# 谱域图机器学习

## 谱图基础知识

### 相关术语定义与性质

#### 一、图信号与图结构表示

**图信号**。给定一个无向图，其中 是节点集合，， 是边集合。图信号定义在节点集上的一个函数，向量形式为 ，表示节点的信号值。

在现实世界中，图信号通常是节点特征上的浅层编码，其中是节点在维的信号。

在图机器学习中，将图表示为矩阵是分析和处理图数据的关键步骤。通过矩阵表示，我们可以利用线性代数的方法来理解图的结构和特性。以下介绍几种常用的图的矩阵表示方式，包括邻接矩阵、度矩阵和拉普拉斯矩阵，并探讨它们的定义、性质以及在图分析中的重要性。

**邻接矩阵**（）。

对于无向图，邻接矩阵 是一个对称矩阵，即 。

**度矩阵**（）。度矩阵记录了每个节点的度数，即与该节点直接相连的边的数量。 是一个对角矩阵，其中，表示节点 的度数，非对角元素均为零。度矩阵可以用于衡量节点的重要性和连接强度、规范化图结构矩阵。

**拉普拉斯矩阵**（）。拉普拉斯矩阵 综合了邻接矩阵和度矩阵的信息，其定义为：

在图信号处理中，拉普拉斯矩阵的二次型形式具有重要含义。对于定义在图节点上的信号向量 ，其在拉普拉斯矩阵下的下的二次型，我们通常称为**总变差（total variation）**表示为：

对于任意不为0的实列向量，由于每一项，因此 是半正定矩阵。

总变差揭示了信号 在图上，相邻节点之间信号差的平方和，这一总和**量化了信号在图上的平滑度，可以理解为信号在图上的频率大小：**

如果 的值会较大，则表示信号 在相邻节点和之间变化剧烈，图上的信号频率较高；反之，如果 较小，则表示信号在相邻节点和之间变化平缓，此时，图上的信号频率较低。

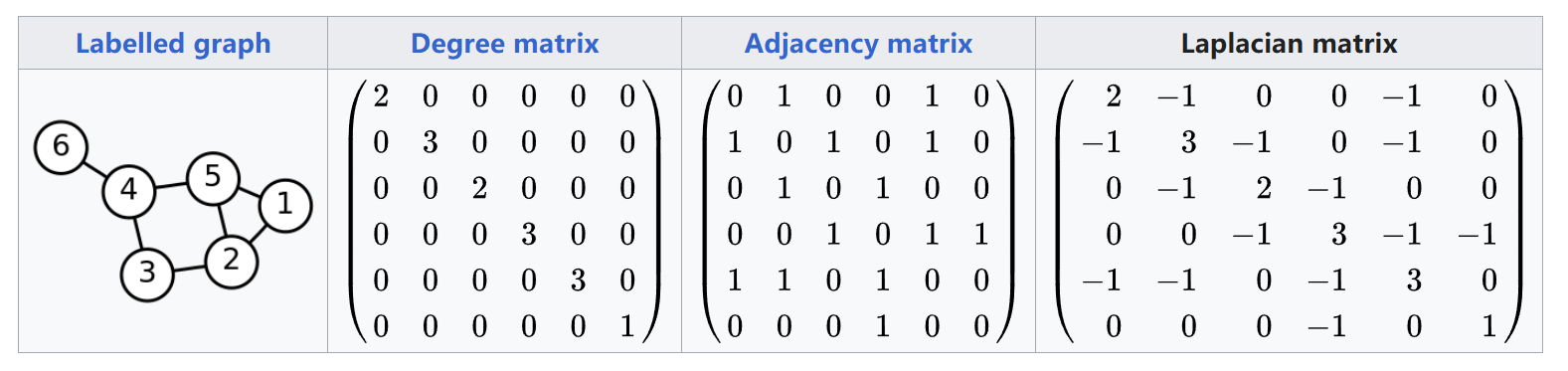
此外，总变差还与能量概念密切相关。在物理系统中， 可以被视为信号 的能量或功率。最小化能量意味着系统处于最稳定、最自然的状态。

然而，在处理度数差异较大的图时，拉普拉斯矩阵可能会受到高度数节点的影响。为了解决这个问题，通常情况下会对拉普拉斯矩阵进行归一化：

**归一化拉普拉斯矩阵**（）。定义为：

其中， 是单位矩阵。归一化拉普拉斯矩阵旨在使不同度数的节点在计算中具有可比性，避免高度数节点主导计算结果。

综上所述，邻接矩阵、度矩阵和拉普拉斯矩阵表示了图中的各种结构信息，它们的定义和性质为谱图理论分析奠定了重要基础。图[1.1](#chp8:f1)给出了在一张图中上述三种矩阵的实例。



