

融合模体感知和图 Transformer 编码的社区检测^{*}

郭兴君, 李晓红, 史婉瑶, 高文超

(西北师范大学计算机科学与工程学院, 甘肃 兰州 730070)

摘要:针对已有社区检测方法存在忽略高阶结构信息,且在信息引入过程中极易产生碎片的问题,提出了一种融合模体感知和图 Transformer 编码的社区检测方法。首先,将原图中的极大完全子图视为模体,并以模体为顶点对原图进行重构,捕获模体邻接矩阵。同时,使用混阶外切边编码获取原图的残留边信息,解决碎片问题,利用位置编码和内权边编码捕获重构图上的位置信息和边信息。其次,使用图 Transformer 提取原图携带的初始特征,再对编码所得的位置信息和边信息及初始特征进行融合,获得模体嵌入矩阵,实现社区检测。最后,在几个不同数据集上的实验结果表明,所提方法可以有效提高社区检测的性能,而且,对重叠社区检测和多社区公共顶点检测也是有效的。

关键词:社区检测;图 Transformer;模体;图编码

中图分类号:TP393.1

文献标志码:A

doi:10.3969/j.issn.1007-130X.2024.11.021

Community detection by fusion of motif-aware and graph Transformer encoding

GUO Xing-jun, LI Xiao-hong, SHI Wan-yao, GAO Wen-chao

(College of Computer Science & Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

Abstract: The higher-order connectivity structure has been largely ignored, which contains a better signature of community compared with the lower-order connectivity structure, and the high-order information causes the inevitable fragmentation problem. To solve those problems, a motif-aware and graph Transformer (MGTrans) for community detection is proposed. Firstly, the maximal complete subgraph in the graph is searched and regarded as a motif, and the original graph is reconstructed with the motif as a unit to capture the motif adjacency matrix. At the same time, mixed-order outer-cut edges encoding is used to obtain the residual edge information of the original graph to solve the fragmentation problem, and position information and edge information on the reconstructed graph are captured through a position encoding matrix and motif short path with weight encoded. Then, the initial features are extracted by a graph transformer. Combining position encoding matrix, edge encoding matrix and initial features through the attention network to get motif embedding matrix for the community detection. Finally, The experimental results on several different datasets show the effectiveness of the MGTrans in improving the community detection performance of state-of-the-art methods and effectiveness for overlapping community detection and multi-community public node detection.

Key words: community detection; graph Transformer; motif; graph encoding

^{*} 收稿日期:2023-10-16;修回日期:2024-01-05

基金项目:国家自然科学基金(61862058);甘肃省科技计划资助(20JR5RA518);甘肃省自然科学基金(20JR10RA076);西北师范大学科研项目(NWNU-LKQN2022-03)

通信作者:李晓红(xiaohongli@nwnu.edu.cn)

通信地址:730070 甘肃省兰州市西北师范大学计算机科学与工程学院

Address: College of Computer Science & Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, Gansu, P. R. China

1 引言

社区检测是网络分析中的基本问题之一,旨在寻找网络中相互关联且连接密切的顶点集合,以便更好地理解 and 解释复杂网络中隐藏的各类关系。现实世界中,社区检测被广泛应用在许多领域和场景中,例如在社交网络中找寻潜在的相似用户^[1]、生物学中发现功能相似的蛋白质^[2]、推荐系统中为相似用户推荐相同产品^[3]等。可见,将网络中更相似的顶点按群落分离能简化对网络的研究,对高效挖掘更深的信息有着巨大的现实意义。

2002年,Newman提出了模块度的概念之后,研究人员对复杂网络中的社区检测展开了大量的研究,社区检测技术得到了快速发展。启发式 K-L (Kernighan-Lin)算法^[4]根据增益函数的值将网络划分为已知大小的2个社区。层次聚类算法^[5]根据顶点的相似性来迭代地合并社区,最终形成不可再分的独立社区结构。Grivan等人^[6]通过删除网络中相似性较低的边,形成社区结构。后期还提出诸多优化算法^[7,8]。但是,目前的网络大多都复杂且庞大,传统算法已不再适用。

最近的研究大都聚集并依赖使用深度学习发现社区结构。比如使用图卷积神经网络 GCN (Graph Convolutional Network)^[9]聚合邻域顶点的全局特征信息学习网络表示,进而通过聚类算法实现社区检测。利用 Transformer 中的自注意力机制允许模型从序列的任意位置获取信息的优势处理长距离依赖关系,基于图注意力的 Transformer 与 GCN 的结合^[10]进行社区检测的方法逐渐受到重视。但是,这些方法在捕获网络特征时没有考虑拓扑结构,导致注意力不能关注到网络的完整信息。Li等人^[11]提出使用模体构建超图,设计边增强方法增强原网络的连通性,从而捕获网络高阶结构,并通过对重新布线以后的网络进行划分以获得高阶社团结构。该方法很好地解决了碎片问题,但存在过于关注高阶信息,破坏甚至丢弃重要低阶信息,导致原图拓扑结构遭到破坏的弊端。而且,通过模体捕获网络信息时依然存在碎片问题,使得本不孤立的边变成了孤立边。

为了解决上述所有问题,本文提出了一种融合模体感知和图 Transformer 编码的社区检测方法 MGTrans (Motif-aware and Graphy Transformer)。具体来讲,本文方法首先寻找图中的极大完全子图作为捕获高阶信息的模体,并对原图进行重

构,获取模体矩阵,同时通过各种编码构建混阶外切编码矩阵、位置编码矩阵和内权边编码矩阵。其次,通过 Transformer 线性映射捕获模体的初始特征,使用注意力网络融合特征信息,得到模体嵌入矩阵。最后,使用经典的 k -means 算法实现社区划分。实验结果表明,该方法不仅保留了原始图的低阶连接关系,又能捕获高阶结构信息,还解决了先前无法避免的碎片问题。

2 问题定义

设 $G=(V,E)$ 为无向图, V 是顶点集, E 是边集, $|V|$ 是顶点个数, $|E|$ 是边数, $e(v_i, v_j)$ 表示顶点 v_i 与顶点 v_j 之间的一条边。

