日期: /

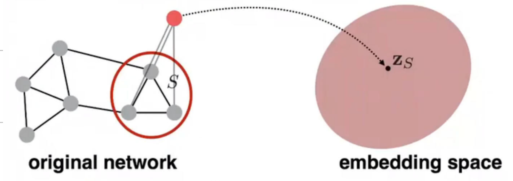
Embedding Entire Graphs

对于一个图 G(V,E)，图嵌入的目的是取得 Z_G

— 一种简单的想法是先进行节点嵌入，再对所有节点的嵌入求和或均值:

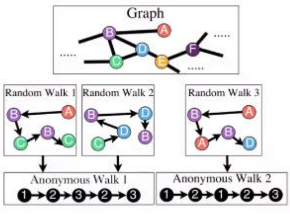
$$Z_G = \sum_{v \in G} Z_v$$

— 一个改进的想法是引入一个虚拟节点代表图或子图，再进行标准的图嵌入



[匿名随机行走]

在匿名随机行走中，状态对应于首次访问某个节点时的索引。而与访问节点的身份无关。



- 基于匿名随机行走的图嵌入将图表示为定长随机行走中不同状况出现的可能性

那么对图的表征涉及随机行走采样，需要多少次采样才能满足需求？

$$\underbrace{m}_{\text{采样次数}} = \left[\frac{2}{\underbrace{\varepsilon^2}_{\text{误差下限}}}\left(\log(2^{\underbrace{\eta}_{\text{长为L的随机行走总状况数}}}-2)-\log(\underbrace{\delta}_{\text{误差上限}})\right)\right]$$

- 那么与其简单地记录每一种状况出现的次数，我们可以为每一种行走 w_i 学习一个嵌入 z_i，再由所有 z_i 学习一个图嵌入 z_G

$$Z = \{z_i : i=1,2,\cdots,\eta\}$$

- 因此，想法是学习预测在某个 Delta 窗口 Δ 内共同出现的行走 (e.g. 当 $\Delta=1$ 时，给定 w_1, w_3，预测 w_2)

$$\text{Objective}: \max \sum_{\Delta}^{T-\Delta} \log P(w_t \mid w_{t-\Delta}, \cdots, w_{t+\Delta}, z_G)$$

Sum the objective over all nodes in the graph.

- 这种情况下随机行走采集了一组行走方式而非途经节点：$N_R(u) = \{w_1^u, w_2^u \cdots w_T^u\}$
- 评估各行走 w_i 的嵌入 z_i

日期:　　　/

Objective: $\max\limits_{Z,d} \frac{1}{T}\sum_{t=\Delta}^{T-\Delta} \log(w_t \mid \{w_{t-\Delta},\cdots,w_{t+\Delta}, Z_G\})$

$$P(w_t \mid \{w_{t-\Delta},\cdots,w_{t+\Delta}, Z_G\}) = \frac{\exp(y(w_t))}{\sum_{i=1}^{n}\exp(y(w_i))}$$

$$y(w_t) = \underbrace{b + U}_{\text{线性层}} \cdot \Big(cat\big(\tfrac{1}{2\Delta}\sum_{i=-\Delta}^{\Delta} \underbrace{Z_i}_{\text{游走嵌入}}, \underbrace{Z_G}_{\text{图嵌入}}\big)\Big)$$

Z_G 可用于下游任务，例如图分类等