邻接矩阵、度矩阵和拉普拉斯矩阵的示意图

#### 二、拉普拉斯矩阵的特征值分解

在上一节中，我们详细介绍了图拉普拉斯矩阵以及图信号平滑度（频率）的概念。现在，我们将探讨图拉普拉斯矩阵的特征值分解以及相关重要性质。

拉普拉斯矩阵特征值分解的求解问题定义为：

其中， 是第个特征值， 是对应的特征向量，其中。

因此，可分解为：

其中，，是特征值对角矩阵。

拉普拉斯矩阵的特征值和特征向量具有以下基本性质：

（1）是单位正交矩阵，即：

（2）特征值均为非负实数，最小特征值总是为0，即：。

因为是单位正交矩阵，所以，可以分解为：

同理，归一化拉普拉斯矩阵可以分解成：

（1）同样也是单位正交矩阵：

（2）特征值均为非负实数，且最大特征值小于等于2，即：。

拉普拉斯矩阵的特征值和特征向量共同构成了拉普拉斯谱，它包含了图中重要的结构信息。特征值为的个数等于图的连通分量的数量。第二小的特征值（即最小的非特征值）称为代数连通度，量化了图的连通程度，代数连通度越大，图的连通性越强。 特征值之间的数值差距（谱间隙）与图的扩展性和连通性有关。特征向量则包含了关于节点关系的丰富信息，高阶特征向量对应于图的细粒度结构。

综上所述，本节介绍了图拉普拉斯矩阵的定义与特征值分解。在接下来的章节中，我们将进一步研究如何利用图谱，定义图上的傅里叶变换和谱图卷积，为谱图机器学习的理解奠定坚实的理论基础。

### 图傅里叶变换

在图信号处理中，拉普拉斯矩阵的特征向量被视为图上的傅里叶基，是图傅里叶变换和图卷积的基础。特征值反应了对应特征向量在图上信号频率的大小：较小特征值对应的特征向量在图上变化较缓，对应于低频信号；较大特征值对应的特征向量在相邻节点之间变化剧烈，对应于高频信号。为便于读者理解图傅里叶变换，我们将简单回顾传统傅里叶变换的定义与作用。

#### 一、傅里叶变换

约瑟夫·傅里叶（1768－1830）提出了傅里叶级数，并指出任意周期为的函数都可以表示为一组不同频率三角函数的线性组合：

其中， 和 是基函数，， 越大，基函数频率越高。、 和 是函数在对应基的投影。

傅里叶级数的复指数展开形式为：

是一组正交基函数， 是在对应基函数上的投影，。

将推广到非周期函数上时，令周期 趋于无穷大，即 时，此时变成无穷小，公式（[[eq:fuliye]](#eq:fuliye)）变为以为变量的积分：

**傅里叶变换**，计算基函数在上的投影系数 。

**傅里叶逆变换**，根据基函数 和投影系数 逆向计算信号 ：

**离散傅里叶变换**，将傅里叶变换应用在离散信号上，其形式为：

其中， 是信号 的离散傅里叶变换， 是信号的长度， 是频率索引。

同理，离散傅里叶逆变换为：

傅里叶变换将时域（或空域）的函数映射到频域，揭示了函数在频域上的分布，是信号处理的重要工具，在信号分析中，通常称为在信号上频率的能量分量。

#### 二、图傅里叶变换

傅里叶变换将时域信号转换到频域，从而分析信号的频率信息。在图信号处理领域，图傅里叶变换同样是图信号分析的重要工具。然而，图上面临着新的挑战：图结构通常是不规则的，节点之间的连接关系复杂多样，传统傅里叶变换无法直接应用于图信号分析。

图拉普拉斯矩阵的特征向量构成了一组完备的正交基，特征值恰好能有效反应相应基在图上的频率，这些重要特性使得图拉普拉斯矩阵的特征向量成为图信号有效的傅里叶基。表[1.1](#chap8:tab1)给出了传统傅里叶变换和图傅里叶变换之间的联系与区别。

连续、离散和图傅里叶变换的比较

|  | 连续傅里叶变换 | 离散傅里叶变换 | 图傅里叶变换 |
| --- | --- | --- | --- |
| 变换基 |  |  |  |
| 维度 |  | （序列个数） | （顶点个数） |

特征向量的正交性和完备性，保证了信号能够在频域和顶点域之间无损地转换。因此，任意图信号都可以表示为拉普拉斯特征向量的线性组合：

其中，特征向量作为一组基，是信号在相应基下的投影，特征值 反映了基信号在图上频率，也称为基信号在上的能量分量，较小的特征值为低频分量，较大的特征值为高频分量。

现实世界的图数据中，例如社交网络，节点代表用户，边代表好友关系，信号 可以表示用户的兴趣偏好或影响力。那么低频分量对应于兴趣在好友间缓慢传播的情况，即好友间有相似的兴趣；高频分量则对应于好友间兴趣差异较大的情况，可能反映了社区边界或兴趣热点。