2.1 极大完全子图与模体

若图 G 中任意 2 个顶点 v_i 与顶点 v_j 之间都存在一条边,则称 G 是完全图,且有如下定义:

定义 1 设子图 G_i 是图 G 的一个完全子图,如果 G_i 是一个完全图,并且不被另一个更大的完全子图所包含,则称子图 G_i 是 G 的一个极大完全子图。

如图 1, $G_1=\{1,2,3\}$ 和 $G_2=\{1,2,3,4\}$ 都是 G 的完全子图,但因 G_2 包含 G_1 ,且找不到任何完全子图包含 G_2 ,因此, G_2 是极大完全子图, G_1 不是极大完全子图。同理, $G_3=\{7,8,10\}$ 不是极大完全子图,而 $G_4=\{7,8,10,11\}$ 是极大完全子图。

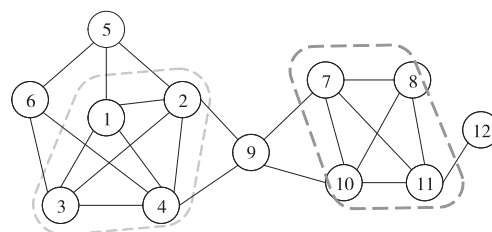


Figure 1 Maximal fully connected subgraph

图 1 极大完全子图示例

定义 2 模体 M 是图中的一个极大完全子图。

$M_i=(V_{M_i}, E_{M_i})$ 表示第 i 个模体,其中, $V_{M_i}=\{v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{i|V_{M_i}|}\}$ 是构成模体 M_i 的顶点集合, E_{M_i} 是模体 M_i 的边集合。如图 1, $G_2=\{1,2,3,4\}$ 和 $G_4=\{7,8,10,11\}$ 是极大完全子图,因此可将 G_2 和 G_4 分别记为模体 M_1 和 M_2 。

根据“社区内部的连接应该尽可能紧密,而社区之间的连接应该相对稀疏”的特征,可推知,具有这种性质的模体可为社区划分提供重要依据。

2.2 图 Transformer

Transformer^[12] 主要由自注意力模块和前馈神经网络 FFN (Feed-Forward neural Network) 组

成。自注意力模块的输入是顶点的特征矩阵 $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n]^T \in \mathbf{R}^{n \times d}$ 的投影矩阵 $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}$, $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^d$ 是顶点 v_i 的特征表示, d 是向量 $\mathbf{x}_i$ 的维度, n 是顶点个数, 如式(1)所示。特征矩阵 $\mathbf{X}$ 的投影矩阵 $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}$ 通过 3 个可训练的线性映射矩阵 $\mathbf{W}_Q \in \mathbf{R}^{d \times d_{out}}, \mathbf{W}_K \in \mathbf{R}^{d \times d_{out}}, \mathbf{W}_V \in \mathbf{R}^{d \times d_{outV}}$ 投影而成, 如式(2)所示:

$$Attention(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = softmax\left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^T}{\sqrt{d_{out}}}\right)\mathbf{V} \in \mathbf{R}^{n \times d_{outV}} \quad (1)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{X}\mathbf{W}_Q, \mathbf{K} = \mathbf{X}\mathbf{W}_K, \mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{W}_V \quad (2)$$

其中, d_{out} 是 $\mathbf{Q}$ 和 $\mathbf{K}$ 矩阵的列数, d_{outV} 是 $\mathbf{V}$ 矩阵的列数, 也是注意力网络输出矩阵的列维度。特别地, 本文取 $d_{out} = d_{outV} = d$ 。受文献[13]启发, 将归一化层 LN(Layer Normalization)提前至多头注意力网络和前馈神经网络之前。本文亦使用这种改进的图 Transformer 编码高阶的位置信息和边信息, 该方法可以弥补传统方法的缺陷, 使获取到的网络信息更加丰富。因此, 第 l 层图 Transformer 的输出表示如式(3)所示:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}'^{(l)} &= MHA(LN(\mathbf{X}^{(l-1)})) + \mathbf{X}^{(l-1)} \\ \mathbf{X}^{(l)} &= FFN(LN(\mathbf{X}'^{(l)})) + \mathbf{X}'^{(l)} \end{aligned} \quad (3)$$

其中, $MHA(\cdot)$ 是多头注意力网络, $FFN(\cdot)$ 是前馈神经网络, $LN(\cdot)$ 是归一化层。

3 社区检测

本文所提 MGTrans 方法的框架如图 2 所示。首先将原图重构为以模体为顶点的新图, 并分别对原图和重构图进行多角度编码, 获得模体编码, 最

后实现社区检测。本节将详细描述 MGTrans 的实现细节。

3.1 模体构建

本文引入模体将对单个顶点信息的处理转化为对子图信息的处理, 以捕获高阶信息。Bron-Kerbosch 算法^[14]用于寻找图中所有极大完全子图, 在实践中被认为比其他算法更加有效。因此本文使用 Bron-Kerbosch 算法提取网络中所有极大完全子图, 并且将提取到的极大完全子图视为一个模体。特别地, 若原图存在孤立顶点, 则孤立顶点被视为一个模体。对于图 G , 构建的模体集合如式(4)所示:

$$Mot = \{M_1, M_2, \dots, M_m\} \quad (4)$$

其中, m 是模体个数, 也是下文重构图中的顶点个数。

接下来, 重构原图。不局限于模体 M_i 的形状大小, 将原图重新构建为一个无向带权图, 记为 $G^M = (V^M, E^M)$, 其中, $V^M = Mot$, E^M 为边集合。具体来说, 原图中的模体抽象为 G^M 中的顶点, 任意模体 M_i 和 M_j 之间是否连边 $e(M_i, M_j)$ 依赖于它们之间的相似度是否为 0。边上的权重即为相似度, 相似度计算如式(5)所示。模体矩阵 $\mathbf{A}_M \in \mathbf{R}^{m \times m}$ 表示 G^M 的邻接矩阵, 用来存储模体之间的关系, 同时将 $\mathbf{A}_M$ 的第 i 列视为模体 M_i 的编码表示, $\mathbf{A}_M$ 中的元素如式(6)所示:

$$Sim(M_i, M_j) = \frac{|V_{M_i} \cap V_{M_j}|}{|V_{M_i} \cup V_{M_j}|} \quad (5)$$

$$A_M(i, j) = \begin{cases} Sim(M_i, M_j), & e(M_i, M_j) \in E^M \\ 1, & M_i = M_j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6)$$

