

图-解决模式识别 (Pattern Recognize 问题)

Node occurance 边的关联性

节点的属性

边的信息

$$X_V \in \mathbb{R}^{|V| \times d}$$

$$X_E \in \mathbb{R}^{|E| \times d_E}$$

动态图 在紧凑的表示中集成拓扑和时间信息能力，更多用于建模动态系统，如社交网络预测、推荐系统、交通预测、谣言传播等等，结合了顺序/时序数据处理和静态图学习的挑战。图被要求处理随时间变化的动态的拓扑结构 (and/or) (边数) 属性 (节点属性边属性)，为了对动态系统建模。

对顺序数据进行处理，捕获序列不同实体之间的依赖关系。

主要有 LSTM 的卷积架构所取代。

基于解码器/编码器框架的序列模型，如 Transformer、依赖于注意力机制在静态图学习，克服图表示中缺乏节点排序所固有的置换不变性/等变性约束。

解决方法消息传递神经网络 MPNN

不同的 DG

离散的/连续的

边进化/节点进化/属性进化

同质与异质

学习环境：直推式还是归纳式

推断 (前向预测) 阶段

通过输入 X 预测 Y

学习阶段 (反向优化)

根据 Y 和 Y', 优化参数

如前所述，监督学习旨在学习输入空间 X 和输出空间 Y 之间的映射函数。X 可以表示的空间。本小节现在讨论空间 Y。

由于动态图涉及来自图和顺序时间的概念，因此必须考虑这两个方面来定义空间 Y。当学习序列数据的统计模型时，输入 X 可以由 T 个时间步长的 d 维特征表示，表示为  $X \in \mathbb{R}^{T \times d}$ 。

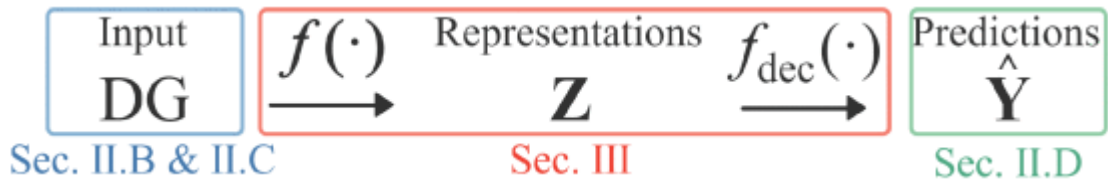
输出 Y 的粒度可以是时间步长级别 (每个时间步长一个输出，如在词性标记或更一般地序列标记中)，或聚集的 (一个输出用于许多输入，如在情感分类或更一般地序列分类中)。在静态图学习中，除了特征 X<sub>V</sub> 和 X<sub>E</sub> 之外，输入还具有拓扑信息。至于序列，输出 Y 可以是局部的 (每个节点或每条边一个标签) 或全局的 (每个子图或整个图一个标签)。

Input	$g_{\Theta}(\cdot)$	Predictions	Parameter Updates
$X$	$\longrightarrow$	$\hat{Y}$	$\Theta' = \text{update}(\Theta, \hat{Y}, Y)$
<b>Inference</b>			<b>Learning</b>

许多最新的模型遵循编码器/解码器原理，其中可变长度的输入信号被编码成潜在表示，然后由解码器使用该潜在表示来计算下游任务的输出信号

这里的 Z 就是 embedding

再把 embedding 通过解码器得到预测



输入和输出序列的单元可能具有不同的顺序。  
 学习潜在表示（也称为嵌入）被称为表示学习。  
 当有多个节点/边的类型（项目和用户），用类型映射函数

GNN/GAT/K-GNN

DG 动态图——两种形式

一种离散形式的

DTDG

只要记住每一个时间段的快照 (snapshot->ti)

DTDG= (G1,G2...,GT)