**图傅里叶变换。**图傅里叶变换将图信号从顶点域变换到频域，即求解在基信号上的投影，其定义为：

**证明:**

**图傅里叶逆变换。**逆变换是将频域信息还原成顶点域的信号，定义为：

**图的 Parseval 定理。**与经典傅里叶变换类似，图傅里叶变换也满足能量守恒性质，即信号在顶点域和频域的能量相等：

图傅里叶变换为定义图卷积、建立谱滤波器提供了基础（将在后续章节中详细讨论），进而可以在图上进行类似于传统信号处理中的操作，例如滤波、去噪等。

需要注意的是，计算图傅里叶变换涉及到特征值分解，对于大规模图来说，计算代价较高。为此，出现了很多研究工作，研究近似计算特征向量、设计避免特征值分解的滤波器，以提高计算效率。

### 谱图卷积

在传统信号处理中，卷积是一种基本且重要的工具，用于对信号进行滤波。卷积操作将一个滤波器核应用于信号，通过滑动内积的方式，实现对信号特定成分的增强或抑制。经典卷积依赖于信号的平移不变性，即信号在空间或时间上的平移不会改变卷积的结果。这使得卷积在图像处理、语音识别等领域得到了广泛应用。

然而，图数据是一种非欧数据集，节点之间的连接关系往往是不规则的，缺乏标准的坐标系和统一的度量标准。这种非平移不变性使得经典的卷积定义无法直接应用于图上。具体来说，因为节点之间的距离和关系无法用简单的空间位移来描述，所以在图中不存在一个自然、直接的方式来定义“滑动窗口”或“平移”操作。

为了克服这一挑战，需要重新思考如何在图结构上定义卷积操作，使其既能够适应图的非规则性，又能保留卷积在信号处理中的优势。卷积定理为这一挑战提供了解决思路：

**卷积定理。**函数卷积的傅里叶变换是函数傅里叶变换的乘积。即一个域中的卷积对应于另一个域中的乘积，例如时域中的卷积对应于频域中的乘积。

我们可以借助该定理，将图上的卷积操作转换为经过图傅里叶变换后频域上的点乘运算，从而解决在顶点域直接定义卷积的挑战。

**谱图卷积。**给定一个图信号 和一个滤波器 ，图卷积定义为：

其中， 是滤波器在频域的表示， 表示元素逐项相乘，即为频域上的卷积结果。

公式（[[eq:gft]](#eq:gft)）可以看做：（1）将顶点域上的滤波器和信号分别转换到谱域；（2）在频域做卷积；（3）将卷积后的结果还原回顶点域。图[1.2.3.9](#Xa39a3ee5e6b4b0d3255bfef95601890afd80709)展示了该过程。

以上图为例，图信号频谱上每个频率分量，即对应一个幅值。当使用低通滤波器对图信号进行滤波时，需要在频谱上强调低频分量，抑制高频成分。可以看到，应用在谱域上的在不同频率分量上值分别是，滤波后的频谱为：

通过图傅里叶逆变换，我们得到滤波后的信号：

将卷积谱域表示参数化为一个特殊的对角矩阵时，元素逐项相乘可以转换成矩阵乘法的形式，因此图信号的滤波过程可以简化为：

从上述例子可以看到，滤波时频谱上的每个频率分量对应一个的滤波值，因此可以参数化为一个与频率分量相关的函数，图信号滤波过程可进一步表示为：

其中，。

在处理节点度数差异较大的图时，可能会出现训练不稳定的情况，因此通常会对拉普拉斯矩阵进行归一化，同理，图信号滤波表示为：

或通常是从数据中学习得到的,可以参数化的定义为或。因此，滤波器设计的核心在于定义一个合适的频域函数，然后根据图数据来学习选择保留或抑制哪些频率分量。低通滤波器通过保留低频分量来平滑信号，高通滤波器通过保留高频分量，强调图的边缘和细节。此外，还可以设计带通滤波器或带阻滤波器，分别保留或抑制特定频率范围内的频率分量，以满足不同的信号处理需求。

## 谱图神经网络

谱图神经网络作为图深度学习的重要分支，源于谱图理论与深度学习方法的结合，其核心在于利用图的频谱特性来设计更强大的特征提取方法。谱图理论通过拉普拉斯矩阵特征分解揭示了图的全局和局部拓扑结构，而这些频谱信息为神经网络设计提供了独特的数学工具。谱图神经网络不仅能捕捉节点和子图的局部依赖关系，还能够通过频域分析建模长距离的全局信息。近年来，研究者围绕谱图滤波器设计、位置编码方法和对比学习等多个方向，探索了谱图神经网络的潜力。在本章中，我们将深入剖析基于谱图的神经网络方法，从经典的滤波器设计到现代的位置编码与对比学习，全面展示谱图神经网络在图表示学习中的理论基础与实际应用。

### 基于谱图滤波器设计的图神经网络

#### 一、线性滤波器

在线性滤波器中，谱图神经网络将可学习的滤波器设为：

对拉普拉斯矩阵进行归一化后，滤波器表示为：

下面将介绍几种经典的线性滤波器。

#### 1、图卷积网络（GCN）

在公式 ([[eq:lvboqi]](#eq:lvboqi)) 中，特征向量做矩阵乘积的复杂度为，时间开销很大。此外，对于大规模图来说，计算图拉普拉斯矩阵 的特征值分解也非常耗时。为了解决这一问题，Hammond 等人（2011 年）提出，在重新缩放 后，滤波器 可以通过切比雪夫多项式 的 阶截断展开来近似：