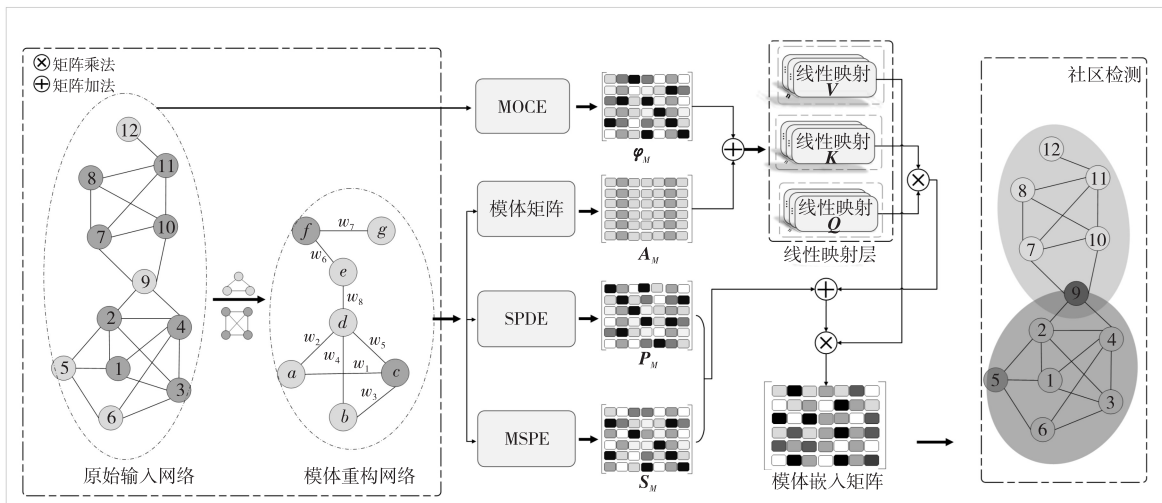


Figure 2 Overall structure of MGTrans method

图 2 MGTrans 方法总体结构

特别地,设置模体矩阵 $\mathbf{A}_M$ 对角线上的元素 $A_M(i,i)=1$,表示模体自身的连接强度高于其他任意 2 个不同模体之间的连接强度。将这种自循环结构统计在模体连接矩阵中,可以更好地获得模体自身的信息。

以图 1 所示的无向图为例来说明极大完全子图的提取和重构图的构建过程。首先,找到所有的极大完全子图, $G_1=\{1,2,5\}$ 、 $G_2=\{3,4,6\}$ 、 $G_3=\{1,2,3,4\}$ 、 $G_4=\{2,4,9\}$ 、 $G_5=\{7,9,10\}$ 、 $G_6=\{7,8,10,11\}$ 、 $G_7=\{11,12\}$ 。通过式(6)计算出各子图之间的相似度。其次,将子图抽象为顶点,若相似度大于 0,则顶点之间连边;否则,不连边。最后可构建如图 3a 所示的无向带权图,图 3b 为其对应的模体矩阵。

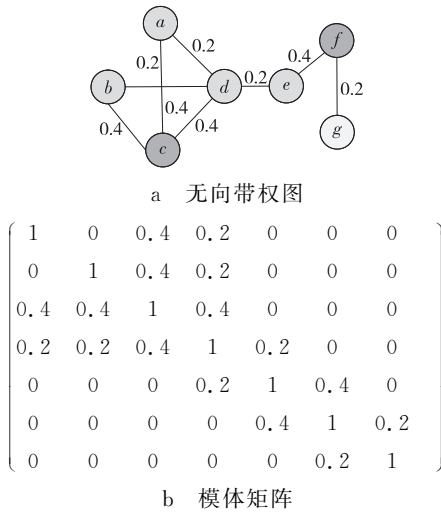


Figure 3 Reconstruction graph and motif matrix

图 3 重构图和模体矩阵

通过这种编码方式,可以把原始网络中低阶信息和高阶关系都融入到重构图中,这对划分社区的结果是有益的。可以发现,在重构图中,边上的权重越大,顶点所代表的极大完全子图之间就越相似,即它们具有更大的概率被划分到同一个社区。越不相似的 2 个极大完全子图,边上的权重就越小,它们在同一社区的概率就越小。因此,越大的权重越会指导社区划分朝着更好的结果进行。

3.2 模体编码

3.2.1 混阶外切边编码

虽然模体编码有效地提取了高阶信息,但是模体构建过程中出现了一些孤立边。如果忽略对这些边的处理,图的完整性和一阶信息的连续性都将被破坏。因此,本文提出了实现混阶外切边编码 MOCE (Mixed lower-order and high-order Outer-Cut edge Encoding) 模块,旨在编码不属于任何模

体且存在于原图中的边。具体来说,本文提出模体切边率来获取这种边的特征,如式(7)所示:

$$\varphi_M(i,j) = \frac{|E_Z \cap (E - E_M)|}{|E_{M_i} \cup E_{M_j}|} \quad (7)$$

其中, $\varphi_M(i,j)$ 表示模体 M_i 和 M_j 之间的切边率, $E_Z = \{e(v_i, v_j), v_i \in V_{M_i}, v_j \in V_{M_j}\}$ 表示原图中模体 M_i 内顶点 v_i 和 M_j 内顶点 v_j 之间的边, E 是原图的边集, E_M 是所有模体的内部边构成的集合, E_{M_i} 是模体 M_i 内的边集合。最后将每一对模体之间符合条件的边带入式(7)进行计算,将所有模体计算得到的矩阵记为 $\boldsymbol{\varphi}_M$,并将 $\boldsymbol{\varphi}_M$ 的第 i 列视为模体 M_i 低阶边信息的嵌入表示。

