大连理工大学
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

The Alpha Lab
大连理工大学阿尔法实验室

随机游走的一些应用与扩展

侯杰

The Alpha Lab

http://thealphalab.org

The Alpha Lab
大连理工大学阿尔法实验室

目录

CONTNETS

01

THE PART

随机游走和PageRank

随机游走

The Alpha Lab
大连理工大学阿尔法实验室

定义

随机游走（Random Walk）又称随机游动或随机漫步。气体分子的运动，滴入水中的墨水，气味的扩散等均可看作随机游走。

图上的随机游走

给定一个图和一个出发点，随机地选择一个邻居结点，移动到邻居结点上，然后把当前结点作为出发点，重复以上过程。那些被随机选出的结点序列就构成了一个在图上的随机游走过程。

相关理论

马尔科夫链：t+1时刻的状态只与t时刻有关，也就是只与上一步状态有关，如果从i到j的转移概率与时间无关称为齐时马尔科夫链，否则称为非齐时马尔科夫链。

PageRank

Larry Page 和 Sergey Brin在20世纪90年代后期发明

有向图上的随机游走

用于网络中网站的排名，网站的评分是随机游走到达该节点的概率。

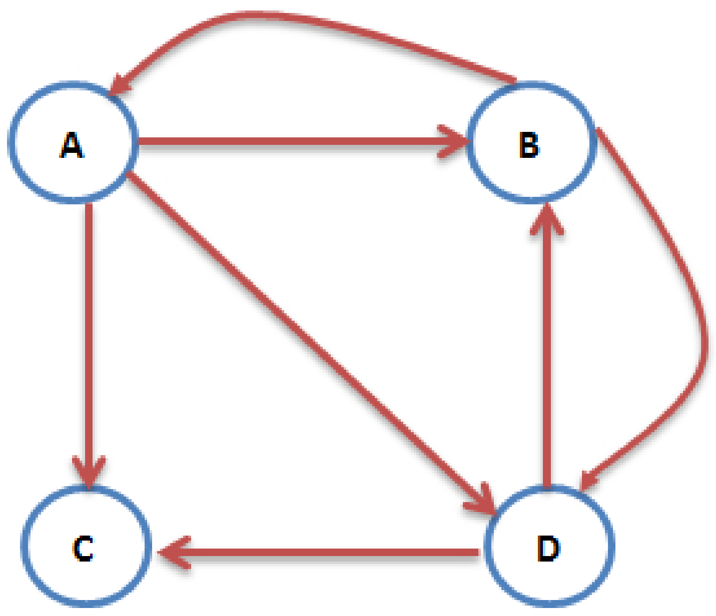
PageRank

算法过程

设矩阵$H = \begin{bmatrix} 0 & {}^1/_2 & 0 & 0 \\ {}^1/_3 & 0 & 0 & {}^1/_2 \\ {}^1/_3 & 0 & 0 & {}^1/_2 \\ {}^1/_3 & {}^1/_2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$表示右图中节点间的转移概率矩阵。向量$p_0 = [{}^1/_4, {}^1/_4, {}^1/_4, {}^1/_4]^T$表示各节点初始值。

N次随机游走后，向量$p_N = H^N p_0$表示最终各个节点的评分。
存在问题$\lim_{N\to\infty} p_N = 0.$

修正：
$S = H + ea^T/N, e = [1,1,\cdots,1]^T, a = [0,0,\cdots,a_i,\cdots,0]^T,$
其中若节点i的出度为0则$a_i = 1$。N为节点个数。
$G = \alpha S + (1-\alpha)ee^T/N$
$p_N = G^N p_0$



PageRank

迭代矩阵G的一些性质

矩阵元素表示某一节点转移到其他节点的概率

列和为1

最大特征值为1
谱半径为1

$$G = P\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix}P^{-1}$$

$$G^N = P\Lambda^N P^{-1}$$

矩阵G的最大特征值1与第二大特征值的比值决定收敛速度。

02

THE PART

量子化的PageRank

The Alpha Lab

大连理工大学阿尔法实验室

一维离散量子随机游走

离散量子随机行走过程对应的Hilbert空间表示为：$H = H_P \otimes H_C$,H_P为n维位置空间，由表示粒子位置的基态$|n\rangle, n \in Z$构成，其中$|n\rangle$表示粒子当前处于位置n处；H_C为硬币空间，由基态$|0\rangle$与$|1\rangle$构成，其中$|0\rangle$表示行走方向为向左，$|1\rangle$表示行走方向为向右。一个粒子的初始状态$|\varphi_0\rangle = |n\rangle|c\rangle, c = 0,1$。