其中， 是归一化拉普拉斯矩阵 的最大特征值， 是切比雪夫系数的向量。切比雪夫多项式递归定义为 ，其中 , 。读者可以通过参考进一步深入了解这种近似方法。

回到对信号 和滤波器 定义的卷积运算，现在有：

其中，。由于这个多项式是图拉普拉斯的 阶多项式，它现在是 -局部的，即它仅依赖于距离中心节点最多 跳的邻居节点。计算式 ([[eq:gcn2]](#eq:gcn2)) 的时间复杂度是 ，即与边的数量成线性关系。参考文献使用这种 -局部卷积来定义图上的卷积神经网络。

##### GCN 的实现:

GCN 模型通过将卷积运算的切比雪夫多项式截断为一阶（即式（[[eq:gcn2]](#eq:gcn2)）中的 ），并近似 ，进一步简化了谱图卷积神经网络。这些近似使得卷积层简化为：

每个卷积层有两个滤波器参数 和 ，这两个滤波器参数可以在整个图上共享。这种形式的滤波器可以连续应用，从而有效地对一个节点的 -阶邻域进行卷积，其中 是神经网络模型中连续的滤波操作或卷积层的数量。

在实际应用中，通过限制参数的数量，可以避免过拟合并最小化每层的矩阵乘法数量。GCN 进一步假设 ，从而得到如下表达式：

注意， 的特征值在区间 内。然而，在深度神经网络模型中，重复应用该算子可能会导致数值不稳定及梯度爆炸或消失问题。为了缓解这一问题，作者引入了重正则化技巧：

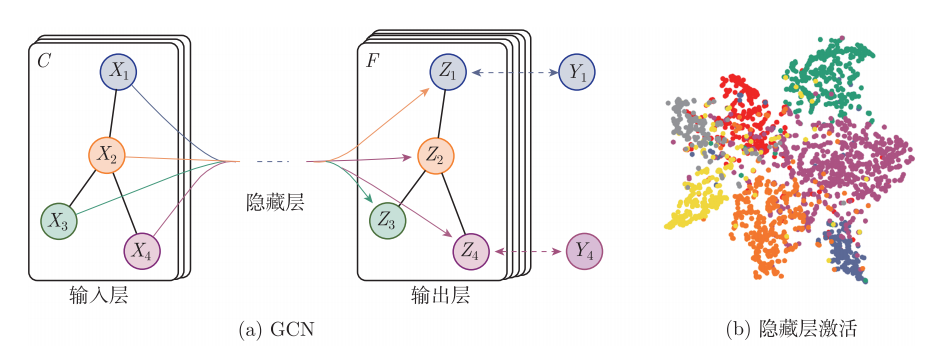
其中，，且 。作者将这一定义扩展到具有 个输入通道（即每个节点的 -维特征向量）信号 上。于是，一个输出为 维的滤波器或特征映射可以定义为：

其中， 是一个滤波器参数矩阵， 是卷积后的信号矩阵。由于 可以使用稀疏矩阵与稠密矩阵的乘积高效计算，因此该滤波运算的时间复杂度为 。

现在已经介绍了一个简单且灵活的模型 ，它可以在图上高效地进行信息传播。接下来，将考虑在具有对称邻接矩阵 （可以是二元的或加权的）上进行半监督节点分类的双层 GCN，如图[1.2](#f:gcn)所示。首先，在预处理步骤中计算 。模型的正向传播过程可以用以下简单的形式表示：

其中， 是一个隐藏层的权重矩阵， 是输出层的权重矩阵。对于半监督多类别分类任务，GCN 会在所有有标签的样本上计算交叉熵误差：

其中， 是标签集合， 是所有节点的标签矩阵。神经网络的权重 和 通过梯度下降进行训练。在训练过程中，GCN 可以通过 dropout 引入随机性。

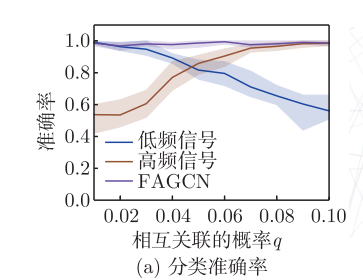


GCN模型的示意图

#### 2、融合高低频信息的图卷积网络 (FAGCN)

一般来说，图神经网络（GNN）通过从邻居节点聚合信息来更新节点表示，这可以看作是一种特殊形式的低通滤波器 。最近的研究 表明，信号的平滑性，即低频信息，是 GNN 成功的关键。然而，我们所需要的仅仅是低频信息吗？其他频率的信息在 GNN 中扮演了什么角色？这是一个基本的问题，它促使研究人员重新思考 GNN 在学习节点表示时是否全面利用了节点特征中的信息。