然后将获取到的低阶边信息矩阵与高阶模体矩阵融合后经过线性投影层传给注意力网络,从而实现特征提取,这个过程如式(8)所示:

$$\mathbf{H} = \frac{((\mathbf{A}_M + \boldsymbol{\varphi}_M)\mathbf{W}_M)\mathbf{W}_Q((\mathbf{A}_M + \boldsymbol{\varphi}_M)\mathbf{W}_M)\mathbf{W}_K)^T}{\sqrt{d}} \quad (8)$$

其中, $\mathbf{H}$ 是经过线性投影层之后的输出矩阵, $\mathbf{W}_M \in \mathbf{R}^{m \times d}$ 是可训练的线性投影矩阵。

3.2.2 位置编码

Transformer 是基于注意力机制的一种模型框架,注意力机制需要明确研究对象不同位置之间的依赖关系。因此,在获取图特征时须对图顶点的位置依赖关系进行编码。

本文考虑将重构图 G^M 中 2 个模体之间的最小距离看作重构图中模体间的位置依赖,并将其称为位置编码 SPDE (Short Path Distance Encoding)。众所周知,2 个顶点之间的距离越近,它们之间的依赖关系就越强烈,属于同一个社区的概率也将越大。因此,本文引入式(9)所示线性递减函数 $\Phi(t)$ 来体现这种特性。

$$P_M(i,j) = \Phi(t) = e^{at+b}, \quad t = sd(M_i, M_j) \quad (9)$$

其中, $\mathbf{P}_M \in \mathbf{R}^{m \times m}$ 表示 m 个模体的位置编码矩阵, $P_M(i,j)$ 表示 $\mathbf{P}_M$ 的第 i 行第 j 列的元素,函数 $sd(M_i, M_j)$ 用于计算模体 M_i 和 M_j 之间的最小距离; a 和 b 是递减函数 $\Phi(t)$ 中的超参数,本文通过实验发现取 $a=-0.5, b=4$ 效果最好。位置编码实质上就是从相关性角度出发,对图中顶点间的距离进行线性转换。如果 2 个模体间的距离接近 0,则对应的编码值接近 1;如果 2 个模体间不可达,就意味着它们之间的距离趋向于无穷大,则对应的编码值趋近于 0。递减函数 $\Phi(t)$ 正好可以完

全反映这种不相关特性。

3.2.3 内权边编码

边是判断顶点之间是否存在连通的凭证,蕴含了丰富的特征信息,所以边信息是准确划分社区的主要依据,准确快速地捕获图中边的特征及顶点之间的依赖关系是至关重要的。前文编码了模体信息,但模体间的关系还未被捕捉。模体间的连接关系和权重也会影响社区划分的结果,所以这种信息也需要被考虑。本文使用内权边编码 MSPE (Motif Short Path with weighted Encoding) 方式学习模体之间的连接关系。首先,对于任意 2 个模体 M_i 和 M_j ,求得它们的最短路径 $m_{sp}(M_i, M_j) = \{e_1, e_2, \dots, e_N\}$, N 是 M_i 和 M_j 之间最短路径包含的边数。与此同时,将边权重也进行编码,通过计算边特征表示和路径对应可嵌入权重点积的平均值作为边编码的计算方式。式(10)用来表示该编码方法:

$$S_M(i, j) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{x}_{e_k} (\boldsymbol{\omega}_{e_k})^T \quad (10)$$

其中, $S_M(i, j)$ 是模体 M_i 和 M_j 之间的内权边编码, $\mathbf{x}_{e_k} \in \mathbf{R}^d$ 是模体 M_i 和 M_j 最短路径 $m_{sp}(M_i, M_j)$ 中的第 k 条边 e_k 的嵌入特征, $\boldsymbol{\omega}_{e_k} \in \mathbf{R}^d$ 是它们之间的第 k 条边 e_k 的权值嵌入,并用 $\mathbf{S}_M \in \mathbf{R}^{m \times m}$ 表示映射之后输出的内权边编码。

3.3 编码融合

上文详细阐述的多种编码方式旨在从不同角度将网络尽可能多的信息编码到顶点特征上,使其可以更好地进行社区划分。具体来讲,首先考虑那些划分模体时被忽略的残留边,这种边不属于模体,但却在原图中真实存在,因此,需要将这类边隐含的潜在信息补充到高阶模体信息中。其次,通过最短距离来衡量不同模体之间的位置信息,这将使得图中每个顶点可以关注其他顶点,并通过递减函数使模型更多地关注到顶点附近的顶点。再次,用最短路径编码获取整个模体的边信息,通过注意力网络聚合边特征。最后,将编码到的不同矩阵作为注意力层的偏置项用于社区划分。最终的表示如式(11)和式(12)所示:

$$\mathbf{X}_M = \text{softmax}(\mathbf{Z})((\mathbf{A}_M + \boldsymbol{\Phi}_M)\mathbf{W}_M)\mathbf{W}_V \quad (11)$$

$$\mathbf{Z} = \mathbf{H} + \mathbf{P}_M + \mathbf{S}_M \quad (12)$$

其中, $\mathbf{X}_M$ 是模体嵌入矩阵, $\mathbf{Z}$ 是融合之后的模体编码矩阵。

3.4 时间复杂度分析

MGTrans 方法主要由极大完全子图的提取和

模体编码 2 部分构成。首先, Bron-Kerbosch 算法要遍历每个顶点,并逐层扩展其邻居,时间复杂度与图的顶点和边数成正比,为 $O(|V| \cdot |E|)$ 。其次,模体编码的时间复杂度包含 3 部分。计算模体切边率的复杂度是 $O(|V| \cdot |E| \cdot m)$,多头注意力网络提取特征的复杂度为 $O(H \cdot m^2 \cdot d)$, H 是多头注意力的头数。通常,相比于 m 和 d , H 的值较小,因此,混阶外切边编码的时间复杂度约为 $O(|V| \cdot |E| \cdot m + m^2 \cdot d)$ 。位置编码模块的复杂度是 $O(m^2)$;内权边编码的复杂度是 $O(m^2 \cdot d)$ 。综上所述, MGTrans 方法的时间复杂度约为 $O(|V| \cdot |E| \cdot m + m^2 \cdot d)$ 。

