικά, μια υποδομή περιέχει πλουσιότερες πληροφορίες από μια μόνο ακμή. Κάποιες έρευνες επιχειρούν να εξερευνήσουν τις πληροφορίες διαδρομής στο γράφημα γνώσης ενσωμάτωσης ((Feng J. et al., 2016), (Wu F. et al., 2015), (Shi B., Weninger T., 2017), (Luo Y. et al., 2015)).

Ωστόσο, τα περισσότερα από αυτά χρησιμοποιούν μοντέλα βαθιάς μάθησης ((Feng J. et al., 2016), (Shi B., Weninger T., 2017), (Luo Y. et al., 2015)) που υποφέρουν από χαμηλά επίπεδα σε θέματα αποτελεσματικότητας όπως συζητήθηκε προηγουμένως. Το πώς να σχεδιαστούν οι nondeep μέθοδοι που είναι βασισμένες στη μάθηση που μπορούν να επωφεληθούν από την εκφραστική δύναμη της δομής του γραφήματος είναι ένα ερώτημα. Οι Wu et al. (Wu F. et al., 2015) παρέχουν ένα παράδειγμα λύσης. Ελαχιστοποιούν και τα δύο κατά ζεύγη και με τη μεγάλης εμβέλειας απώλεια για να συλλάβουν τις ζευγαρωμένες σχέσεις και τις μακροπρόθεσμες αλληλεπιδράσεις μεταξύ οντοτήτων. Εκτός από τη δομή λίστας/διαδρομών, υπάρχουν διάφορα είδη υποδομών που φέρουν διαφορετικές πληροφορίες δομής. Για παράδειγμα, το SPE (Liu Z. et al., 2018) προσπάθησε να εισαγάγει ένα υπογράφημα με επαυξημένη δομή διαδρομής για την ενσωμάτωση της εγγύτητας μεταξύ δύο κόμβων σε ένα ετερογενές γράφημα και δείχνει καλύτερη απόδοση από την ενσωμάτωση απλών μονοπατιών για σημασιολογική αναζήτηση καθηκόντων. Γενικά, απαιτείται μια αποτελεσματική ενσωμάτωση γραφήματος με επίγνωση της βελτιστοποίησης της λύσης της δομής, μαζί με την υποδομή στρατηγικής δειγματοληψίας.

5.6 Εφαρμογές.

Η ενσωμάτωση γραφήματος έχει εφαρμοστεί σε πολλές διαφορετικές εφαρμογές. Είναι ένας αποτελεσματικός τρόπος εκμάθησης των αναπαραστάσεων των δεδομένων λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις τους. Επιπλέον, μπορεί να μετατρέψει στιγμιότυπα δεδομένων από διαφορετικές πηγές /πλατφόρμες /προβολές σε έναν κοινό χώρο έτσι ώστε να είναι άμεσα συγκρίσιμα. Για παράδειγμα, χρησιμοποιούνται τα (Zhao X. et al., 2013), (Zhang H.. et al., 2016), (Wu F. et al., 2016) στην ενσωμάτωση γραφήματος για πολλαπλή ανάκτηση, όπως σύμφωνα με περιεχομένου ανάκτηση εικόνας, αναζήτηση εικόνων/βίντεο σύμφωνα με λέξεων-κλειδιών. Τα πλεονεκτήματα της χρήσης της ενσωμάτωσης γραφημάτων για αναπαράσταση μάθησης είναι ότι τα στιγμιότυπα της πολλαπλότητας γραφήματος των δεδομένων εκπαίδευσης, διατηρούνται στις παραστάσεις και μπορούν να επωφεληθούν

περεταίρω από τις εφαρμογές παρακολούθησης. Κατά συνέπεια, η ενσωμάτωση γραφήματος μπορεί να ωφελήσει τις εργασίες που αναλαμβάνουν στην είσοδο τα στιγμιότυπα δεδομένων που συσχετίζονται με ορισμένες σχέσεις (δηλ. συνδέονται από ορισμένους συνδέσμους). Έχει μεγάλη σημασία η εξερεύνηση των σεναρίων εφαρμογών που επωφελούνται από την ενσωμάτωση γραφημάτων, καθώς παρέχουν αποτελεσματικές λύσεις στα συμβατικά προβλήματα από διαφορετική οπτική γωνία.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ahmed A., N. Shervashidze , S. Narayanamurthy , V. Josifovski , A.J. Smola , Distributed large-scale natural graph factorization, in: Proceedings of the 22nd international conference on World Wide Web, ACM, 2013, pp. 37–48 .