为了验证其他频率的信息是否有用，作者通过实验评估低频和高频信号的作用。实验实验生成了一个包含200个节点的网络，并将节点随机分为两个类别。第1类节点的特征从高斯分布中采样，第2类节点的特征从 中采样。同类别节点以的概率连接，不同类别节点以 的范围内取值连接。随着增加，网络从同配性逐渐转为异配性。实验将低通和高通滤波器应用于节点分类任务，50%的节点用于训练，50%的节点用于测试。



低频信号、高频信号和 FAGCN 的分类准确率，横轴表示相互关联的概率。

结果表明，这两种方法都有助于学习节点表示。具体来说，研究发现，当一个网络表现出异配性时，高频信号比低频信号表现得要好得多，这意味着被当前 GNN 在很大程度上消除的高频信息，并不总是无用的，而低频信息对于复杂网络也并不总是最优的。一旦确定了 GNNs 中低频信息的弱点，就自然会考虑如何在 GNNs 中利用不同频率的信号，同时使其适用于不同类型的网络。

为了回答这个问题，需要解决两个挑战：

（1）低频信号和高频信号都来源于原始特征，传统滤波器通常是针对特定频率的信号设计的，不能同时有效地提取低频和高频信号。

（2）即使可以提取不同频率的信息，现实中的网络同配性往往不可知且差异较大，任务和不同信息之间的相关性也非常复杂。因此，很难确定应该使用哪些信号——是原始特征、低频信号、高频信号，还是它们的组合？

为了解决上述问题，文章设计了一个通用的频率自适应图卷积网络（FAGCN），能够自适应地聚合来自邻居节点或节点自身的低频信号、高频信号和原始特征。FAGCN 首先利用图信号处理理论，定义了增强的低通和高通滤波器，用于从原始特征中分离低频和高频信号。接着，设计了一种自门控机制，在不知道网络同配/异配程度的情况下，自适应地结合低频信号、高频信号和原始特征。在真实世界网络上进行的大量实验证明，FAGCN 相比最先进的技术更有优势。

##### 信号分离

如前所述，低频信号和高频信号都有助于学习节点表示。为了充分利用它们，作者设计了一个低通滤波器 和一个高通滤波器 ，用于从节点特征中分离出低频和高频信号。具体定义为：

其中， 是一个范围在 的缩放超参数。使用 和 表示卷积核，信号 经过滤波后的表示为：

其中， 的卷积核为 ，可以重写为 。当 时，，即幅值为负。为了避免这种情况，考虑二阶卷积核 ，即：

当 时，；当 时，，此时可以放大低频信号，同时抑制高频信号。

##### 信号聚合

为了解决如何自适应地聚合低频和高频信号的问题，作者引入了一个自适应机制，使用注意力机制来学习低频和高频信号的比例。模型的输入为节点特征矩阵 ，其中 是节点特征的维度。基本的聚合公式为：

其中， 是节点 的聚合表示， 和 分别表示节点 的邻居集合和度， 和 分别表示节点 的低频和高频信号在节点 中的比例，且满足 ，。

为了有效地学习系数 ，需要同时考虑节点本身及其邻居节点的特征。为此，作者提出了一种共享的自门控机制 来学习这些系数：

其中， 表示连接操作， 是共享卷积核， 是双曲正切函数，可以将 限制在 范围内。为了利用结构信息，该论文仅计算节点与其一阶邻居 之间的系数。最终，聚合邻居节点的表示为：

其中， 为节点 的聚合表示。在聚合邻居节点信息时，使用节点的度来对系数进行归一化。

更详细的方法描述和实验验证见参考文献 。

#### 3、图神经网络的统一优化框架尝试

设计有效的消息传递机制，是图神经网络（GNN）最基本的组成部分。虽然存在各种传播机制，但它们基本上都是通过沿着网络拓扑聚合节点特征来利用网络拓扑和节点特征。这一观点引发了一个自然的问题：尽管存在不同的传播策略，但是否存在一种统一的数学准则从根本上控制着不同 GNN 的传播机制？如果是这样，那么该准则是什么样呢？对这个问题的深入探讨，为从根本上研究不同 GNN 之间的关系和差异提供了一个宏观的视角。

作者分析了几个较有代表性的 GNNs 的传播过程，总结了它们的共性。研究发现，它们可以从根本上概括为一个具有灵活图卷积核的统一优化框架，传播后学习到的表征可以隐式地视为相应优化目标的最优解。这个统一优化框架由两部分组成：特征拟合项和图拉普拉斯正则化项。特征拟合项建立了节点表示和原始节点特征之间的关系，通常是为了满足特定 GNNs 的不同需求而设计的。图拉普拉斯正则化项利用拓扑结构起到了特征平滑的作用，所有 GNNs 都共享这个项。例如，GCN 的传播只能用图拉普拉斯正则化项来解释，而 PPNP 还需要拟合项来约束节点表示和原始特征的相似性。

