

Part 1. Node Embeddings

1. 思想: 映射到 d 维度后, 相似的图中节点有更相近的编码.

2. How to define 节点间的相似度.

三种方式

- Adjacency-based similarity
- Multi-hop similarity
- Random walk approaches.

Adjacency-based similarity

相似计算函数: Just u 和 v 之间的边.

推理: 节点嵌入之间的点积近似于边.

$$\text{loss} = \sum_{(u,v) \in E} \|z_u^T \cdot z_v - A_{u,v}\|^2$$

↓
所有节点 pair.

↓
嵌入点积

↓
边, 即邻接矩阵的值.

$O(|V|^2)$ 优化 $\rightarrow O(|E|)$ Time
And $O(|V|)$ 参数.

Multi-hop Similarity 多跳相似.

→ $O(|V|^2)$ 、 $O(|V|)$

1-hop: 1跳可达

2-hop: 2跳可达

3-hop: 3跳可达.

区别于对 A_{uv} 的计算.

$$\text{loss} = \sum_{u,v} \|Z_u Z_v^T - A_{uv}^k\|^2 \rightarrow$$

有几种做法

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{ij}^k &= \max(\log\left(\frac{(A_{ij}/d_i)^k}{\sum_{l \in V} (A_{il}/d_l)^k}\right) - \lambda, 0) \\ \tilde{A}_{ij} &= \max(\log\left(\frac{A_{ij}}{\sum_{l \in V} A_{il}}\right) - \lambda, 0) \end{aligned}$$

也有计算重叠度

Why Random:

① 灵活的节点相似性随机定义, 包含本地和高阶邻域信息

② 训练时不需考虑所有点对, 只考虑随机行走中共同出现的节点

Random Walk Approaches

节点相似度

$Z_u Z_v^T \approx$ 在网络上随机行走时 u 和 v 共同出现的概率.

① 使用某种随机行走策略估算从节点 u 开始的随机行走中访问节点 v 的概率

② 优化嵌入, 以编码这些随机行走统计数据.

$$\text{loss} = \sum_{u \in V} \sum_{v \in N_{RCU}(u)} -\log(P(v|Z_u)) \rightarrow \text{softmax} = \frac{\exp(Z_u Z_v^T)}{\sum_{n \in V} \exp(Z_u Z_n^T)}$$

→ BFS 和 DFS

从 u 开始走的节点的集合. → 可以有重复.

总结: 所有节点轮番做出发点

对它随机 walk 到 V 路上所有节点

做 softmax 求和.

3. Graph Neural Networks.

→ 神经网络共享参数

Neighborhood Aggregation: 节点从邻居节点获取信息

每个节点都会对应一个自己的运算图.

每一层都要做嵌入, 第0层对输入的输入特征做嵌入.

可以用卷积来表示收集邻里信息.

关键是如何将每层的内容合并一起。

平均等

$$\begin{cases} h_v^k = \sigma \left(W_k \sum_{u \in N(v)} \frac{h_u^{k-1}}{|N(v)|} + \beta_k h_v^{k-1} \right) \\ h_v^k = \sigma \left(W_k \sum_{u \in N(v) \cup v} \frac{h_u^{k-1}}{\sqrt{|N(u)| |N(v)|}} \right) \end{cases}$$

→ Graph Convolutional Networks
图卷积网络。

不同邻居的归一化函数不同。

4. GraphSAGE

5. Gated Graph Neural Networks 门控

6. subgraph Embedding.

补充：极大似然估计 (MLE)：模型的参数确定任一具体实例的生成概率，这个概率称为这些参数值的似然。假设最大似然的参数值对应观察对象的正确模型

假定 P_c 为社区 C 中两个点因为都在 C 中存在边的概率。

① 一般地，如果 u 和 v 是社区非空集合 M 中每个社区成员且不再是别的社区成员，则 u, v 有边为：
$$p_{uv} = 1 - \prod_{c \in M} (1 - P_c)$$
 无边： $1 - p_{uv}$

② 节点对在同一社区 C ，那自然 $P = P_c$ ，但不在其他社区。

③ 节点对 u, v 不同时属于任何社区，设 p_{uv} 为一个很小值 ϵ 。