Alharbi B. and X. Zhang, “Learning from your network of friends: A trajectory representation learning model based on online social ties,” in Proc. IEEE Int. Conf. Data Mining, 2016, pp. 781–786.

Azran A., The rendezvous algorithm: Multiclass semi-supervised learning with markov random walks, in: Proceedings of the 24th international conference on Machine learning, 2007, pp. 49–56 .

Balasubramanian M. and E. L. Schwartz, “The isomap algorithm and topological stability,” Sci., vol. 295, no. 5552, pp. 7–7, 2002.

Battista Di G., P. Eades , R. Tamassia , I.G. Tollis , Algorithms for drawing graphs: an annotated bibliography, Comput. Geom. 4 (5) (1994) 235–282 .

Belkin M. and P. Niyogi, “Laplacian eigenmaps and spectral techniques for embedding and clustering,” in Advances in Neural Information Processing Systems, 2002, pp. 585–591.

Bengio Y., A. Courville , P. Vincent , Representation learning: a review and new perspectives, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. 35 (8) (2013) 1798–1828 .

Bhagat S., G. Cormode, and S. Muthukrishnan, “Node classification in social networks,” Social Network Data Analytics, pp. 115– 148, 2011.

Bizer C., J. Lehmann, G. Kobilarov, S. Auer, C. Becker, R. Cyganiak, and S. Hellmann, “DBpedia - A crystallization point for the web of data,” J. Web Sem., vol. 7, no. 3, pp. 154–165, 2009.

Bollacker K., C. Evans, P. Paritosh, T. Sturge, and J. Taylor, “Freebase: A collaboratively created graph database for structuring human knowledge,” in Proc. ACM SIGMOD Int. Conf. Manag. Data, 2008, pp. 1247–1250.

Bordes A., J. Weston, R. Collobert, and Y. Bengio, “Learning structured embeddings of knowledge bases,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2011, pp. 301–306.

Bordes A., N. Usunier, A. Garcia-Duran, J. Weston, and O. Yakhnenko, “Translating embeddings for modeling multi-relational data,” in Proc. 28th Int. Conf. Neural Inf. Process. Syst., 2013, pp. 2787–2795.

Bordes A., X. Glorot, J. Weston, and Y. Bengio, “A semantic matching energy function for learning with multi-relational data—application to word-sense disambiguation,” *Mach. Learn.*, vol. 94, no. 2, pp. 233–259, 2014.

Brand M., Continuous nonlinear dimensionality reduction by kernel eigen- maps, in: IJCAI, 2003, pp. 547–554 .

B. Perozzi, R. Al-Rfou, and S. Skiena, “DeepWalk: Online learning of social representations,” in Proceedings of the 20th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2014, pp. 701–710.

Bronstein M.M., J. Bruna, Y. LeCun, A. Szlam, and P. Vandergheynst, “Geometric deep learning: Going beyond Euclidean data,” *CoRR*, vol. abs/1611.08097, pp. 1–10, 2016.

Bruna J., W. Zaremba, A. Szlam, Y. LeCun, Spectral networks and locally connected networks on graphs, arXiv: 1312.6203 (2013)

Cao S., W. Lu , Q. Xu , Grarep: learning graph representations with global structural information, in: Proceedings of the 24th ACM International on Conference on Information and Knowledge Management, ACM, 2015, pp. 891–900 .

Cao S., W. Lu, and Q. Xu, “Deep neural networks for learning graph representations,” in Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2016, pp. 1145–1152.

Cavallari S., V. W. Zheng, H. Cai, K. C. Chang, and E. Cambria, “Learning community embedding with community detection and node embedding on graphs,” in Proc. 18th ACM Conf. Inf. Knowl. Manage., 2017, pp. 377–386.

Cao S., W. Lu, and Q. Xu, “Grarep: Learning graph representations with global structural information,” in Proc. 18th ACM Conf. Inf. Knowl. Manage., 2015, pp. 891–900.

Clauset A., C. Moore , M.E. Newman , Hierarchical structure and the prediction of missing links in networks, *Nature* 453 (7191) (2008) 98–101 .

Chang S., W. Han , J. Tang , G.-J. Qi , C.C. Aggarwal , T.S. Huang , Heterogeneous network embedding via deep architectures, in: *Proceedings of the 21th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, ACM, 2015, pp. 119–128 .

Chen H., B. Perozzi, Y. Hu, S. Skiena, Harp: hierarchical representation learning for networks, *arXiv: 1706.07845* (2017).

Chen M., I. W. Tsang, M. Tan, and C. T. Jen, “A unified feature selection framework for graph embedding on high dimensional data,” *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, vol. 27, no. 6, pp. 1465–1477, Jun. 2015.