由于所提出的统一框架提供了对不同 GNNs 的宏观视角，当前 GNNs 的缺点很容易被识别出来。因此，这个统一的框架为设计新的 GNNs 创造了新的机会。传统上，当提出一个新的 GNNs 模型时，研究人员通常专注于设计一个特定的谱图滤波器或聚合策略。现在，统一框架提供了另一条新的途径来实现这一点，即通过优化目标函数，可以得到新的 GNNs。这样可以清楚地知道传播过程背后的优化目标，使得新的 GNNs 更具可解释性和可靠性。通过提出的框架，研究发现，现有的工作通常使用朴素的图卷积核作为特征拟合函数，因此作者提出了两种新颖的具有可调节核的目标函数，其具有低通和高通滤波的能力。

##### 统一优化框架

文章将 层的传播机制主要总结为以下两种形式。对于具有逐层特征变换的 GNN（如 GCN）， 层传播过程可以表示为：

其中，， 是经过 层传播后的输出表示。 通常取决于具体的 GNN 模型，表示经过 个卷积后的广义组合运算。 表示在图 上聚合第 层的输出 来进行第 次卷积运算， 是相应的逐层特征转换操作，包括非线性激活函数 和特定层的可学习权重矩阵 。

一些深度图神经网络（如 APPNP 和 DAGNN ）将层级的 和 解耦，并在连续的聚合步骤之前使用一个独立和特征变换：

其中，， 可以是对原始特征矩阵 进行的任何线性或非线性变换操作。

此外，组合操作 通常有两种形式：对于像 GCN、SGC 和 APPNP 这样的 GNN， 直接利用第 层输出；而对于使用来自其他层输出的 GNN，如 JKNet 和 DAGNN， 可能表示对来自 层的一些（或全部）输出进行池化、拼接或注意力操作。

不同的 GNN 提出了不同的问题传播机制，实际上，它们通常潜在地旨在实现两个目标：一是从特征中编码有用的信息，二是利用拓扑结构的平滑能力，这可以表示为以下优化目标：

其中， 是非负系数， 通常从 中选择； 是对原始输入特征矩阵 的变换； 和 被定义为任意图卷积核； 是传播表示，对应于最小化目标函数 时的最终传播结果。

在统一优化框架中，第一项 是一个拟合项，通过设计不同的图卷积核 和 ，它可以将 中的信息灵活地编码到所学习到的表示 中。图卷积核 和 可以从 、 和 中选择，分别表示全通、低通和高通滤波能力。第二项的 是一个图拉普拉斯正则化项，旨在约束两个连接节点的学习表示变得相似，从而捕捉同质性特性。 来自以下图拉普拉斯正则化：

提出的框架对目标优化函数进行数学建模，展示了 GNN 的全景视图。既然不同现有的 GNN 都可以适应这个框架，那么新的 GNN 变体也应该基于该框架提出。研究需要做的就是根据具体的场景设计框架内的变量（例如图卷积核 和 ），相应的传播过程很容易推导出来，从而自然地设计出新的 GNN 架构。通过一个明确的目标函数，新设计的模型将更具可解释性和可靠性。

##### GNN-LF/HF模型

基于统一优化框架，研究发现，大多数现有的 GNN 会在特征拟合项中将和简单地设为,这意味着它们需要将中所有的原始信息编码到中。然而事实上，可能不可避免地包含了噪声或不确定信息。JKNet 将传播目标中的设置为,它可以将中的低频信息编码到中。然而，现实中的情况更加复杂，因为很难确定哪些信息应该编码，只考虑一种类型的信息并不能满足不同下游任务的需要，并且有时高频信息或全部信息也是有用的。本节专注于设计新的 和，以便在统一优化框架下灵活地编码更全面的信息。

**带有低通滤波核的 GNN。**下面首先考虑在原始空间和低通滤波空间中建立和的关系。

在公式 ([[eq:unified-framework]](#eq:unified-framework)) 中取 ,其中,在特征上使用灵活的低通滤波核，传播过程可以表示为：

是一个平衡系数，文章设置,以确保是一个对称的半正定矩阵。因此，矩阵在谱域上具有与相似的滤波行为。通过调整平衡系数,所设计的目标可以灵活地约束和在原始空间和低通滤波空间中的相似性，从而满足不同任务的需要。

**闭式解。**为了最小化公式 ([[eq:lf-gnn]](#eq:lf-gnn))中的目标函数，对公式 ([[eq:lf-gnn]](#eq:lf-gnn)) 关于求导并令导数为0,推导出相应的闭式解如下：

使用可以将公式（[[eq:hflf1]](#eq:hflf1)）重写为

**迭代近似。**考虑到矩阵求逆会导致闭合解的计算效率低下，作者使用以下迭代近似解来代替,以避免构造密集逆矩阵：

当时，迭代近似解将收敛到公式（[[eq:hflf2]](#eq:hflf2)）的闭合解，并且当时，所有系数始终为正。

##### 低通模型设计

基于公式（[[eq:hflf2]](#eq:hflf2)）和公式（[[eq:hflf3]](#eq:hflf3)）推导出的两种传播策略，作者提出了两种新的 GNNs 模型，它们分别以闭式和迭代形式表示。文章将这两种 GNNs 模型表示为具有低通滤波图卷积核的 GNNs（GNN-LF）。