4 实验与结果分析

4.1 数据集

为评估本文所提出的 MGTrans 方法的性能,本节选择在 4 个数据集上进行实验,分别是 Polblogs (<https://www-personal.umich.edu/~mehjn/netdata/>)、Mich (<https://escience.rpi.edu/data/DA/fb100/>)、dblp (<https://www.aminer.cn/billboard/aminernetwork>) 和 Orkut。另外,考虑到重叠社区的检测,又选取 3 个多标签数据集,包括 Wikipedia (<http://snap.stanford.edu/node2vec/POS.mat>)、BlogCatalog (<http://socialcomputing.asu.edu/datasets/BlogCatalog3>) 和 Flickr (<http://socialcomputing.asu.edu/datasets/Flickr>)。表 1 描述了各数据集的详细信息。

Table 1 Statistics of single-label and multi-label datasets

表 1 单标签和多标签数据集信息

数据集	顶点数	边数	社团数	多标签
Polblogs	1 490	19 090	2	No
Mich	2 933	54 903	13	No
dblp	12 547	55 748	4	No
Orkut	11 751	237 171	5	No
Wikipedia	4 777	184 812	40	Yes
BlogCatalog	10 312	333 983	39	Yes
Flickr	80 531	5 899 882	195	Yes

4.2 评价指标

本文实验选取 3 个最常用的指标来评价所检测社区质量,分别是模块度 Q , 标准化互信息 NMI (Normalized Mutual Information) 和调整兰德系数 ARI (Adjusted Rand Index)。模块度无需对比模型检测结果与真实社区划分就可以客观衡量社

区分质量。 NMI 度量方法划分之后所得到的社区和真实网络社区之间的相似度, NMI 值越接近 1,划分的社区结构与原社区结构越接近。 ARI 用来衡量真实网络和划分网络的吻合程度,也可以度量重叠社区划分程度的好坏,取值范围为 $[-1, 1]$,值越大,社区划分效果越好。

4.3 基线方法

本文实验选择了几种基于网络嵌入的方法以及表现较好的传统方法与本文方法进行对比,方法总结如下:

(1)Deepwalk^[15]:通过随机游走的采样方式来捕获图中顶点之间的共现关系,以此学习顶点的向量表示。

(2)node2vec^[16]:通过学习顶点到低维特征空间的映射,使其最大化保存领域网络顶点,从而学习到一种相似嵌入。

(3)SPaE (Structural Proximity and Equivalence)^[17]:一种混合嵌入方式,不但考虑网络中顶点的结构近邻性,还通过 GDV (Graph Degree Vector) 向量考虑了顶点的结构等价性。

(4)GCN^[9]:通过图卷积方式来获取网络顶点的一阶相似性,以此编码局部图结构信息。

(5)SEAL (Seed Expansion with generative Adversarial Learning)^[18]:通过具有增量更新的图指针网络,从选定的种子顶点中生成社区。

(6)Graphormer (Graph Transformer)^[13]:将 Transformer 应用在图上,通过中心性编码、空间编码和边编码获取顶点之间的信息,最终通过自注意力网络获取顶点的嵌入表示。

(7)EFR-DGC (Enhanced Feature Representation for Deep Graph Clustering)^[19]:通过自编码器学习属性信息,并通过注意力网络学习拓扑信息,通过损失函数优化融合 2 种信息,从而增强节

点特征表示。

(8)SAT (Structure-Aware Transformer)^[10]:提取以每个节点为根的子图,通过新注意力将图结构信息融合到原始注意力网络中,从而获得更加完整的图结构信息。

(9)SENMf (Structural equivalence Embedding method based on the Non-negative Matrix Factorization)^[20]:通过社区嵌入将相似性嵌入到低维向量空间中实现社区发现。

4.4 参数设定

实验设置 Transformer 层数 $L=8$ 、维度 $d=256$ 。对多头注意力的头数设置为 10,同时选择 AdamW 为优化器,并设置超参数 ϵ 为 $1e-8$,同时,将 β_1, β_2 设置为 0.990 和 0.999。峰值学习率设置为 3×10^{-4} 。在基准实验的设定中,选择原论文最优的参数进行实验。此外,模型中的可训练参数是随机初始化的,不同的初始化会导致模型学习到不同的表示,从而导致结果的差异。而且,过少的实验次数可能会降低结果的稳定性,过多的实验次数又会造成计算成本的增加。因此,在保证实验结果稳定准确的情况下,为了减少这种偶然性对实验的影响,节约计算成本,本文采用多次实验取平均值的方式体现方法性能。最终,本文决定采用 10 次结果的平均成绩作为实验结果。

4.5 实验结果与分析

将实验方法与基线方法比较,把获取到的嵌入表示与基线方法嵌入共同通过低维处理后用 k -means 进行社区划分。表 2~表 4 分别展示了 NMI 、 ARI 以及模块度 Q 的值。

实验结果显示,本文方法在 NMI 、 ARI 和 Q 这 3 个指标上均取得了较好的实验结果。尤其在对于大规模网络与稠密网络的实验中,本文方法表

Table 2 NMI of different methods on different datasets

表 2 不同数据集上不同方法的 NMI

数据集	方法									
	Deepwalk	node2vec	SPaE	GCN	SEAL	Graphormer	EFR-DGC	SENMf	SAT	MGTrans
Polblogs	0.538	0.534	0.031	0.289	0.523	0.399	0.540	0.512	0.566	0.580
Mich	0.442	0.414	0.112	0.415	0.428	0.488	0.402	0.299	0.488	0.491
dblp	0.412	0.453	0.130	0.355	0.468	0.506	0.466	0.308	0.507	0.504
Orkut	0.432	0.444	0.108	0.399	0.423	0.498	0.393	0.521	0.500	0.523
Wikipedia	0.347	0.319	0.080	0.321	0.277	0.402	0.411	0.368	0.478	0.486
BlogCatalog	0.399	0.434	0.105	0.316	0.554	0.576	0.445	0.424	0.601	0.601
Flickr	0.398	0.483	0.098	0.335	0.326	0.535	0.496	0.446	0.595	0.598