Dai H., B. Dai, and L. Song, “Discriminative embeddings of latent variable models for structured data,” in *Proc. 29th Int. Conf. Mach. Learn.*, 2016, pp. 2702–2711.

Defferrard M., X. Bresson, and P. Vandergheynst, “Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering,” in *Proc. 28th Int. Conf. Neural Inf. Process. Syst.*, 2016, pp. 3837–3845.

Dong Y., N. V. Chawla, and A. Swami, “metapath2vec: Scalable representation learning for heterogeneous networks,” in *Proc. 17th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discovery Data Mining*, 2017, pp. 135–144.

Eades P., L. Xuemin , How to draw a directed graph, in: *Visual Languages*, 1989., IEEE Workshop on, IEEE, 1989, pp. 13–17 .

Gao S., L. Denoyer, and P. Gallinari, “Temporal link prediction by integrating content and structure information,” in *Proceedings of the 20th ACM International Conference on Information and Knowledge Management*, 2011, pp. 1169–1174.

Grover A., J. Leskovec , node2vec: scalable feature learning for networks, in: *Proceedings of the 22nd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, ACM, 2016, pp. 855–864 .

Gui H., J. Liu, F. Tao, M. Jiang, B. Norick, and J. Han, “Largescale embedding learning in heterogeneous event data,” in Proc. IEEE Int. Conf. Data Mining, 2016, pp. 907–912.

Fang H., F. Wu, Z. Zhao, X. Duan, Y. Zhuang, and M. Ester, “Community-based question answering via heterogeneous social network learning,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 122–128.

Feder T., R. Motwani , Clique partitions, graph compression and speeding-up algorithms, in: Proceedings of the twenty-third annual ACM symposium on Theory of computing, 1991, pp. 123–133 .

Feng J., M. Huang, Y. Yang, and X. Zhu, “GAKE: graph aware knowledge embedding,” in Proc. 23rd Int. Conf. Comput. Linguistics: Posters, 2016, pp. 641–651.

Freeman L.C., Visualizing social networks, J. Social Struct. 1 (1) (20 0 0) 4 .

Fouss F., A. Pirotte , J.-M. Renders , M. Saerens , Random-walk computation of similarities between nodes of a graph with application to collaborative rec- ommendation, IEEE Trans. Knowl. Data Eng. 19 (3) (2007) .

Gansner E.R., S.C. North , An open graph visualization system and its applica- tions to software engineering, Softw. Pract. Exp. 30 (11) (20 0 0) 1203–1233 .

Geng X., H. Zhang, J. Bian, and T. Chua, “Learning image and user features for recommendation in social networks,” in Proc. IEEE Int. Conf. Comput. Vis., 2015, pp. 4274–4282.

Gong C., D. Tao, J. Yang, and K. Fu, “Signed laplacian embedding for supervised dimension reduction,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2014, pp. 1847–1853.

Guo S., Q. Wang, B. Wang, L. Wang, and L. Guo, “Semantically smooth knowledge graph embedding,” in Proc. Annu. Meet. Assoc. Comput. Linguistics, 2015, pp. 84–94.

Guo S., Q. Wang, B. Wang, L. Wang, and L. Guo, “SSE: semantically smooth embedding for knowledge graphs,” IEEE Trans. Knowl. Data Eng., vol. 29, no. 4, pp. 884–897, Apr. 2017.

Han Y. and Y. Shen, “Partially supervised graph embedding for positive unlabelled feature selection,” in Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 1548–1554.

Hasan Al. M., M.J. Zaki , A survey of link prediction in social networks, in: So- cial network data analytics, 2011, pp. 243–275 .

He H., P. Niyogi , Locality preserving projections, in: Advances in neural infor- mation processing systems, 2004, pp. 153–160 .

Herman I., G. Melançon , M.S. Marshall , Graph visualization and navigation in information visualization: a survey, IEEE Trans. Visual. Comput. Graph. 6 (1) (20 0 0) 24–43 .

Hofmann T. and J. M. Buhmann, “Multidimensional scaling and data clustering,” in Proc. 28th Int. Conf. Neural Inf. Process. Syst., 1994, pp. 459–466.

Hosmer Jr D.W., S. Lemeshow , R.X. Sturdivant , Applied logistic regression, 398, John Wiley & Sons, 2013 .

Hornik K., M. Stinchcombe , H. White , Universal approximation of an unknown mapping and its derivatives using multilayer feedforward networks, Neural Netw. 3 (1990) 551–560 .

