



GraphSAGE网络

作者: Calvin

QQ: 179209347

Mail: 179209347@qq.com

介绍

笔记简介:

- 面向对象: 深度学习初学者
- 依赖课程: **线性代数**, **统计概率**, 优化理论, 图论, 离散数学, 微积分, 信息论

知乎专栏:

<https://zhuanlan.zhihu.com/p/693738275>

Github & Gitee 地址:

https://github.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning

https://gitee.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning

* 版权声明:

- 仅限用于个人学习
- 禁止用于任何商业用途

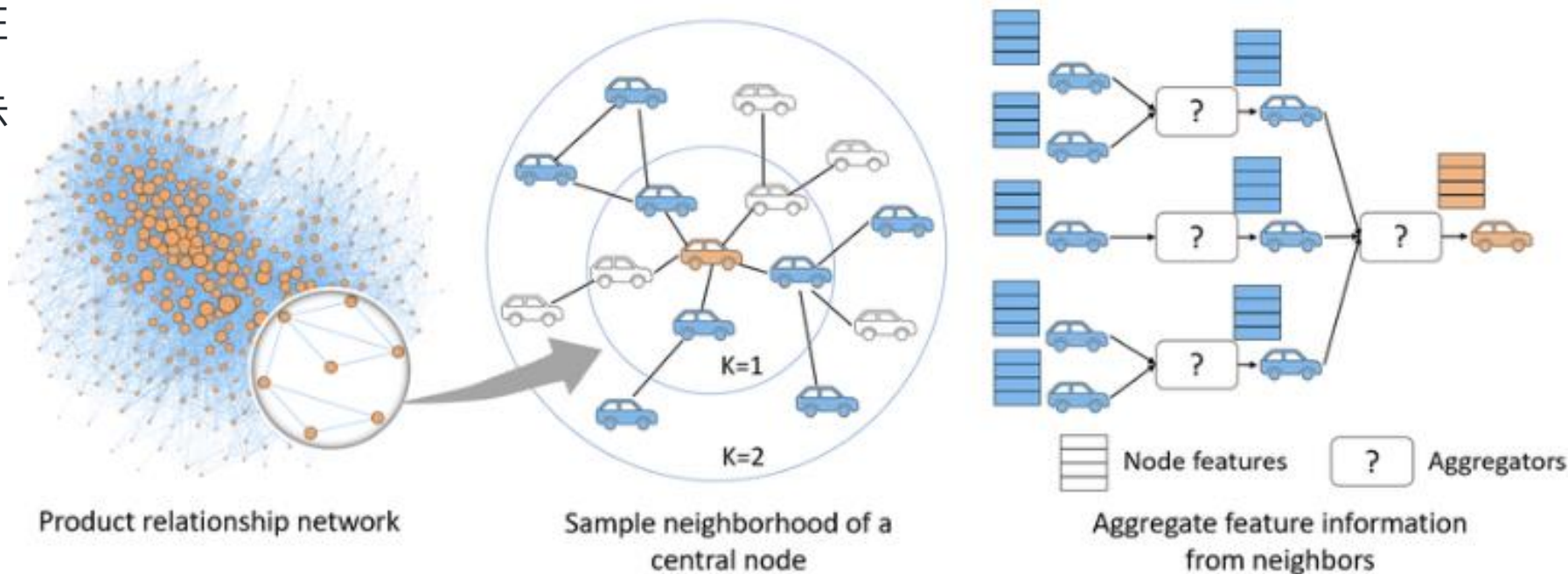
GraphSAGE (Graph Sample and Aggregation)

GraphSAGE (Graph Sample and Aggregation) 模型架构旨在学习节点的低维表示。

GraphSAGE的核心思想：通过采样邻居节点并聚合它们的特征来学习节点表示。这种方法使得GraphSAGE能够扩展到大规模图，并且能够在节点分类、链接预测和图分类等任务上取得良好的性能。

GraphSAGE的工作流程通常包括以下几个步骤：

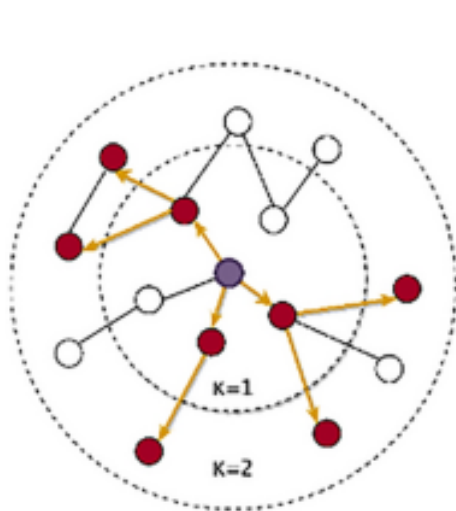
- 采样邻居节点
- 聚合邻居特征
- 更新节点表示



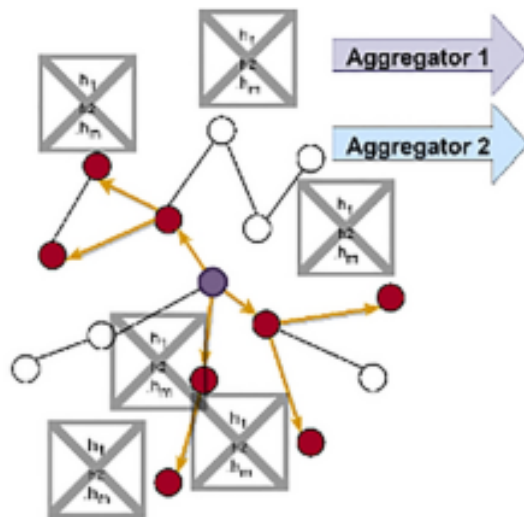
GraphSAGE - 工作原理

graphSAGE模型的工作原理:

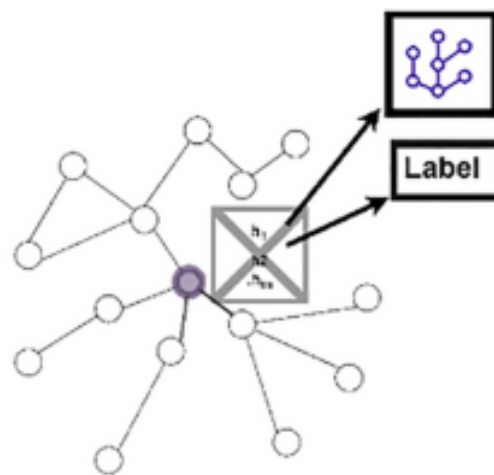
1. 首先，初始化输入图中所有节点的特征向量
2. 对于每个节点，获取其采样的邻居节点
3. 聚合函数用于聚合邻居节点的信息
4. 并结合embedding，通过非线性变换embedding同样更新Express。



1. Sample neighborhood



2. Aggregate feature information from neighborhood

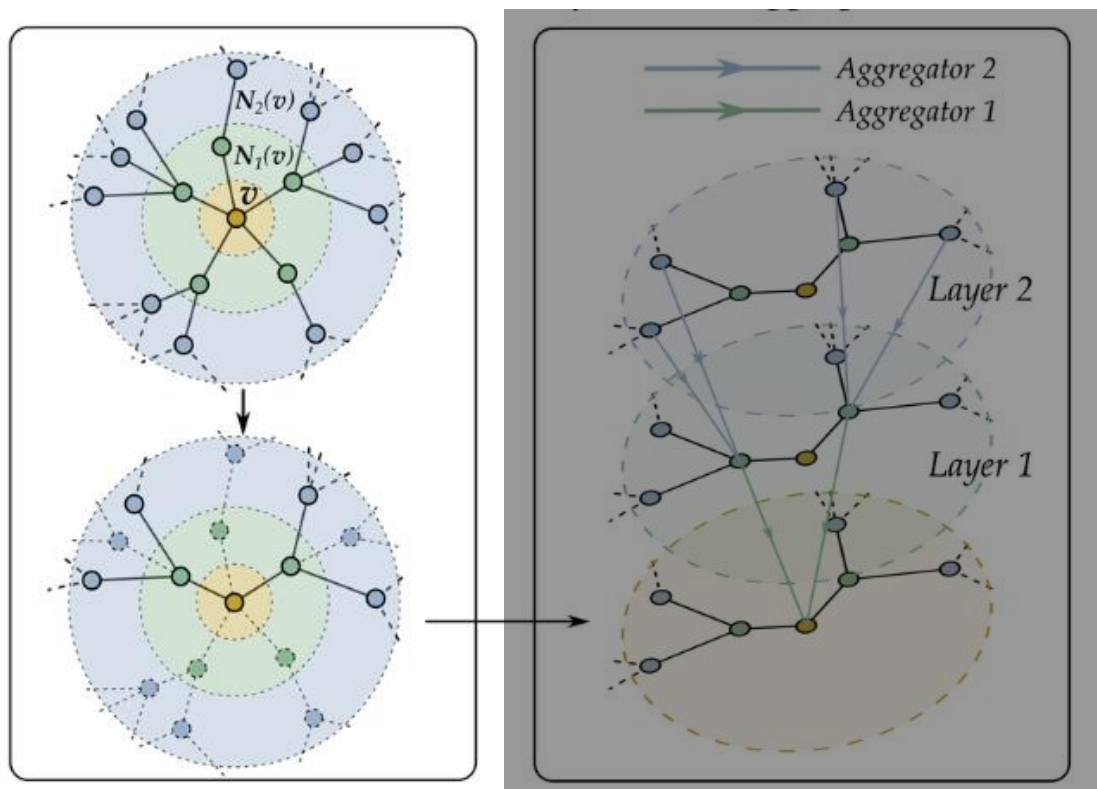


3. Predict graph context and label using aggregated information.

GraphSAGE - 邻居节点采样

在GraphSAGE中，邻居节点采样的过程通常包括以下几个步骤：

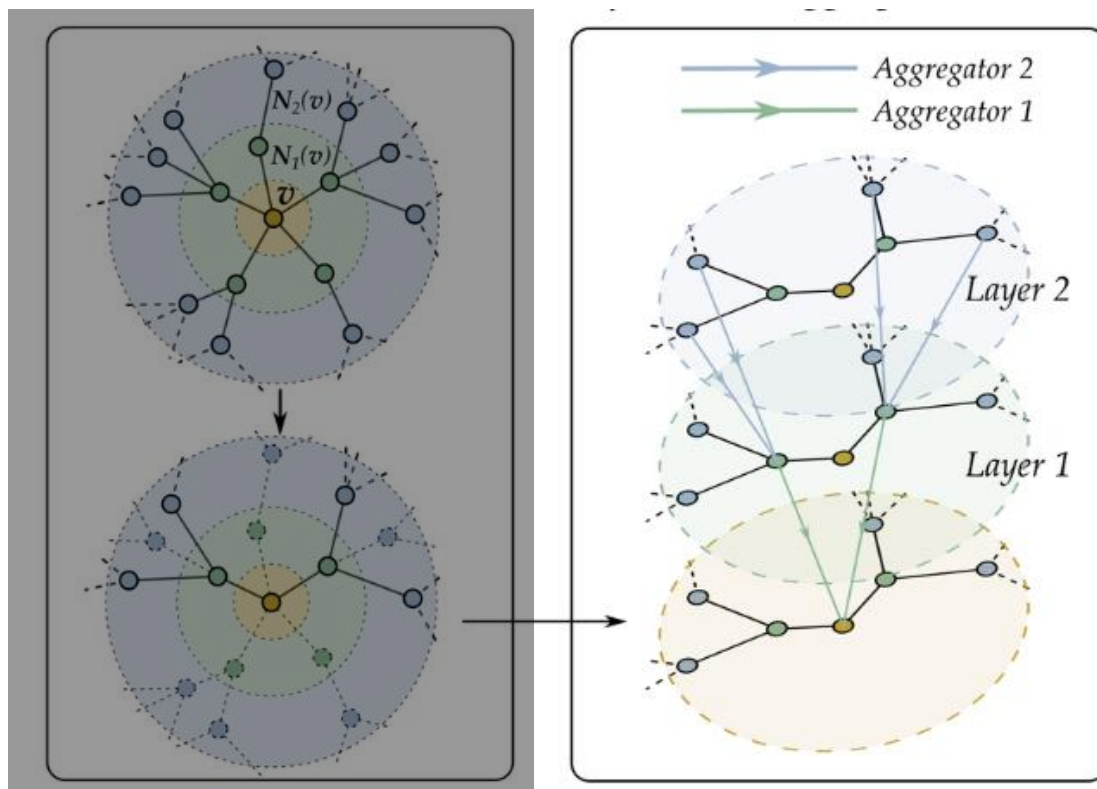
- 1.确定采样邻居节点的数量：** 首先需要确定每个节点在聚合邻居信息时要考虑的邻居节点数量。这个数量可以是固定的，也可以是根据节点的度动态调整的。
- 2.随机采样邻居节点：** 对于每个节点，从其邻居节点中随机采样一定数量的节点。这样做的目的是为了在聚合邻居信息时避免考虑所有邻居节点，从而提高计算效率。



GraphSAGE - 聚合邻居节点的信息

GraphSAGE通过以下步骤聚合邻居节点的信息：

- 1.聚合邻居信息：**一旦采样到邻居节点，GraphSAGE使用不同的聚合函数（如平均池化、最大池化等）来聚合邻居节点的特征信息。这些聚合函数可以将邻居节点的特征信息合并为一个固定长度的向量。
