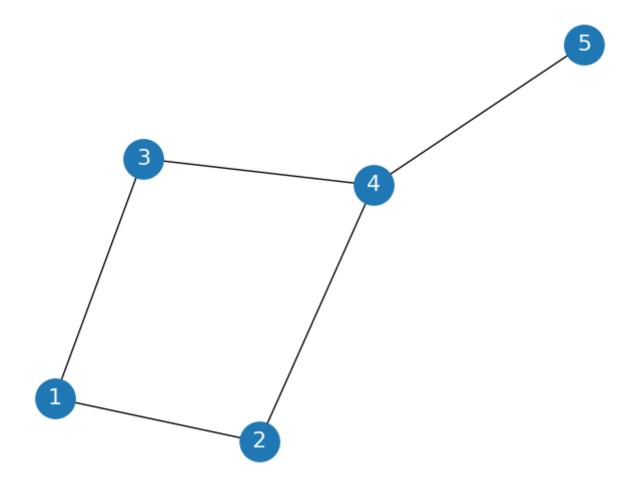
8 
$$\mathbf{h}_{u}^{(0)} \leftarrow x_{v}, \forall_{v} \in \mathbf{B}^{(0)};$$
  
9 for  $k = K \dots 1$  do  
10 for  $u \in \mathbf{B}^{(k)}$  do  
11  $\mathbf{h}_{N(u)}^{(k)} \leftarrow \mathrm{Agg}^{(k)} \left( \left\{ \mathbf{h}_{u'}^{(k-1)}, \forall u' \in N^{(k)}(u) \right\} \right);$   
12  $\mathbf{h}_{u}^{(k)} \leftarrow \sigma \left( W^{k} [\mathbf{h}_{u}^{(k-1)} \parallel \mathbf{h}_{N(u)}^{k}] \right);$   
13  $\mathbf{h}_{u}^{(k)} \leftarrow \mathbf{h}_{u}^{(k)} / \| \mathbf{h}_{u}^{(k)} \|_{2};$   
14 end  
15 end  
16  $\mathbf{z}_{u} \leftarrow \mathbf{h}_{u}^{(k)}, \forall u \in \mathbf{B}$ 

# 数据准备

对于下面这样一个图:



假如我们想要节点的嵌入输出的outputdim为2维的,输入的图对应初始特征数据如下:

## 1. 邻居节点聚合

我们先完成第一步,邻居节点聚合。 这一步可以采用多种聚合算子,我们在此以平均聚合算子与平均池化聚合算子为例。

### 1.1 平均聚合算子

节点4的邻接节点为2,3,5 我们用平均聚合算子AVERAGE(h)对2,3,5这三个节点的信息进行聚合:

就是对这三个向量对应值相加取均值,得到:

由上面我们得到 为:

为了使得输出是一个 的向量,我们设置 为一个 的矩阵,比如我们初始化为:

与上面的向量相乘,得到

将其代入激活函数后进行归一化, 就正式得到

对第一层的其他节点的操作也是类似的。

### 1.2 平均池化聚合算子

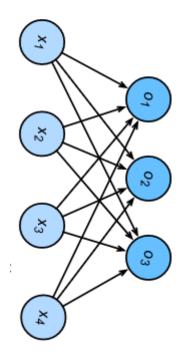
那么平均池化聚合算子呢,就是 , 是激活函数(ReLU) 具体怎么做的呢? 我们待处理的邻接节点:

此刻我们在此添加一个dense层(全连接层)

这里全连接层的意义就是对这每个节点,其向量的每个分量经过了一个全连接层。

我们知道全连接的核心是矩阵乘法,对于 ,输出是:

我们引入一个权重矩阵 ,它是input dim×hidden dim维度的,在这里input dim是4维,我们设定这个隐藏层的输出维度为3,那么W就是一个4×3的矩阵 b就是一个hidden\_dim(3)维的向量。 这样的话:



#### 权重的初始化有多种方式,我们在此用随机数初始化:

col0	col1	col2
0.17	0.75	0.53
0.4	-0.04	-0.04
-0.14	0.67	0.4
0.51	-0.18	0.77

对于2,3,5,得到的 分别为

将上述三个向量经过激活函数ReLU: 就得到(对每个分量分别取ReLU) 这样我们就完成了第一步;

由上我们得到

而

因为经过了一个平均池化聚合,邻居节点的输出变成了3维的,所以GraphSAGE对当前节点与邻居节点分别引入了一个权重矩阵:

因为我们想要输出是2维的,那么

和 就分别是

4×2维的和3×2维的;

类似上面,假如我们要在这里加一个bias的话,bias的维度应当是一个2维的向量 将计算得到的结果经过一个ReLU函数再除以它的模进行归一化进行输出,就完成了聚合操作。