Jiang R., W. Fu, L. Wen, S. Hao, and R. Hong, “Dimensionality reduction on anchorgraph with an efficient locality preserving projection,” Neurocomput., vol. 187, pp. 109–118, 2016.

Jolliffe I.T., Principal component analysis and factor analysis, in: Principal component analysis, Springer, 1986, pp. 115–128 .

Jungnickel D., T. Schade , Graphs, networks and algorithms, Springer, 2005 .

Katz L., A new status index derived from sociometric analysis, Psychometrika 18 (1) (1953) 39–43 .

Kingma D.P., M. Welling, Auto-encoding variational bayes, arXiv: 1312. 6114 (2013).

Kipf T.N., M. Welling, Semi-supervised classification with graph convolutional networks, arXiv: 1609.02907 (2016).

- Kipf T.N., M. Welling, Variational graph auto-encoders, arXiv: 1611. 07308 (2016).
- Kipf T.N. and M. Welling, “Semi-supervised classification with graph convolutional networks,” Int. Conf. Learn. Representations, pp. 1–14, 2017.
- Kruskal J.B., M. Wish , Multidimensional scaling, 11, Sage, 1978 .
- Li C., J. Ma, X. Guo, and Q. Mei, “Deepcas: An end-to-end predictor of information cascades,” in Proc. 23rd Int. Conf. World Wide Web, 2017, pp. 577–586.
- Li J., J. Zhu, and B. Zhang, “Discriminative deep random walk for network classification,” in Proc. Annu. Meet. Assoc. Comput. Linguistics, 2016, pp. 1004–1013.
- Liben-Nowell D., J. Kleinberg , The link-prediction problem for social networks, J. Assoc. Inf. Sci. Technol. 58 (7) (2007) 1019–1031 .
- Lin Y., Z. Liu, M. Sun, Y. Liu, and X. Zhu, “Learning entity and relation embeddings for knowledge graph completion,” in Proceedings of the 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2015, pp. 2181–2187.
- Lin Y., T.-L. Liu, and H.-T. Chen, “Semantic manifold learning for image retrieval,” in Proc. 19th ACM Int. Conf. Multimedia, 2005, pp. 249–258
- Lin Y., T.-L. Liu , H.-T. Chen , Semantic manifold learning for image retrieval, in: Proceedings of the 13th annual ACM international conference on Multi- media, ACM, 2005, pp. 249–258 .
- Liu Z., V. W. Zheng, Z. Zhao, F. Zhu, K. C.-C. Chang, M. Wu, and J. Ying, “Distance-aware DAG embedding for proximity search on heterogeneous graphs,” in Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2018, pp. 2355–2362.
- Liu Z., V. W. Zheng, Z. Zhao, H. Yang, K. C.-C. Chang, M. Wu, and J. Ying, “Subgraph-augmented path embedding for semantic user search on heterogeneous social network,” in Proc. 23rd Int. Conf. World Wide Web, 2018.
- Le T.M.V. and H. W. Lauw, “Probabilistic latent document network embedding,” in Proc. IEEE Int. Conf. Data Mining, 2014, pp. 270–279

Luo D., F. Nie , H. Huang , C.H. Ding , Cauchy graph embedding, in: Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning (ICML-11), 2011, pp. 553–560 .

Luo Y., Q. Wang, B. Wang, and L. Guo, “Context-dependent knowledge graph embedding,” in Proc. Conf. Empirical Methods Natural Language Process., 2015, pp. 1656–1661.

Lü L. and T. Zhou, “Link prediction in complex networks: A survey,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 390, no. 6, pp. 1150–1170, 2011.

Malliaros F.D. and M. Vazirgiannis, “Clustering and community detection in directed networks: A survey,” *Physics Reports*, vol. 533, no. 4, pp. 95–142, 2013

Martínez A.M., A .C. Kak , Pca versus lda, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 23 (2) (2001) 228–233 .

Martínez A.M., A .C. Kak , Non-negative graph embedding, *IEEE Conf. Comput. Vis. Pattern Recognit. (CVPR)* 23 (2) (2008) 1–8 .

McCallum A., K. Nigam , et al. , A comparison of event models for naive bayes text classification, in: *AAAI-98 workshop on learning for text categorization*, 752, Citeseer, 1998, pp. 41–48 .

Monti F., D. Boscaini, J. Masci, E. Rodolà, J. Svoboda, and M. M. Bronstein, “Geometric deep learning on graphs and manifolds using mixture model CNNs,” in Proc. IEEE Conf. Comput. Vis. Pattern Recognit., 2017, pp. 5425–5434.