每一步硬币量子行走都执行以下两个操作：

(1)抛掷硬币，将方向变为不同方向的叠加态，即执行硬币翻转操作C：

$$C|n,0\rangle = a|n,0\rangle + b|n,1\rangle$$

$$C|n,1\rangle = c|n,0\rangle + d|n,1\rangle$$

(2)根据硬币空间的值向不同方向行走，即执行偏移操作S:

$$S|n,0\rangle = S|n-1,0\rangle$$

$$S|n,1\rangle = S|n+1,0\rangle$$

一维离散量子随机游走

选硬币算子$C=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}$，偏移算子

$$S=\sum_n |n-1,0\rangle\langle n,0|+|n+1,1\rangle\langle n,1| \ ,$$

取$H_P=I, H_C=C$，则随机游走的一步行走的算子U可表示为：

$$U=S(I\otimes C)$$

对于初始状态$|\varphi_0\rangle$,t步行走后的状态表示为：

$$|\varphi_t\rangle=U^t|\varphi_0\rangle$$

取$|\varphi_0\rangle=|0\rangle|0\rangle$，有：

0.14

T \ i	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0						1					
1					$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$				
2				$\frac{1}{4}$		$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{4}$			
3			$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		
4		$\frac{1}{16}$		$\frac{5}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{16}$	
5	$\frac{1}{32}$		$\frac{17}{32}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{32}$

Particle position

量子PageRank

选取随机游走的Hilbert空间

$$H = span\{|i\rangle|j\rangle, i, j \in N \times N\} = C^N \otimes C^N$$

节点在Hilbert空间中的初态表示为

$$|\psi_j\rangle = \sum_{k=1}^{N} \sqrt{G_{kj}}|j\rangle|k\rangle, \forall j$$

量子PageRank中表示所有节点初态的初始向量

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}|\psi_j\rangle$$

迭代矩阵定义为

$$U = S(2\Pi - I)$$

量子PageRank

转移矩阵S定义为

$$S = \sum_{j,k=1}^{N} |j\rangle|k\rangle\langle k|\langle j|$$

变换矩阵Π定义为

$$\Pi = \sum_{j=1}^{N} |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

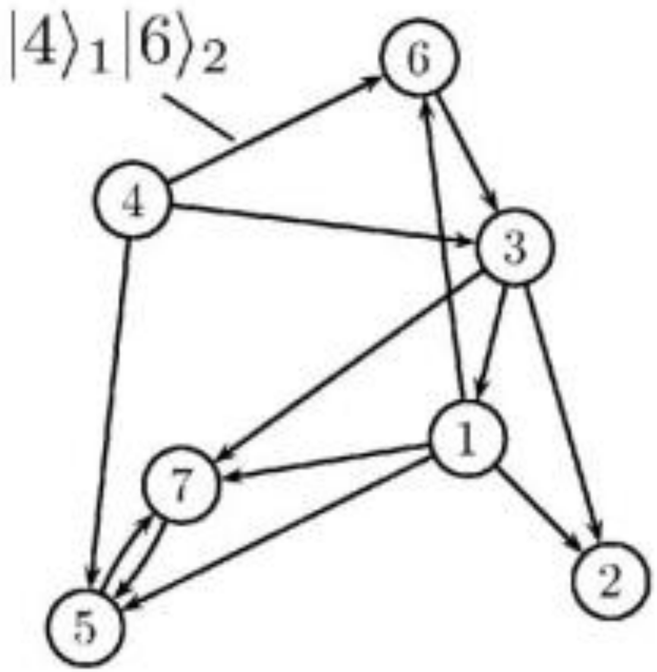
迭代过程

$$P_i(t) = \langle\psi_0|U^{T2t}|i\rangle\langle i|U^{2t}|\psi_0\rangle$$

最终节点的量子化PageRank评分

$$\langle P_i\rangle = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} P_i(t)$$