一种连续形式的

CTDG 连续时间动态图

基于事件流的形式

每一次事件的变化记录下来

瞬时交互两个节点的 (u, v) 和时间 t

Contact -Sequence ={(ui,vi,ti)}

Event-Based={{(ui,vi,ti,delta i)} 起始(出现)时间 ti 和持续时间 delta i, 两个节点关联的边的存在的时刻

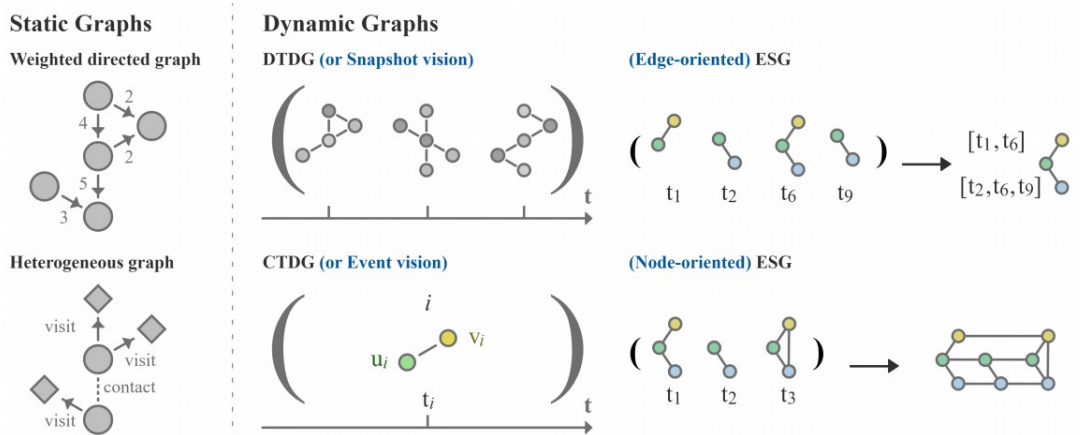
Interval-Graph={{(ui,vi,Te);Te=((t1,t1'),(t2,t2'))}, 用 Te 来表示边的所有活动

Graph stream 大规模图, 用于边的添加和减少 delta i=1 add or -1deletion 标志位不考虑持续时间

Graph Stream={ (ui, vi, ti, delta i) }

什么事件?

Ti 时刻下, ui 和 vi 的边增加了/减少了



如何将动态图转换成等价的静态图 ESG?

- 1、基于边的形式 节点的备份+边的联系 (节点间+时间戳, 加入了节点之间的关联性)
- 2、基于节点的形式

## GNNDelete 如何删除边的关联性

定义动态度：

- 1、边和顶点都固定，fix V,E 时空图（STGCN 时空模型，既要学时间上的，又要学空间上）
- 2、只固定了顶点,fix V
- 3、都变化，vary
- 4、边集不变，节点集变化，没有意义