- 2.更新节点表示：**聚合邻居节点的信息后，将这些信息与目标节点自身的特征信息结合起来，以更新目标节点的表示。这个更新的表示将包含了目标节点及其邻居节点的信息，有助于更好地学习节点的特征表示。



GraphSAGE - 聚合器的类型

1. 简单的邻域聚合器:

$$h_v^k = \sigma \left(W_k \sum_{u \in N(v)} \frac{h_u^{k-1}}{N(v)} + B_k h_v^{k-1} \right)$$

2. 平均聚合器:

$$h_v^k \leftarrow \sigma(W \cdot \text{MEAN}(\{h_i^{K-1}\} \cup \{h_u^{K-1}, \forall u \in N(v)\}))$$

3. LSTM 聚合器: 将 LSTM 应用于邻居的随机排列。

4. 池聚合器: 它应用对称向量函数并转换相邻向量。

$$\text{AGGREGATE}_k^{\text{pool}} = \max(\{\sigma(W_{\text{pool}} h_{ui}^k + b), \forall ui \in N(v)\})$$

graphSAGE公式:

$$h_v^k = \sigma([W_k \cdot \text{AGG}(\{h_u^{k-1}, \forall u \in N(v)\}), B_k h_v^{k-1}])$$

W_k, B_k : 是可学习的权重矩阵
 $h_v^0 = Xv$: initial 0-层嵌入等于节点特征
 h_v^{k-1} = 广义聚合
 $z_v = h_v^k n$: k层邻域聚合后的嵌入
 σ - 非线性 (ReLU)



Thank

You