量子PageRank



QPageRank

7	0.3699
5	0.3624
3	0.0779
2	0.0619
1	0.0510
6	0.0480
4	0.0289

PageRank

7	0.2282
5	0.2177
6	0.1313
3	0.1306
2	0.1265
1	0.0891
4	0.0766

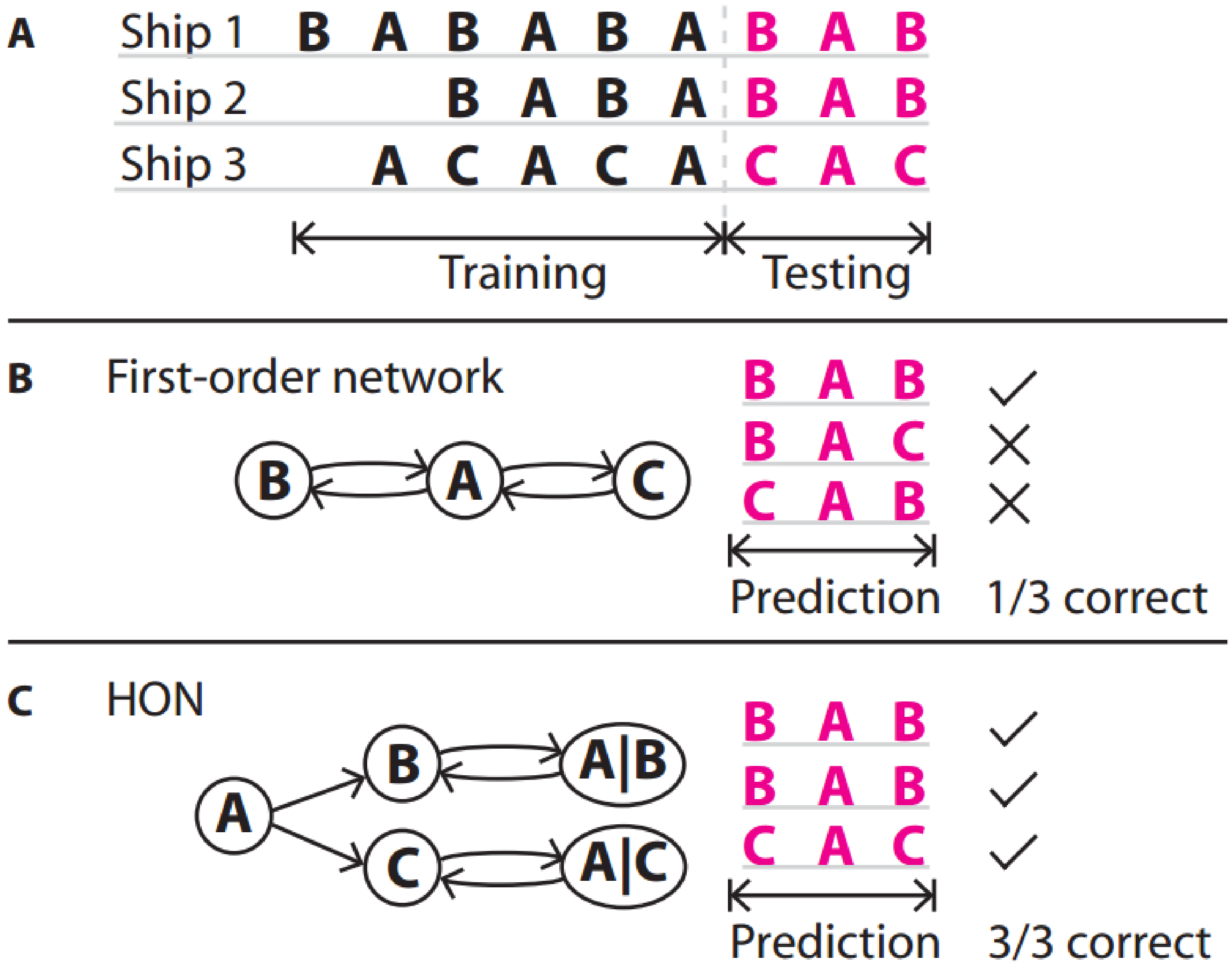