输出是有粒度：

预测单一时刻的结果

还是多个时刻的

：时间步长级别的（每个时间步长一个输出）

：聚合的，一个输出多个输入（未来五个时间的拓扑结构）

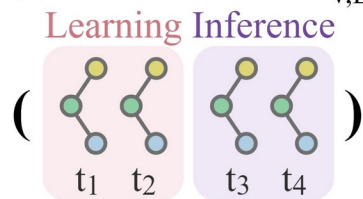
拓扑结构也有局部（子图）和全局的

直推式 原来的拓扑结构不变 做出预测的时候没有在训练过程中没出现过的节点

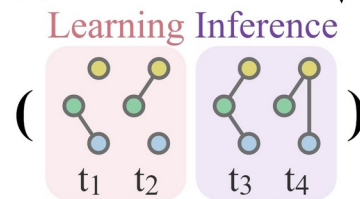
归纳式 做出推断的时候训练过程中没有看到

## Transductive

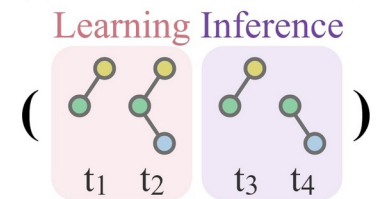
(1) Transductive-fix<sub>V,E</sub>



(2) Transductive-fix<sub>V</sub>

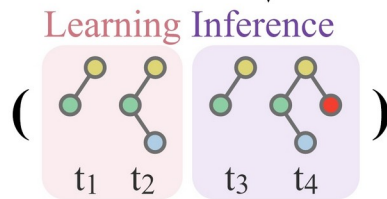


(3) Transductive-vary

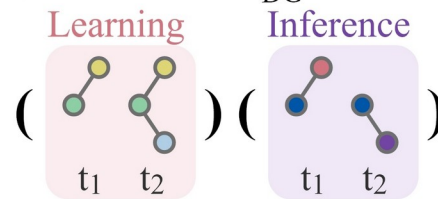


## Inductive

(4) Inductive<sub>V</sub>



(5) Inductive<sub>DG</sub>



离散的时间直推式学习中（DTDG,Transductive），transfix VE：交通流量，传染病病例，犯罪数量，作物产量

图/全局任务：每个快照的分类 睡眠阶段分类；整个 DG 的预测，如骨骼的动作 STG；

Tarnsfix V：电信网络中连通性，会议中个人联系

离散的归纳式学习（DTDG Inductive）中 社交网络未来快照的节点分类或链接预测

图集输出 基于社交网络传播树的快照对真是和假新闻分类