Navlakha S., R. Rastogi , N. Shrivastava , Graph summarization with bounded error, in: *Proceedings of the international conference on Management of data*, ACM, 2008, pp. 419–432 .

Newman M.E., A measure of betweenness centrality based on random walks, *Soc. Netw.* 27 (1) (2005) 39–54 .

Newman M.E., M. Girvan , Finding and evaluating community structure in networks, *Phys. Rev. E* 69 (2) (2004) 026113 .

Neville J., D. Jensen , Iterative classification in relational data, in: Proc. Work- shop on Learning Statistical Models from Relational Data, 2000, pp. 13–20 .

Nie F., W. Zhu, and X. Li, “Unsupervised large graph embedding,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2017, pp. 2422–2428.

Niepert M., M. Ahmed, and K. Kutzkov, “Learning convolutional neural networks for graphs,” in Proc. 29th Int. Conf. Mach. Learn., 2016, pp. 2014–2023.

Nishana S.S. and S. Surendran, “Graph embedding and dimensionality reduction-a survey,” Int. J. Comput. Sci. Emerging Technol., vol. 4, no. 1, pp. 29–34, 2013.

Nikolentzos G., P. Meladianos, and M. Vazirgiannis, “Matching node embeddings for graph similarity,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2017, pp. 2429–2435.

Ochi M., Y. Nakashio, Y. Yamashita, I. Sakata, K. Asatani, M. Ruttley, and J. Mori, “Representation learning for geospatial areas using large-scale mobility data from smart card,” in Proc. 12th ACM Int. Conf. Ubiquitous Comput., 2016, pp. 1381–1389.

M. Ochi, Y. Nakashio, M. Ruttley, J. Mori, and I. Sakata, “Geospatial area embedding based on the movement purpose hypothesis using large-scale mobility data from smart card,” Int. J. Commun. Netw. Syst. Sci., vol. 9, pp. 519–534, 2016.

Ou M., P. Cui , J. Pei , Z. Zhang , W. Zhu ,Asymmetric transitivity preserving graph embedding, in: Proc. of ACM SIGKDD, 2016, pp. 1105–1114 .

Pan S., J. Wu, X. Zhu, C. Zhang, and Y. Wang, “Tri-party deep network representation,” in Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 1895–1901.

Pardalos P.M., J. Xue , The maximum clique problem, J. Global Optim. 4 (3) (1994) 301–328

Pearson K., Liii. on lines and planes of closest fit to systems of points in space, Lond., Edinburgh, Dublin Philos. Mag. J. Sci. 2 (11) (1901) 559–572 .

Perozzi B., R. Al-Rfou , S. Skiena , Deepwalk: online learning of social representations, in: Proceedings 20th international conference on Knowledge discovery and data mining, 2014, pp. 701–710 .

Perozzi B., V. Kulkarni, S. Skiena, Walklets: multiscale graph embeddings for interpretable network classification, arXiv: 1605.02115 (2016).

Ren X., W. He, M. Qu, C. R. Voss, H. Ji, and J. Han, “Label noise reduction in entity typing by heterogeneous partial-label embedding,” in Proc. 17th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discovery Data Mining, 2016, pp. 1825–1834.

Rissanen J., Modeling by shortest data description, *Automatica* 14 (5) (1978) 465–471
P. Goyal, E. Ferrara / *Knowledge-Based Systems* 151 (2018) 78–94

Roweis S.T. and L. K. Saul, “Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding,” *Science*, vol. 290, no. 5500, pp. 2323–2326, 2000.

Shaw B., T. Jebara , Structure preserving embedding, in: *Proceedings of the 26th Annual International Conference on Machine Learning*, ACM, 2009, pp. 937–944 .

Shervashidze N., P. Schweitzer, E. J. van Leeuwen, K. Mehlhorn, and K. M. Borgwardt, “Weisfeiler-lehman graph kernels,” *J. Mach. Learning Res.*, vol. 12, pp. 2539–2561, 2011.

Shi B. and T. Weninger, “ProjE: Embedding projection for knowledge graph completion,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2017, pp. 1236–1242.

Suchanek F.M., G. Kasneci, and G. Weikum, “YAGO: A core of semantic knowledge,” in Proc. 23rd Int. Conf. World Wide Web, 2007, pp. 697–706.

Sun L., S. Ji, and J. Ye, “Hypergraph spectral learning for multilabel classification,” in Proc. 17th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discovery DataMining, 2008, pp. 668–676.

Tang J., M. Qu, M. Wang, M. Zhang, J. Yan, and Q. Mei, “LINE: Large-scale information network embedding,” in *Proceedings of the 24th International Conference on World Wide Web*, 2015, pp. 1067–1077.