Table 3 ARI of different methods on different datasets
表 3 不同数据集上不同方法的 ARI

数据集	方法									
	Deepwalk	node2vec	SPaE	GCN	SEAL	Graphormer	EFR-DGC	SENMF	SAT	MGTrans
Polblogs	0.675	0.651	0.016	0.630	0.516	0.653	0.595	0.569	0.666	0.708
Mich	0.402	0.382	0.054	0.203	0.276	0.414	0.397	0.213	0.389	0.432
dblp	0.198	0.204	0.032	0.149	0.293	0.215	0.166	0.129	0.275	0.287
Orkut	0.354	0.359	0.311	0.338	0.183	0.401	0.304	0.293	0.413	0.409
Wikipedia	0.225	0.229	0.029	0.195	0.208	0.242	0.194	0.240	0.253	0.260
BlogCatalog	0.179	0.161	0.071	0.155	0.126	0.213	0.203	0.198	0.239	0.241
Flickr	0.236	0.224	0.089	0.211	0.204	0.244	0.215	0.202	0.292	0.298

Table 4 Modularity Q of different methods on different datasets
表 4 不同数据集上不同方法的模块度 Q

数据集	方法									
	Deepwalk	node2vec	SPaE	GCN	SEAL	Graphormer	EFR-DGC	SENMF	SAT	MGTrans
Polblogs	0.499	0.499	0.089	0.433	0.218	0.493	0.522	0.463	0.526	0.521
Mich	0.418	0.402	0.062	0.213	0.284	0.131	0.345	0.415	0.391	0.423
dblp	0.317	0.286	0.326	0.349	0.413	0.443	0.397	0.398	0.443	0.439
Orkut	0.402	0.468	0.088	0.460	0.433	0.427	0.400	0.457	0.538	0.554
Wikipedia	0.254	0.394	0.222	0.282	0.424	0.414	0.215	0.399	0.455	0.459
BlogCatalog	0.326	0.401	0.073	0.368	0.418	0.499	0.179	0.414	0.576	0.583
Flickr	0.366	0.417	0.084	0.352	0.329	0.487	0.301	0.406	0.528	0.532

现出了更为优异的性能。从表 2 和表 3 可以发现, 本文 MGTrans 方法在数据集 dblp 上的效果略低于 SEAL、Graphormer。这是因为这个数据集中高阶模体的数量相对较少, MGTrans 方法更大程度上依赖于低阶信息, 而相对稀疏的子图很难捕捉到高阶信息, 致使该方法回退到与 Graphormer 一样的效果。通过社区嵌入的方法 SENMF 在大数据上的表现效果均不如 MGTrans, 这反映了社区嵌入的方法优势并不明显。与其他深度学习相关的基准方法相比, MGTrans 优势显著。另外, 从表 4 所示的模块度 Q 的实验结果也可以发现, 除 Polblogs、dblp 数据集之外, MGTrans 在大多数数据集上的表现都超过了基线方法。总体来说, 本实验可以证明高阶信息的引入以及多种编码操作有利于较好地完成社区检测任务。

4.6 消融实验

为了验证 MGTrans 中提出的不同编码方式对实验结果的影响, 本节设置了不同的消融实验。实验选择在 Wikipedia 数据集上完成。下面将展开每一个消融设置的细节。

4.6.1 组合编码的消融实验

为了验证实验编码组合方式使得社区划分的

结果更加真实, 实验将不同的编码方式组合进行了消融实验。表 5 的实验结果显示, 本文提出的 3 种编码方式组合使用后, 实验结果达到了最优, 任意 2 种编码方式相互组合后的实验结果均会发生小幅下滑, 只使用单一的编码方式取得的结果是最差的, 尤其是只有单一的混合外切边编码所产生的实验结果最差。造成这一现象的原因是混合外切边编码只是边编码方式的一个弥补, 它仅编码了部分不属于任何高阶结构, 且连接 2 个高阶结构的边, 这种边在捕获完高阶信息后相对较少, 尤其在稠密图中更少。相反, 如果图足够稀疏, 则外切边编码却又成了最重要的补充信息。

Table 5 Ablation experiment results with different combinations of three encoding methods

表 5 3 种编码方式不同组合的消融实验结果

MOCE	SPDE	MSPE	NMI	ARI
✓			0.202	0.032
	✓		0.298	0.098
		✓	0.311	0.192
✓	✓		0.351	0.215
✓		✓	0.402	0.239
	✓	✓	0.486	0.280
✓	✓	✓	0.512	0.298

4.6.2 位置编码的消融实验

将现有的主流位置编码方法与 MGTrans 的位置编码方法进行对比,具体方式为使用不同的位置编码方法分别替换 MGTrans 中的位置编码以获取图结构的位置依赖关系,从而进行社区划分实验。实验的比较对象选择为拉普拉斯矩阵编码(Laplacian Position Encoding)^[21]和正余弦相似度位置编码(GTransformer Position Encoding)^[22]。

观察图 4 的上半部分和图 5 的上半部分可以发现,不使用任何位置编码的方法的实验结果最差,通过传统拉普拉斯和 GTransformer 的位置编码弥补了位置信息的缺失的方法比起本文的方法仍有一定的差距,而通过本文 MGTrans 方法中的编码方式所达到的效果是所有方法中最佳的。