连续时间（CTDG）

推荐系统、社交网络

CTCG 再其最小时间单元下不能访问全局/整个图信息，全局的时间步标签是无意义的

但是全局聚合任务可以通过聚合不同时间步长的节点来实现，如连续时间内谣言检测

CTDG 也可以定期拍摄快照转换为 DTDG

动态时间下的任务

为了评估给定任务的统计模型的性能，传统机器学习

分类任务

回归任务

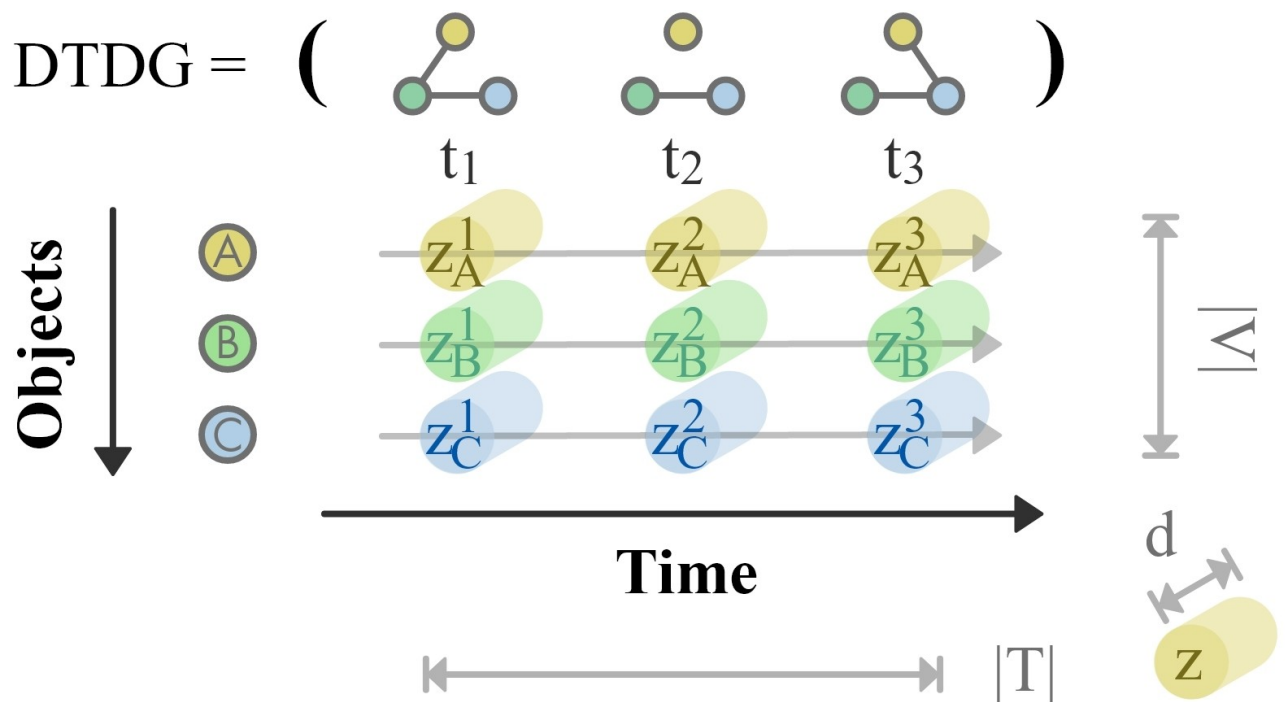
节点排名任务

动态任务 沿着时间轴计算静态度量

动态图的嵌入

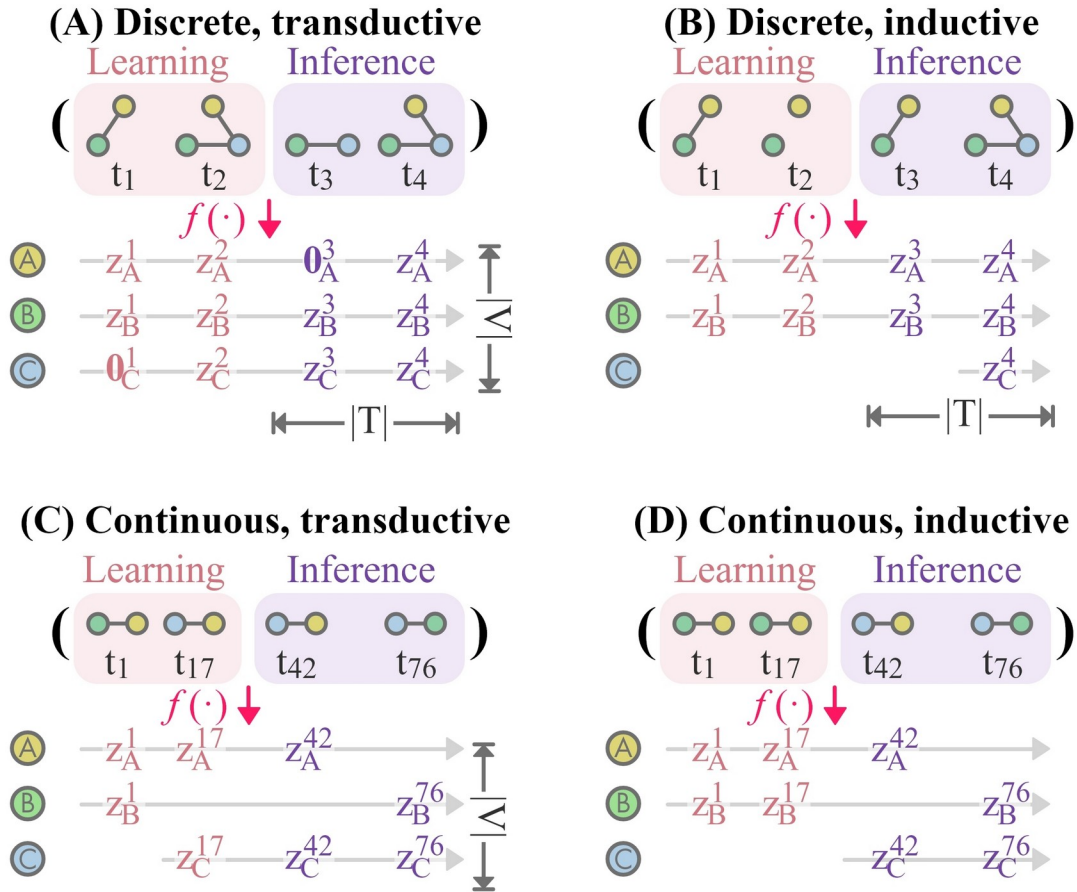
从编码器-解码器的角度来看，深度学习统计模型首先将原始输入映射到表示为  $Z$  的嵌入中，然后利用  $Z$  来预测输出[12, 4]。图形可以在节点/边缘级别或（子）图级别嵌入[13, 5]。

节点级嵌入有利于广泛的节点相关任务，并允许保留更完整的输入信息以供稍后计算[5]以同样的方式，时间步长级嵌入比时间聚合嵌入保留更多的信息。类似地，当在顺序数据上学



$$Z \in \mathbf{R}^{|V| \times |T| \times d}, z_v^t \in \mathbf{R}^d$$

对不同的动态图，如何设计 encoder 的 settings

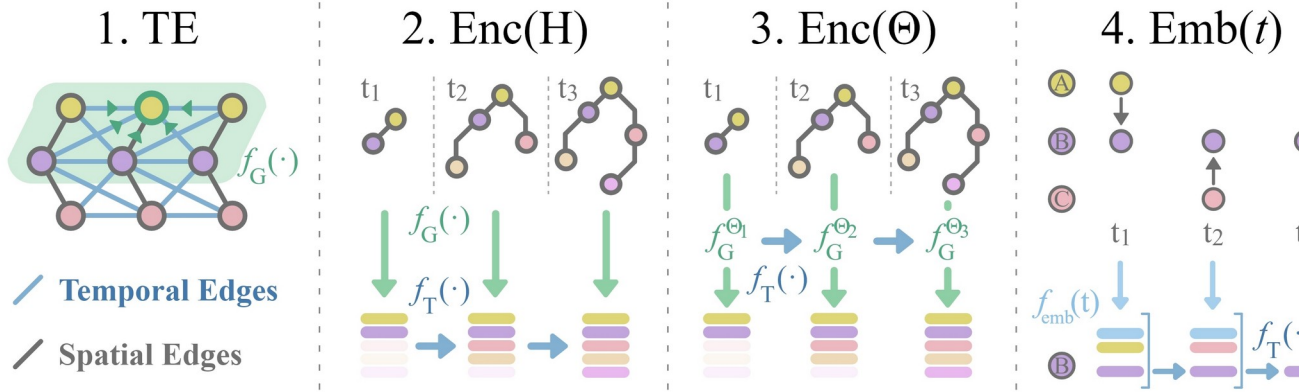


为了将动态图信息化地编码为张量或向量列表，DGNN 必须捕获结构信息及其随时间的演化。因此，为了分别处理拓扑和时间，DG 通常被分解或转换为等效静态（子）图 [74, 89, 75]，随机游走 [113, 124, 123, 121, 122]，或者是矩阵序列 [95, 86, 93]。