Tang J., J. Liu, and Q. Mei, “Visualizing large-scale and highdimensional data,” in *Proceedings of the 25th International Conference on World Wide Web*, 2016, pp. 287–297.

Tang J., M. Qu , M. Wang , M. Zhang , J. Yan , Q. Mei , Line: large-scale information network embedding, in: Proceedings 24th International Conference on World Wide Web, 2015, pp. 1067–1077 .

Tang M., F. Nie, and R. Jain, “Capped Lp-norm graph embedding for photo clustering,” in Proc. 19th ACM Int. Conf. Multimedia, 2016, pp. 431–435.

Tenenbaum J.B., V. De Silva, and J. C. Langford, “A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction,” *Science*, vol. 290, no. 5500, pp. 2319–2323, 2000.

Theocharidis A., S. Van Dongen , A. Enright , T. Freeman , Network visualization and analysis of gene expression data using biolayout express3d, *Nat. Protoc.* 4 (2009) 1535–1550 .

Tu C., W. Zhang , Z. Liu , M. Sun , Max-margin deepwalk: discriminative learning of network representation., in: IJCAI, 2016, pp. 3889–3895

Van Loan C.F., Generalizing the singular value decomposition, *SIAM J. Numer. Anal.* 13 (1) (1976) 76–83 .

Wang D., P. Cui , W. Zhu , Structural deep network embedding, in: Proceedings of the 22nd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, ACM, 2016, pp. 1225–1234.

White S., P. Smyth ,A spectral clustering approach to finding communities in graphs, in: Proceedings of the 2005 SIAM international conference on data mining, SIAM, 2005, pp. 274–285 .

Wang X., P. Cui, J. Wang, J. Pei, W. Zhu, and S. Yang, “Community preserving network embedding,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2017, pp. 203–209.

Wu F., X. Lu, J. Song, S. Yan, Z. M. Zhang, Y. Rui, and Y. Zhuang, “Learning of multimodal representations with random walks on the click graph,” *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 25, no. 2, pp. 630–642, Feb. 2016.

Wu F., J. Song, Y. Yang, X. Li, Z. M. Zhang, and Y. Zhuang, “Structured embedding via pairwise relations and long-range interactions in knowledge base,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2015, pp. 1663–1670.

Xiao H., M. Huang, L. Meng, and X. Zhu, “SSP: semantic space projection for knowledge graph embedding with text descriptions,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2017, pp. 3104–3110.

Xie M., H. Yin, H. Wang, F. Xu, W. Chen, and S. Wang, “Learning graph-based POI embedding for location-based recommendation,” in Proceedings of the 25th ACM International Conference on Information and Knowledge Management, 2016, pp. 15–24.

Xie R., Z. Liu, and M. Sun, “Representation learning of knowledge graphs with hierarchical types,” in Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 2965–2971.

Xiong C., R. Power, and J. Callan, “Explicit semantic ranking for academic search via knowledge graph embedding,” in Proc. 23rd Int. Conf. World Wide Web, 2017, pp. 1271–1279.

Xu X., N. Yuruk, Z. Feng, T. A. Schweiger, Scan: a structural clustering algorithm for networks, in: Proceedings 13th international conference on Knowledge discovery and data mining, 2007, pp. 824–833.

Yan S., D. Xu, B. Zhang, H.-J. Zhang, Q. Yang, S. Lin, Graph embedding and extensions: a general framework for dimensionality reduction, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. 29 (1) (2007) 40–51.

Yanardag P. and S. Vishwanathan, “Deep graph kernels,” in Proc. 17th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discovery Data Mining, 2015, pp. 1365–1374.

Yang C., Z. Liu, D. Zhao, M. Sun, and E. Y. Chang, “Network representation learning with rich text information,” in Proceedings of the 24th International Joint Conference on Artificial Intelligence, 2015, pp. 2111–2117.

Yang C., Z. Liu, D. Zhao, M. Sun, E. Y. Chang, Network representation learning with rich text information., in: IJCAI, 2015, pp. 2111–2117.

Yang Z., W. W. Cohen, and R. Salakhutdinov, “Revisiting semisupervised learning with graph embeddings,” in Proc. 29th Int. Conf. Mach. Learn., 2016, pp. 40–48.

Yang Z., J. Tang, and W. Cohen, “Multi-modal Bayesian embeddings for learning social knowledge graphs,” in Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 2287–2293.

Yao L., Y. Zhang, B. Wei, Z. Jin, R. Zhang, Y. Zhang, and Q. Chen, “Incorporating knowledge graph embeddings into topic modeling,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2017, pp. 3119–3126.