**闭式 GNN-LF。**根据式([[eq:hflf2]](#eq:hflf2))中的闭式传播矩阵，作者定义了以下传播机制，其中

首先使用 MLP 网络对特征进行非线性变换，得到结果,然后使用设计好的传播矩阵传播和,从而从原始空间和低频空间中得到特征信息的编码表示。

**迭代 GNN-LF。**根据迭代形式的传播机制，可以设计一个深度且计算高效的图神经网络，其中

作者直接使用层的输出作为传播结果，这种迭代传播机制可以看作层级基于的邻居聚合，并在特征矩阵和经过滤波的特征矩阵上进行残差连接。并且，文章像一样解耦了传播过程中的层级变换和聚合过程，这有助于缓解过度平滑问题。

以上概述了统一框架下低通滤波器的设计方法，对于高通滤波器部分，方法类似，具体请参考原论文。

#### 二、多项式滤波器

多项式滤波器的特点是将滤波器表示为拉普拉斯特征值的多项式。与线性滤波器只能对频谱进行线性变换、表达能力有限不同，多项式滤波器能够捕捉复杂的频谱特性，拟合任意变换需求。其通式可以表示为：

接下来，将具体介绍几种典型的多项式滤波器

#### 1、ChebNet

本篇文章首次提出了多项式谱滤波器，高效灵活地在图结构上进行特征提取。作为在图数据上高效执行卷积操作的一种新方法，ChebNet避免拉普拉斯分解，并通过切比雪夫多项式截断的滤波器实现了空域中局部邻居的聚合。

##### K阶邻域的谱滤波器

公式（[[eq:lvboqi]](#eq:lvboqi)）虽然能够灵活地在频谱域建模，但存在两个主要问题：一是无法实现滤波器的空间局部性，即滤波器可能作用于图中距离较远的节点，导致无法有效提取局部特征；二是的学习复杂度为，这与数据的维度直接相关，尤其在大规模图上难以高效应用。为解决这些问题，作者采用了多项式滤波器：

以上公式是怎样实现阶局部性呢？由于以顶点为中心，滤波器在顶点处的值为 ，其中是中心节点的克罗内克函数。根据D. Hammond等人的工作，可以证明如果图中节点 和节点 的最短路径距离 超过 ，即 ，则高阶多项式矩阵的对应元素。这意味着，滤波器 的作用范围严格限制在目标节点 的 跳邻域内，滤波器对更远节点的影响为零。这种 阶局部性的实现得益于多项式的有限阶数 ，它有效地控制了滤波器的作用范围。此外，该滤波器它们的学习复杂度从降为，即只学习个多项式项的系数。

##### 快速滤波

引入局部性后，滤波器核的学习时间复杂度由降低到，但的计算复杂度仍因傅里叶基的计算保持在。

为解决这一问题，可以将参数化为多项式函数，该函数能够通过图归一化拉普拉斯矩阵的递归操作高效计算。由于计算稀疏矩阵的次乘积的复杂度为，这种方法大幅降低了计算成本。此外，还可采用 Lanczos 算法构建Krylov子空间的标准正交基。该方法的优势在于各系数的独立性，但实现过程相对复杂。

对于阶切比雪夫多项式 (Chebyshev polynomial) ，可以利用固定递归关系进行计算，即，其中，，。因此，滤波器可被参数化为以下形式的截断扩展：

其中，参数是切比雪夫系数(Chebyshev coefficients)的向量， 为 的阶切比雪夫多项式。滤波器操作可以被写为，其中 是在缩放的拉普拉斯算子 上计算的阶切比雪夫多项式。

令，为简化计算，可利用递归关系计算：

其中，。整个滤波操作的时间复杂度为。

该论文中还用到了图的粗化（Graph Coarsening）、快速池化（Fast Pooling）等加速技巧，详情见。

##### ChebNetII

ChebNet通过对图拉普拉斯算子进行切比雪夫多项式近似，从而实现图卷积的高效计算。由于切比雪夫多项式的逼近误差在理论上有最小化的特性，它被认为是一种在理论上最优的图卷积方式。然而，在实际应用中，尽管切比雪夫多项式具有最优的逼近性质，但在现实数据上效果却无法超越先进模型。

为了评估切比雪夫基的逼近能力，作者提出了具有显式系数的ChebNet，即ChebBase，它简单地用切比雪夫基替换了公式（[1.2.3.9](#Xa39a3ee5e6b4b0d3255bfef95601890afd80709)）中的多项式项：

其中，表示多层感知机（MLP）。 ChebNet的性能不佳主要是由于在其Chebyshev展开中学习到的系数不符合应有的约束，导致了过拟合现象。这种过拟合现象是因为ChebNet没有有效控制学习到的多项式系数，使得它们不能正确地逼近目标函数。