4.6.3 内权边编码的消融实验

将其他边的编码方式分别替换 MGTrans 的边编码方式进行实验对比。实验选择文献[23]中将边特征融合到顶点特征,以及文献[24]将顶点特征聚合到边特征的编码方式,分别记作 EtN(Edge to Node)和 EaGN(Edge and GNode)。观察图 4 的下半部分和图 5 的下半部分可以发现,不使用任何位置编码所表现出来的结果是最差的,而通过 MGTrans 方法中的编码方式所达到的效果是所有方法中最佳的。图 4 和图 5 的结果证明了 MGTrans 方法的 2 种编码方式效果最好,验证了利用该编码方式获取网络特征的高效性。

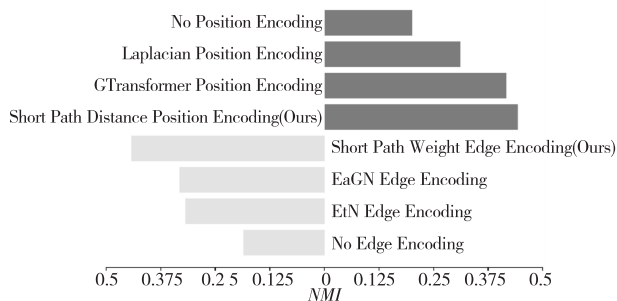


Figure 4 NMI of ablation experiment on Wikipedia dataset

图 4 Wikipedia 数据集上消融实验的 NMI

4.7 实验收敛性分析

为了探究 MGTrans 方法的收敛情况,本节在 7 个数据集上进行了收敛性实验,如图 6 所示。

观察图 6 可以发现,随着迭代次数的增加,所有数据集上的 NMI 均收敛于稳定值。具体来说,当迭代次数到 20 时,大部分数据集上的结果开始收敛,个别数据集结果还在上升。随着迭代次数增加至 40 时,绝大部分数据集上的 NMI 趋于稳定,

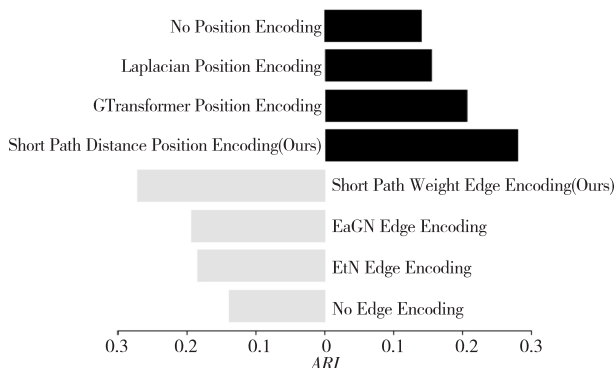


Figure 5 ARI of ablation experiment on Wikipedia dataset

图 5 Wikipedia 数据集上消融实验的 ARI

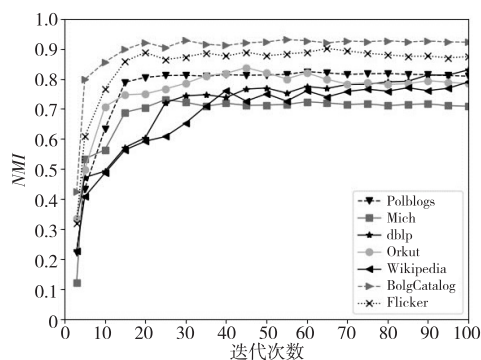


Figure 6 Average convergence curves on different datasets

图 6 在不同数据集上平均收敛曲线

尽管个别数据集的 NMI 还有波动,但是幅度已经很小,随着迭代次数增大,最终都会达到稳定值。因此,本文所提出的 MGTrans 在联合编码和优化器的共同作用下,具有较好的收敛性。

4.8 可视化实验

本节选用 Polblogs 数据集对 MGTrans 方法所检测出的社区进行可视化展示。该数据集是美国政治博客的网络图,其中包含 2 个主要党派,包含 1 490 个顶点和 19 090 条边。图 7a 和图 7b 分别展示了 MGTrans 方法和 Graphormer 方法的可视化效果,其中黑色和灰色标记属于不同社区的顶点,同时,顶点之间的连线表示社区内部以及社区之间的连接情况。可以看出,图 7a 的 MGTrans 方法检测到的社区界限明显,分类效果准确,与数据集标签一致;图 7b 中 Graphormer 的可视化图中存在部分顶点分类错误和社区划分不够清晰的现象,可以认为该方法对社区检测的效果远不如 MGTrans 方法对社区的划分。

5 结束语

本文提出了一种融合模体感知和图 Trans-

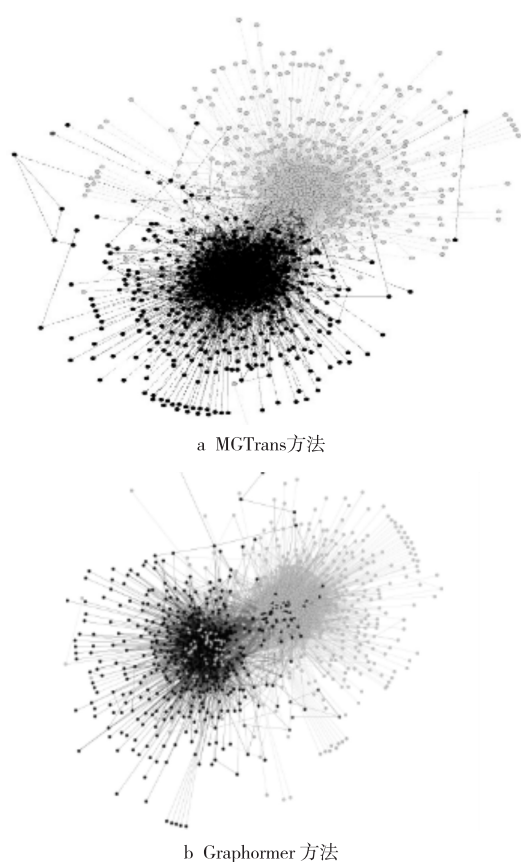


Figure 7 Visualization of community detection on Polblogs dataset

图7 Polblogs数据集上的社区检测可视化

former 编码的社区检测 MGTrans 方法。该方法在不破坏原始网络结构的情况下重构网络,获取高阶结构信息,并从多种角度提取输入网络和重构网络的边信息以及模体特征,通过图 Transformer 获取更加丰富的特征表示,完成了社区检测的任务。与现有的方法相比,本文所提方法不仅解决了高阶碎片化问题,还解决了注意力在网络中不能准确捕获结构特征的弊端,提高了社区检测的准确性。最后,在不同数据集上的实验结果也验证了 MGTrans 在社区检测任务中的有效性。在未来的工作中,将继续探索能否通过构造结构更复杂的模体进一步提升社区检测的质量,并探索在带权图中构建模体的方法以及权值对极大完全子图提取的影响。同时,关注并考虑除网络拓扑结构外,节点本身的属性特征对社区检测质量的影响。