Yin M., J. Gao, and Z. Lin, “Laplacian regularized low-rank representation and its applications,” IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell., vol. 38, no. 3, pp. 504–517, Mar. 2016

Yu K., W. Chu , S. Yu , V. Tresp , Z. Xu , Stochastic relational models for discriminative link prediction, in: NIPS, 2006, pp. 1553–1560 .

Zhang D., J. Yin, X. Zhu, and C. Zhang, “Collective classification via discriminative matrix factorization on sparsely labeled networks,” in Proceedings of the 25th ACM International Conference on Information and Knowledge Management, 2016, pp. 1563–1572.

Zhang D., J. Yin, X. Zhu, and C. Zhang, “Homophily, structure, and content augmented network representation learning,” in Proc. IEEE Int. Conf. Data Mining, 2016, pp. 609–618.

Zhang C., K. Zhang, Q. Yuan, H. Peng, Y. Zheng, T. Hanratty, S. Wang, and J. Han, “Regions, periods, activities: Uncovering urban dynamics via cross-modal representation learning,” in Proceedings of the 26th International Conference on World Wide Web, 2017, pp. 361–370.

Zhang H., X. Shang, H. Luan, M. Wang, and T. Chua, “Learning from collective intelligence: Feature learning using social images and tags,” ACM Trans. Multimedia Comput. Commun. Appl., vol. 13, no. 1, pp. 1:1–1:23, 2016.

Zhang Q. and H. Wang, “Not all links are created equal: An adaptive embedding approach for social personalized ranking,” in Proc. 33rd Int. ACM SIGIR Conf. Res. Develop. Inf. Retrieval, 2016, pp. 917–920.

Zhao N., H. Zhang, M. Wang, R. Hong, and T. Chua, “Learning content-social influential features for influence analysis,” *Int. J. Multimedia Inf. Retrieval*, vol. 5, no. 3, pp. 137–149, 2016.

Zhao X., A. Chang, A. D. Sarma, H. Zheng, and B. Y. Zhao, “On the embeddability of random walk distances,” *Proc. VLDB Endowment*, vol. 6, no. 14, pp. 1690–1701, 2013.

Zhao Y., Z. Liu, and M. Sun, “Representation learning for measuring entity relatedness with rich information,” in *Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell.*, 2015, pp. 1412–1418.

Zhu S., K. Yu, Y. Chi, and Y. Gong, “Combining content and link for classification using matrix factorization,” in *Proceedings of the 30th Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval*, 2007, pp. 487–494.

Zhou Y., H. Cheng, J.X. Yu, Graph clustering based on structural/attribute similarities, *Proc. VLDB Endow.* 2 (1) (2009) 718–729 .

Wang J., V. W. Zheng, Z. Liu, and K. C. Chang, “Topological recurrent neural network for diffusion prediction,” in *Proc. IEEE Int. Conf. Data Mining*, 2017, pp. 475–484.

Wang X., P. Cui, J. Wang, J. Pei, W. Zhu, and S. Yang, “Community preserving network embedding,” in *Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell.*, 2017, pp. 203–209.

Wang Z. and J. Li, “Text-enhanced representation learning for knowledge graph,” in *Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell.*, 2016, pp. 1293–1299.

Zhou C., Y. Liu, X. Liu, Z. Liu, and J. Gao, “Scalable graph embedding for asymmetric proximity,” in *Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell.*, 2017, pp. 2942–2948.

Wei X., L. Xu, B. Cao, and P. S. Yu, “Cross view link prediction by learning noise-resilient representation consensus,” in *Proc. 23rd Int. Conf. World Wide Web*, 2017, pp. 1611–1619.

Gonzalez J.E., R. S. Xin, A. Dave, D. Crankshaw, M. J. Franklin, and I. Stoica, “Graphx: Graph processing in a distributed dataflow framework,” in *Proc. 9th USENIX Conf. Operating Syst. Des. Implementation*, 2014, pp. 599–613.

Low Y., D. Bickson, J. Gonzalez, C. Guestrin, A. Kyrola, and J. M. Hellerstein, “Distributed graphlab: A framework for machine learning and data mining in the cloud,” *Proc. VLDB Endow.*, vol. 5, no. 8, pp. 716–727, 2012.

Kumar P. and H. H. Huang, “G-store: High-performance graph store for trillion-edge processing,” in *Proc. Int. Conf. High Perform. Comput. Netw. Storage Anal.*, 2016, pp. 71:1–71:12.