在文献中，通过将不同的静态图编码器  $f_G(\cdot)$  与时态数据的  $f_T(\cdot)$  相结合，出现了许多方法。大量的图和时态数据编码器是本节中回顾的 DG 编码器的基础。这些编码器在附录 B 和 C 中进行了描述。

在下面的小节中，我们提出了一个 DGNN 模型的分类，它依赖于五个类别。我们的分类，如图 7 所示，是基于处理时间和结构信息的策略。

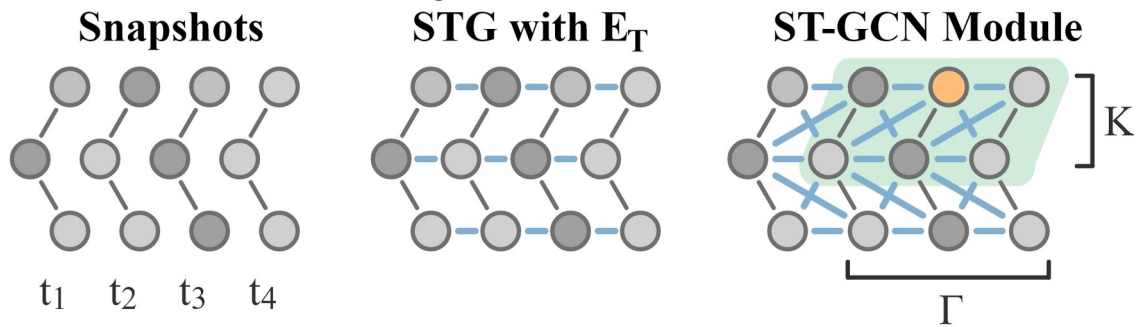
1. 通过拓扑对时间边缘进行建模并对 ESG 进行编码，表示为 TE（第 3.1 节）。
2. 对隐藏状态进行顺序编码，记为  $\text{enc}(H)$ （第 3.2 节）。
3. 对 DGNN 参数进行顺序编码，表示为  $\text{enc}(\Theta)$ （第 3.3 节）。
4. 通过属性嵌入发生时间  $t$  作为 ESG 的边缘特征，表示为  $\text{emb}(t)$ （第 3.4 节）。
5. 抽样因果游走，表示为 CauseRW（第 3.5 节）。



请注意，这五种方法并不是唯一的，也就是说，它们可以组合在一起并用于同一 DG。

1、对时序的边进行建模——转换为静态图

FixV,E 考虑了时间信息 (embedding ET)



ASTTN

2、对隐藏状态进行顺序编码

对拓扑结构和时间戳信息进行编码

RST

DyReG

Dyn-GCN

把通过  $f_G$  编码的信息经过 LSTM 或者 GRU (Sequential encoding) 进行时间序列的学习

$$Z^t = f_T((f_G(X^t))), \text{ or } f_T(X^T) \oplus f_G(X^t)$$

解码的时候也要用 sequential 去阶码

3、对于新增的节点很难预测，及没有将  $f_G$  和  $f_T$  结合起来

对应的是 transformer 直接把时间戳的信息编码进去了

通过 ( $f_G$  参数) 时间步来学习时间信息

将时间信息的编码加入到  $f_G$  里

$$\Theta^t_{f_G} = LSTM(\Theta^{t-1}_{f_G})$$

$$\Theta^t_{f_G} = GRU(H^t, \Theta^{t-1}_{f_G})$$

再经过编码，就没有时间上的序列性了

4、

还把时间作为嵌入信息，如何编码时间信息

Temporal point process

在每个节点上加一个 t 的 embedding

3、随机游走的方法

对于异质图的方法

怎么设计一个 GNN

设计 Workflow

如何优化框架

[时序图神经网络](#)

1、创建数据，根据快照的方式构建图

1. 创建数据

根据离散型数据构建，也就是快照的方式。Time step 按月进行分割

时间	graph	time step
2021.5.1	a-b; b-c;	1
2021.5.2	c-e; b-c;	1
2021.5.10	b-f;	1
2021.6.1	a-b; b-d;	2
2021.6.2	c-e;	2
2021.7.5	f-g;	3
2021.7.9	g-a;	3

按照time-step构建图

time-step 1

表示节点的特征，如果没有特征用 one-hot 表示

计算 attention 系数

时间注意力

如何计算 loss?