MTensor-GCN

框架的改进目标：

1. 支持无限扩展。
2. 参数回归到 NxC，不要使用 concatenate 的形式。
3. 不能太复杂，最好能做大样本。

经典 Tensor-GCN 总结

single column spectral graph conv: (三阶展开)

$$g * x = U(g_\theta U^T x) = \sum_{k=0}^{2} \beta_k T_k(\hat{L})x$$

$$= \beta_0 T_0(\hat{L})x + \beta_1 T_1(\hat{L})x + \beta_2 T_2(\hat{L})x$$

$$= [x, \tilde{L}x, 2\tilde{L}^2 x - x]\theta$$

改进方法：

- 替换: $2\tilde{L}^2 \rightarrow \tilde{\mathcal{L}_3}$
- 单列图卷积改为：
  - $g_\theta * x = \begin{bmatrix} x & \tilde{L} \times_2 x & \tilde{\mathcal{L}_3} \times_3 x \times_2 x - x \end{bmatrix}\theta,$
- 扩列之后的嵌入：$Z = \begin{bmatrix} X & \hat{L}X & M - X \end{bmatrix}\Theta,$
  - 其中：$M = \begin{bmatrix} \mathcal{L}_3 \times_2 x_1^T \times_3 x_1^T & \cdots & \mathcal{L}_3 \times_2 x_C^T \times_3 x_C^T \end{bmatrix}$
- 利用数学性质：$\mathcal{L} \times_3 x \times_2 x = L(x \otimes x)^T$，改进 M
  - $$M = \begin{bmatrix} \mathcal{L}_3 \times_2 x_1^T \times_3 x_1^T & \cdots & \mathcal{L}_3 \times_2 x_C^T \times_3 x_C^T \end{bmatrix}$$ $$= \begin{bmatrix} \hat{L}_3^T(x_1 \otimes x_1) & \cdots & \hat{L}_3^T(x_C \otimes x_C) \end{bmatrix}$$ $$= \begin{bmatrix} \hat{L}_3^T(X * X) \end{bmatrix}.$$
- 最终化简后的嵌入：$Z = \begin{bmatrix} X & \hat{L}X & (\hat{L}_3^T X * X - X) \end{bmatrix}\Theta.$

Multi-Tensor-GCN

- 回顾 m 阶单列谱图卷积（基于谱域下 chebshev polynomial 定义）：
  - $g_\theta * x = \sum_{k=0}^{m-1} \beta_k T_k(\hat{L})x$
- 将其展开到4阶(m = 3)：
  - $$\begin{aligned} g_\theta * x &= \sum_{k=0}^{3} \beta_k T_k(\hat{L}) \\ &= \beta_0 x + \beta_1 \tilde{L}x + \beta_2(2\tilde{L}^2 x - x) + \beta_3(4\tilde{L}^3 - 3\tilde{L}x) \\ &= (\beta_0 - \beta_2)x + (\beta_1 - 3\beta_3)\tilde{L}x + 2\beta_2\tilde{L}x + 4\beta_3\tilde{L}^3 x \end{aligned}$$
- 尝试找出一组 β, θ，把所有的 β 统一为一个参数。解下面的线性方程组：
  - $\begin{cases} \beta_0 - \beta_2 = \theta \\ \beta_1 - 3\beta_3 = \theta \\ 2\beta_2 = \theta \\ 4\beta_3 = \theta \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \beta_0 = \frac{3}{2}\theta \\ \beta_1 = \frac{7}{4}\theta \\ \beta_2 = \frac{1}{2}\theta \\ \beta_3 = \frac{1}{4}\theta \end{cases}$