03

THE PART

高阶随机游走

The Alpha Lab
大连理工大学阿尔法实验室

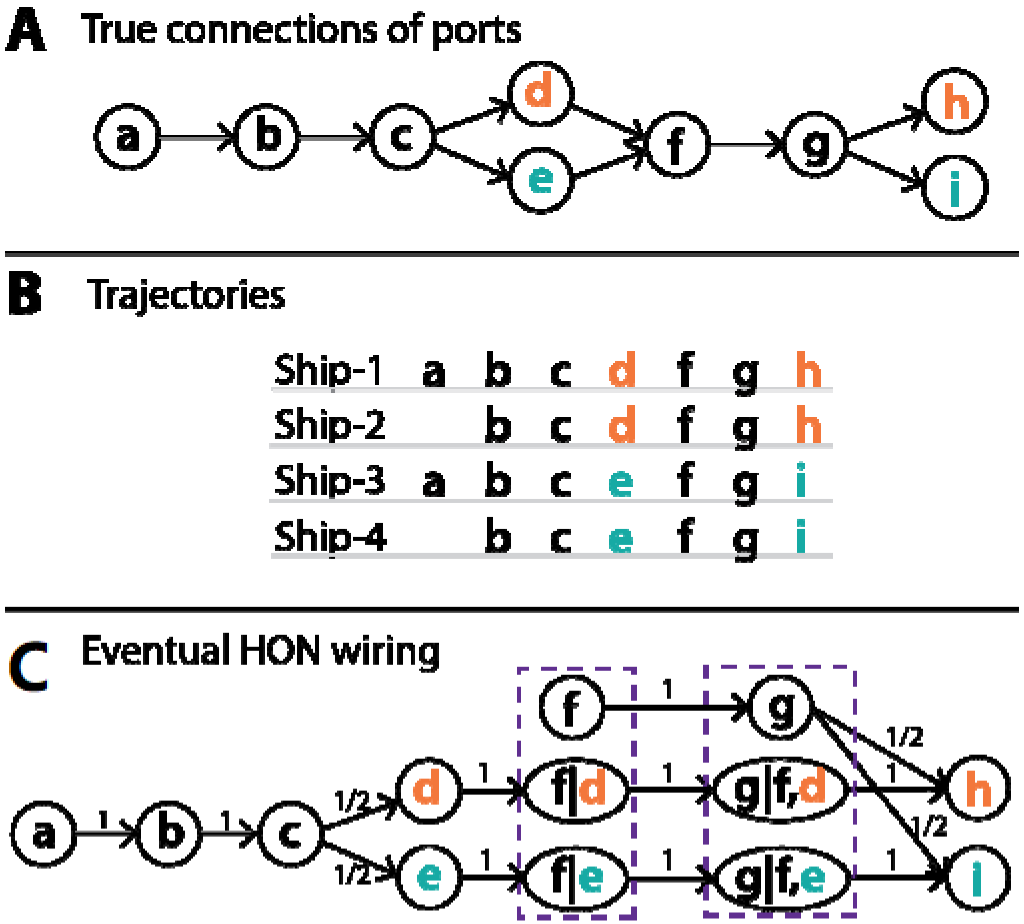
高阶网络下的随机游走



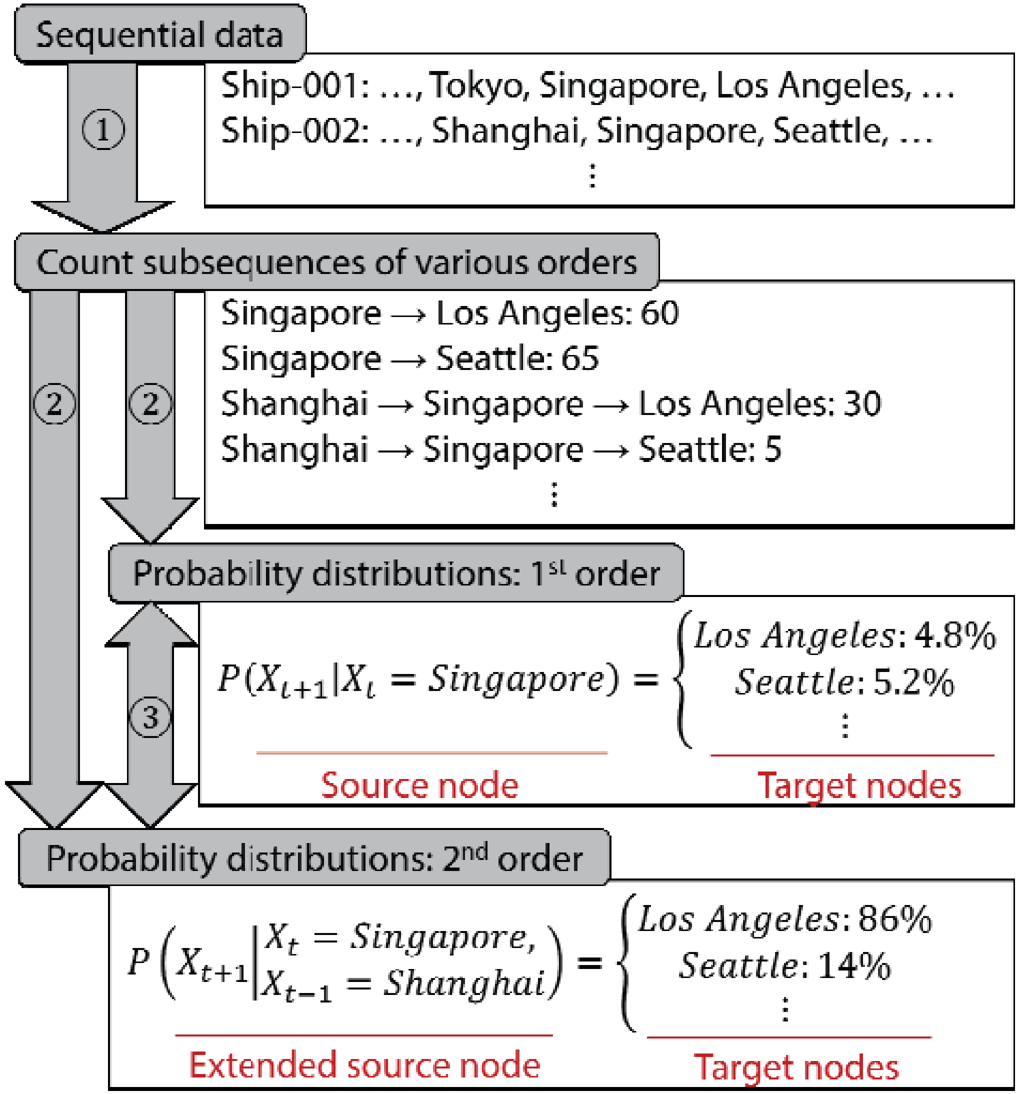
A
Ship 1 B A B A B A B A B
Ship 2 B A B A B A B
Ship 3 A C A C A C A C
Training
Testing
B
First-order network
B A C
B A B
B A C
C A B
Prediction
1/3 correct
C
HON
A B C A|B A|C
B A B
B A B
C A C
Prediction
3/3 correct