参考文献:

- [1] Wasserman S, Faust K. Social network analysis: Methods and applications [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
- [2] Ito T, Chiba T, Ozawa R, et al. A comprehensive two-

- hybrid analysis to explore the yeast protein interactome[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences USA, 2001, 98(8):4569-4574.
- [3] Luo X, Liu Z, Shang M, et al. Highly-accurate community detection via pointwise mutual information incorporated symmetric non-negative matrix factorization[J]. IEEE Transactions on Network Science and Engineering, 2021, 8(1):463-476.
- [4] Kernighan B W, Lin S. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs[J]. The Bell System Technical Journal, 1970, 49(2):291-307.
- [5] Fortunato S. Community detection in graphs[J]. Physics Reports, 2010, 486(3):75-174.
- [6] Girvan M, Newman M E. Community structure in social and biological networks[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences USA, 2002, 99(12):7821-7826.
- [7] Newman M E. Fast algorithm for detecting community structure in networks[J]. Physical Review E, Covering Statistical, Nonlinear, Biological, and Soft Matter Physics, 2004, 69(6):066133.
- [8] Li X H, Peng Q X, Li R H, et al. Dual graph neural network for overlapping community detection[J]. The Journal of Supercomputing, 2024, 80(2):2196-2222.
- [9] Cai C, Wang Y S. Convergence of invariant graph networks [C]//Proc of the 39th International Conference on Machine Learning, 2022:2457-2484.
- [10] Chen D X, O'Bray L, Borgwardt K M. Structure-aware transformer for graph representation learning[C]//Proc of the 39th International Conference on Machine Learning, 2022:3469-3489.
- [11] Li P Z, Huang L, Wang C D, et al. EdMot: An edge enhancement approach for motif-aware community detection[C]//Proc of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2019:479-487.
- [12] Wu Q T, Zhao W T, Li Z N, et al. NodeFormer: A scalable graph structure learning transformer for node classification [C]//Proc of the 36th International Conference on Neural Information Processing Systems, 2024:27387-27401.
- [13] Ying C X, Cai T L, Luo S J, et al. Do transformers really perform bad for graph representation? [C]//Proc of the 35th International Conference on Neural Information Processing Systems, 2021:28877-28888.
- [14] Bron C, Kerbosch J. Finding all cliques in an undirected graph[J]. Communications of the ACM, 1973, 16(9):575-577.
- [15] Perozzi B, Al-Rfou R, Skiena S. Deepwalk: Online learning of social representations[C]//Proc of the 20th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2014:701-710.
- [16] Grover A, Leskovec J. node2vec: Scalable feature learning for networks[C]//Proc of the 22nd ACM SIGKDD Interna-

tional Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2016:855-864.

- [17] Shi B Y, Zhou C P, Qiu H J, et al. Unifying structural proximity and equivalence for network embedding[J]. IEEE Access, 2019, 7: 106124-106138.
- [18] Zhang Y, Xiong Y, Ye Y, et al. SEAL: Learning heuristics for community detection with generative adversarial networks[C]//Proc of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2020: 1103-1113.
- [19] Hao J, Zhu W. Deep graph clustering with enhanced feature representations for community detection [J]. Applied Intelligence, 2023, 53(2): 1336-1349.
- [20] Zhu J Y, Wang C Y, Gao C, et al. Community detection in graph: An embedding method [J]. IEEE Transactions on Network Science and Engineering, 2022, 9(2): 689-702.
- [21] Dwivedi V P, Bresson X. A generalization of transformer networks to graphs[C]//Proc of AAAI Workshop on Deep Learning on Graphs: Methods and Applications, 2021: 9699-9707.
- [22] Narang S, Chung H W, Tay Y, et al. Do Transformer modifications transfer across implementations and applications? [C]//Proc of the 2021 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, 2021: 5758-5773.
- [23] Hu W H, Fey M, Zitnik M, et al. Open graph benchmark: Datasets for machine learning on graphs[C]//Proc of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems, 2020: 22118-22133.
- [24] Xu K Y L, Hu W H, Leskovec J, et al. How powerful are graph neural networks? [C]//Proc of the 7th International Conference on Learning Representations, 2019: 826-843.

作者简介:



community detection.

郭兴君(1999-),男,甘肃武威人,硕士生,研究方向为社区检测。**E-mail:** 2022222279@nwnu.edu.cn

GUO Xing-jun, born in 1999, MS candidate, his research interest includes community detection.



machine learning, and intelligent perception & computing.

李晓红(1978-),女,甘肃兰州人,硕士,副教授,研究方向为数据挖掘、机器学习和智能感知与计算。**E-mail:** xiaohongli@nwnu.edu.cn

LI Xiao-hong, born in 1978, MS, associate professor, her research interests include data mining, machine learning, and intelligent perception & computing.



community detection.

史婉瑶(2001-),女,安徽阜阳人,硕士生,研究方向为社区检测。**E-mail:** 2023222205@nwnu.edu.cn

SHI Wan-yao, born in 2001, MS candidate, her research interest includes community detection.



plex network.

高文超(2002-),男,河南信阳人,硕士生,研究方向为复杂网络。**E-mail:** gao-wenchao02@163.com

GAO Wen-chao, born in 2002, MS candidate, his research interest includes complex network.