> 为什么可以统一β：由于β_i之间是线性关系，图卷积本身也是线性操作，参数比例可通过 training 自动调整。

- 得到化简参数版本的，四阶单列图卷积：
  - $g_\theta * x = (x + \tilde{L}x + \tilde{L}^2 x + \tilde{L}^3 x)\theta$
- 不做替换，直接扩列：
  - $g_\theta * X = (X + \tilde{L}X + \tilde{L}^2 X + \tilde{L}^3 X)\Theta$
- 用张量图卷积替换普通图卷积: $\tilde{L}^2 \to \tilde{\mathcal{L}}_3, \tilde{L}^3 \to \tilde{\mathcal{L}}_4$
- 对于三阶，此时张量图卷积表示为：
- - $\mathcal{M}_3 = \tilde{\mathcal{L}}_3 \times_3 X^T \times_2 X^T$, $\mathcal{M}_3 \in \mathbb{R}^{N\times D\times D}$
  - 在第三模式上收缩。得到三阶嵌入 $Y_3 \in \mathbb{R}^{N\times D}$
  - 其中 ${Y^{(3)}}_{i,d} = \sum_{k=1}^{D} \mathcal{M}_{3i,d,k}$
- 对于四阶，此时张量图卷积表示为：
  - $\mathcal{M}_4 = \tilde{\mathcal{L}}_4 \times_4 X^T \times_3 X^T \times_2 X^T$, $\mathcal{M}_4 \in \mathbb{R}^{N\times D\times D\times D}$
  - 在第三、第四模式上收缩。得到四阶嵌入 $Y^{(4)} \in \mathbb{R}^{N\times D}$
  - 其中 $Y^{(4)}_{i,d} = \sum_{j=1}^{D}\sum_{k=1}^{D} \mathcal{M}_{4i,d,j,k}$
- （额外）可以考虑加入注意力机制：
  - 做一个简单前馈NN，$A_{i,d} = softmax(W_a \cdot flatten(m))$
    - 这里 m 是把 $\mathcal{M}$ 按某一维展成向量，W_a 可学习
  - $\hat{Y}^{(4)}_{i,d} = A_{i,d} \odot \sum_{j=1}^{D}\sum_{k=1}^{D} \mathcal{M}_{4i,d,j,k}$ （Hadamard product）

- 单层图卷积的 embedding 表示为：$Z = \sum_{k=0}^{N} Y_k(X)\Theta$

- 其中：$Y_k(X)=\begin{cases} X & ,\text{k=0} \\ \tilde{L}X & ,\text{k=1} \\ Contract(\tilde{\mathcal{L}}_3 \times_3 X^T \times_2 X^T) & ,\text{k=2} \\ Contract(\tilde{\mathcal{L}}_4 \times_4 X^T \times_3 X^T \times_2 X^T) & ,\text{k=3} \\ \cdots & \\ Contract(\tilde{\mathcal{L}}_N \times_N X^T \times_{N-1} X^T \cdots \times_2 X^T) & ,\text{k=N+1} \end{cases}$

总结

embedding:

- **previous**：$Z=\begin{bmatrix} X & \hat{L}X & (\hat{L}_3^T X * X - X) \end{bmatrix}\Theta.$
- **latest**：$Z=\sum_{k=0}^{N} Y_k(X)\Theta$

改进：

- 不再使用 concatenate，让 embedding 的 shape 回归 NxC，减少两倍的参数
- 用 GCN/HGNN 类似的方法，通过线性方程统一了参数(延迟替换的时间)。
- 理论上支持无限扩展

继续扩展：

- 与超图的关系: 概念上属于 k-uniform hypergraph，但是不走传统 hyper conv
- 和二部图 + 锚点度量结合，可做大样本。

补充

把切比雪夫展开扩展到 N 阶：$g_\theta * x=\sum_{k=0}^{N-1}\beta_k T_k(\hat{L})$，发现存在 β_k 的部分通解(β_0、β_{N-1}和β_{N-2}可解)：

$$\beta_k = \begin{cases} \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{k-1} \beta_i \text{ , } k = 0 \\ 2^{1-k} \theta \text{ , } k = N-1 \text{或} N-2 \end{cases}$$