Satish N., N. Sundaram, M. M. A. Patwary, J. Seo, J. Park, M. A. Hassaan, S. Sengupta, Z. Yin, and P. Dubey, “Navigating the maze of graph analytics frameworks using massive graph datasets,” in *Proc. ACM SIGMOD Int. Conf. Manag. Data*, 2014, pp. 979–990.

Bengio Y., A. C. Courville, and P. Vincent, “Representation learning: A review and new perspectives,” *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, vol. 35, no. 8, pp. 1798–1828, Aug. 2013.

Mahmood A., M. Small, S. A. Al-Maadeed, and N. M. Rajpoot, “Using geodesic space density gradients for network community detection,” *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, vol. 29, no. 4, pp. 921–935, Apr. 2017.

Goyal P. and E. Ferrara, “Graph embedding techniques, applications, and performance: A survey,” *CoRR*, vol. abs/1705.02801, pp. 1–19, 2017.

Nishana S.S. and S. Surendran, “Graph embedding and dimensionality reduction-a survey,” *Int. J. Comput. Sci. Emerging Technol.*, vol. 4, no. 1, pp. 29–34, 2013.

Wang Q., Z. Mao, B. Wang, and L. Guo, “Knowledge graph embedding: A survey of approaches and applications,” *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, vol. 29, no. 12, pp. 2724–2743, Dec. 2017.

Zhao X., A. Chang, A. D. Sarma, H. Zheng, and B. Y. Zhao, “On the embeddability of random walk distances,” *Proc. VLDB Endowment*, vol. 6, no. 14, pp. 1690–1701, 2013.

Perozzi B., R. Al-Rfou, and S. Skiena, “Deepwalk: Online learning of social representations,” in *Proc. 17th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discovery Data Mining*, 2014, pp. 701–710.

Man T., H. Shen, S. Liu, X. Jin, and X. Cheng, “Predict anchor links across social networks via an embedding approach,” in Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 1823–1829.

Pimentel T., A. Veloso, and N. Ziviani, “Unsupervised and scalable algorithm for learning node representations,” Int. Conf. Learn. Representations, pp. 1–4, 2017.

Wang D., P. Cui, and W. Zhu, “Structural deep network embedding,” in Proc. 17th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discovery Data Mining, 2016, pp. 1225–1234.

Cao S., W. Lu, and Q. Xu, “Grarep: Learning graph representations with global structural information,” in Proc. 18th ACM Conf. Inf. Knowl. Manage., 2015, pp. 891–900.

Tian T., B. Gao, Q. Cui, E. Chen, and T. Liu, “Learning deep representations for graph clustering,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2014, pp. 1293–1299.

Cao S., W. Lu, and Q. Xu, “Deep neural networks for learning graph representations,” in Proc. 26th AAAI Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 1145–1152.

Ahmed A., N. Shervashidze, S. Narayanamurthy, V. Josifovski, and A. J. Smola, “Distributed large-scale natural graph factorization,” in Proc. 23rd Int. Conf. World Wide Web, 2013, pp. 37–48.

Jin Z., R. Liu, Q. Li, D. D. Zeng, Y. Zhan, and L. Wang, “Predicting user’s multi-interests with network embedding in health-related topics,” in Proc. IEEE Int. Joint Conf. Neural Netw., 2016, pp. 2568–2575.

Liu L., W. K. Cheung, X. Li, and L. Liao, “Aligning users across social networks using network embedding,” in Proc. 7th Int. Joint Conf. Artif. Intell., 2016, pp. 1774–1780.

Tang T., M. Qu, M. Wang, M. Zhang, J. Yan, and Q. Mei, “Line: Large-scale information network embedding,” in Proc. 23rd Int. Conf. World Wide Web, 2015, pp. 1067–1077.

J. Leskovec, A. Krevl, SNAP datasets: Stanford large network dataset collection, 2014, (<http://snap.stanford.edu/data>).

Grover A. and J. Leskovec, “Node2vec: Scalable feature learning for networks,” in Proc. 17th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discovery Data Mining, 2016, pp. 855–864

Z. Yang, W. W. Cohen, and R. Salakhutdinov, “Revisiting semisupervised learning with graph embeddings,” in Proc. 29th Int. Conf. Mach. Learn., 2016, pp. 40–48.

Nakov, P.; Marquez, L.; and Guzmán, F. 2016. It takes three to tango: Triangulation approach to answer ranking in community question answering. In EMNLP

Goodfellow, I.; Pouget-Abadie, J.; Mirza, M.; Xu, B.; Warde-Farley, D.; Ozair, S.; Courville, A.; and Bengio, Y. 2014. Generative adversarial nets. In NIPS.

