日期: /

Hyperbolic Graph Embeddings

- 以往的图表示学习均局限于欧氏嵌入空间 R^n
- 但这对于一些复杂图结构的捕获而言并非总是有效，例如树状结构的图。

网格状图 → 欧氏空间嵌入

环状图 → 球面空间嵌入

树状图 → 双曲空间嵌入 现有的深度学习工具只适用于欧氏空间

[Hyperbolic Space Model]

- 双曲空间有违欧氏空间的第五公理(平行公理)
- 可以通过2种手段表示/可视化双曲空间

1) 庞加莱模型(Poincaré Model)

- 将双曲空间表示为开放球体
- 半径与κ成正比 曲率的倒数
- 每个三角形面积相同

2) 洛伦兹模型(Lorentz Model)

- 以双曲面表示双曲空间
- 数学上更稳定

[Hyperbolic Geometry]

- 流形(Manifold):高维表面
- 黎曼流形(Riemannian Manifold):
  - 定义 内积($\langle\cdot,\cdot\rangle$):测度空间
    切空间(T_x):一个$\mathbb{R}^n$欧几里得空间,是对流形表面某一点的近似
  - 内积和切空间必须在流形表面平滑变化
- 测地线(Geodesic):流形中的最短路径
- 双曲空间(Hyperbolic space):一个具有恒定负曲率$-\frac{1}{k}$的黎曼流形,当k极大时接近平坦空间
  - 双曲空间中定义内积为Minkowski inner product:

$$\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{L}}:\mathbb{R}^{d+1}\times\mathbb{R}^{d+1}\rightarrow\mathbb{R}$$

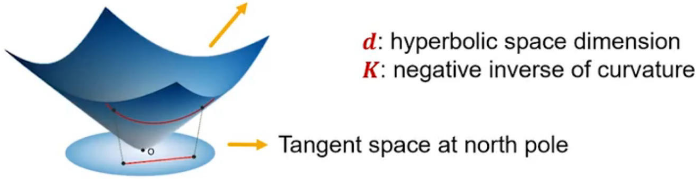
$$\langle x,y\rangle_{\mathcal{L}}=-\overbrace{x_0y_0}^{\text{Time like}}+\overbrace{x_1y_1+x_2y_2+\cdots+x_dy_d}^{\text{Space-like}}=-\frac{1}{k}\ (k>0)$$

日期: /

- 定义空间中两点x,y的距离为:

$$d_{\mathcal{L}}^{K}(x,y)=\sqrt{K}\,\operatorname{arcosh}(-\langle x,y\rangle_{\mathcal{L}}/K)$$

- 定义切空间为: $\mathcal{T}_x\mathbb{H}^{d,K}=\{v\in\mathbb{R}^{d+1}:\langle v,x\rangle_{\mathcal{L}}=0\}$



- x,y 两点的测地距离随曲率增大而增大
- 指数映射(Exponential map): 将切空间中的任意点映射回双曲空间

$$\exp_x^K(v)=\cosh\left(\frac{\|v\|_{\mathcal{L}}}{\sqrt{K}}\right)x+\sqrt{K}\sinh\left(\frac{\|v\|_{\mathcal{L}}}{\sqrt{K}}\right)\frac{v}{\|v\|_{\mathcal{L}}}$$

- 对数映射(Logarithmic map): 指数映射的逆操作

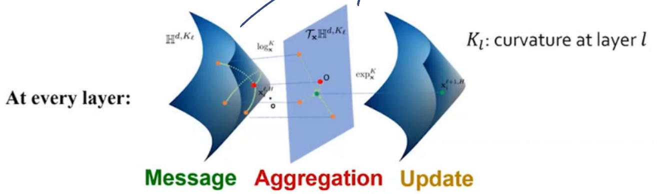
$$\log_x^K(y)=d_{\mathcal{L}}^{K}(x,y)\frac{y+\frac{1}{K}\langle x,y\rangle_{\mathcal{L}}x}{\|y+\frac{1}{K}\langle x,y\rangle_{\mathcal{L}}x\|_{\mathcal{L}}}$$

Challenge: ① 节点特征常处于欧氏空间,需将其映射至双曲空间

② 需在双曲空间进行特征聚合

③ 需确定合适的曲率

具有不同曲率的双曲空间



Message : $h_i^{l,H} = \mathrm{Msg}(x_i^{l-1,H})$

Aggregation : $y_i^{l,H} = \mathrm{AGG}^{K_{l-1}}(h^{l,H})_i$

Update : $x_i^{l,H} = \mathrm{Update}^{K_{l-1},K_l}(y_i^{l,H})$