The Alpha Lab
大连理工大学阿尔法实验室

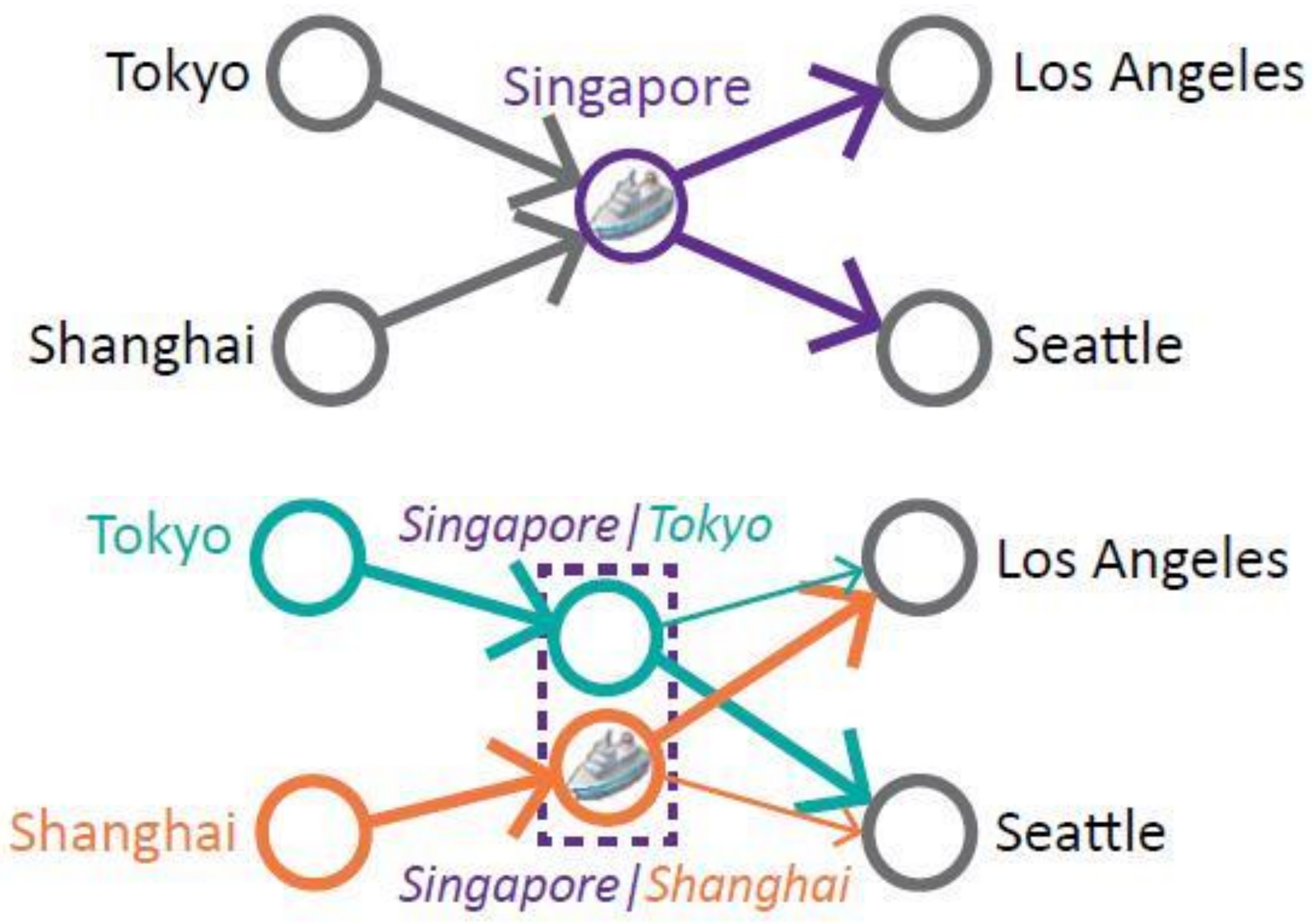
更高阶的网络



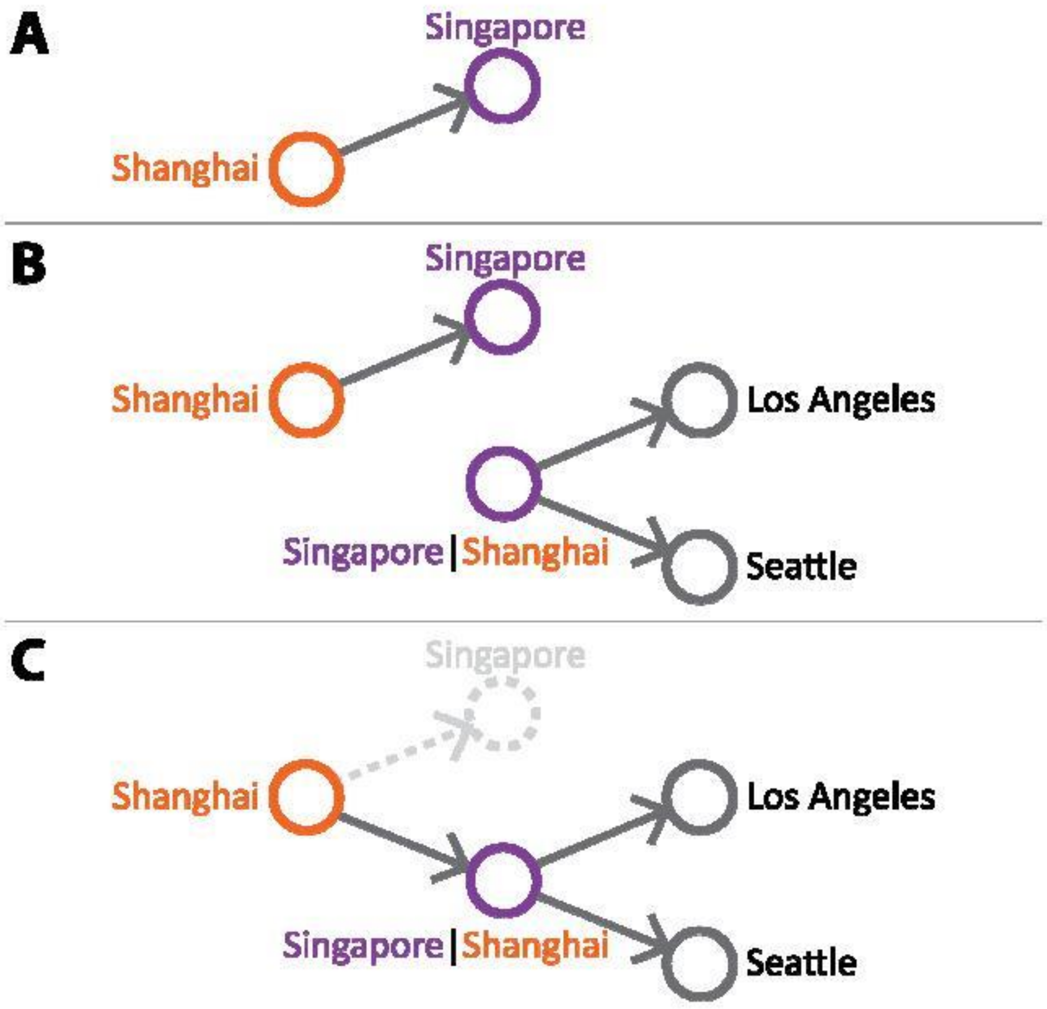
网络的高阶化过程---Rule Extraction



网络的高阶化过程---Network Wiring



网络的高阶化过程---Network Wiring



04

THE PART

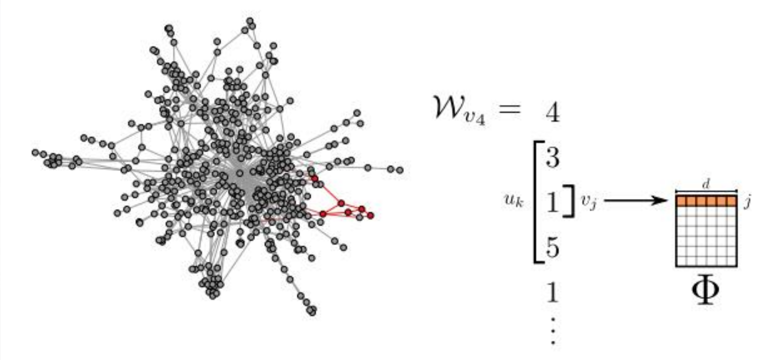
讨论

The Alpha Lab

大连理工大学阿尔法实验室

量子PageRank

网络嵌入（ NE ）与Deep Walk



node2vec

高阶网络

提高随机游走的准确性

对网络中节点聚类的影响

参考文献

[1] Paparo G D, Müller M, Comellas F, et al. Quantum Google in a Complex Network[J]. Scientific Reports, 2013, 3(6154):127-132.

[2] 谷歌背后的数学. http://www.changhai.org/articles/technology/misc/google_math.php.

[3] Jian X, Wickramarathne T L, Chawla N V. Representing higher-order dependencies in networks:[J]. Science Advances, 2016, 2(5).

[4] Perozzi B, Al-Rfou R, Skiena S. DeepWalk: online learning of social representations[J]. 2014:701-710.

[5] Grover A, Leskovec J. node2vec: Scalable Feature Learning for Networks[C]// KDD, 2016:855.

The Alpha Lab

大连理工大学阿尔法实验室

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

THANK YOU

http://thealphalab.org