**Chebyshev系数的衰减规则。**指出，如果函数在区间内是解析的且在边界处弱奇异，则Chebyshev展开的系数必须满足：当时，，其中，是一个大于零的常数。

这个定理说明，为了逼近解析函数，系数需要按照的速率快速递减，这种衰减规则有助于控制高阶多项式对函数逼近的影响，从而避免在函数的高频部分引入过多的振荡，即所谓的Runge现象。

由于ChebNet在实际应用中没有有效地实施这种系数衰减控制，它的模型中可能包含了过高的系数，特别是对于高阶项。这些不受控制的高阶系数使得模型在拟合训练数据时过于灵活，能够捕捉到数据中的每一个小波动，包括噪声。结果就是，虽然模型在训练集上的性能可能很好，但其泛化到新的、未见过的数据时性能下降，因为它过度拟合了训练数据的特定特征而非背后的一般规律。

##### ChebBase/k

在讨论ChebNet和ChebBase之后，为了进一步优化模型并减少过拟合的影响，作者提出了一个改进版本，称为ChebBase/k。ChebBase/k模型基于系数衰减的理论基础，在ChebBase的基础上引入了系数的附加约束，进一步控制高阶多项式项的贡献，减少由于高阶项引起的不稳定振荡，即避免Runge现象。ChebBase/k的数学表达式定义如下：

每个系数都除以其对应的阶数，其中以处理除以零的情况。

##### Chebyshev插值

Chebyshev插值的逼近能力强，收敛速度快。通过选择Chebyshev节点作为插值点，也能有效避免Runge现象，显著减少区间边界处的误差振荡，从而提高插值多项式的稳定性。此外，Chebyshev节点的正交性质使得插值多项式能够更快速地逼近目标函数，特别是在函数平滑或解析时表现尤为出色。受Chebyshev插值的启发，作者提出了ChebNetII，直接通过Chebyshev插值来逼近滤波器函数：

其中，是可学习的参数，是Chebyshev节点，，。

#### 2、GPR-GNN

基于消息传递的神经网络通常依赖同质性假设，导致在异质性图（不同标签节点倾向于相连）上的表现不佳。此外，随着网络层数增加，特征会因过度平滑问题而失去辨别能力，难以有效捕捉长距离节点间的依赖关系，从而限制了应用范围和性能表现。

GPR-GNN引入了Generalized PageRank（GPR）技术，自适应学习GPR权重，使其能够同时优化节点特征和图拓扑信息的利用。核心思想在于赋予每一传播步长以可学习的权重，这些权重既可以是正值，也可以是负值，从而能够适应图的同质性或异质性结构。GPR-GNN在传播节点特征时，通过自适应调整权重幅度，实现对特征平滑度和拓扑聚合能力的权衡，有效缓解了过度平滑问题。

##### PageRank

PageRank是一种用于图数据的重要技术，最初被谷歌用于网页排名。它的核心思想是通过模拟随机游走来评估每个节点的重要性。具体来说，在一个有向图中，PageRank通过迭代计算每个节点的分数，衡量从其他节点“跳转”到该节点的概率。PageRank通过多次迭代来更新节点分数，最终达到平衡状态。

##### Generalized PageRank (GPR)

GPR是一种从经典PageRank方法拓展而来的技术，它引入了可学习的权重参数，通过自适应的传播机制，将初始节点特征与图拓扑结构相结合，计算出能够有效反映节点重要性和相似性的得分。GPR的操作流程可以简洁地描述如下：给定一个图的种子节点 ，初始化一维特征向量 ，该向量在种子节点处取值为 （即 ），其他节点取值为 。在此基础上，GPR得分通过以下递归公式定义为：

其中， 是归一化的图拉普拉斯矩阵； 表示特征向量经过 次图传播后的结果； 是对应第 次传播的GPR权重，可正可负，用于调节不同传播步长的影响力。

通过调节GPR权重 ，可以实现对图信号的不同频率成分（高频或低频）的选择性增强，从而满足不同的图聚类需求。具体而言，某些特定形式的PageRank方法（如个性化PageRank和热核PageRank）都可以看作是特定权重选择下的GPR。

##### GPR与多项式滤波器的等价性

通过将GPR公式中的无限和截断到一个自然数 ，GPR可以被表示为一个阶数为 的多项式图滤波器，形式为：

其中 是GPR的权重， 是归一化的图拉普拉斯矩阵。这一表达式能够通过组合不同阶传播（即图拉普拉斯矩阵的幂次）来调整图信号，进而实现对图拓扑和节点特征的有效建模。

进一步来看， 的多项式滤波器可通过其特征分解 表示为：

其中 是作用在特征值矩阵 上的多项式函数，具体为：

其作用是选择性地对图信号的频率成分（高频或低频）进行增强或抑制。根据Shuman等人的研究，任何图滤波器都可以通过多项式滤波器逼近，这使得GPR方法不仅适用于处理多种节点标签分布，还能通过灵活的权重设计对复杂的图信号进行有效处理。

此外，GPR方法的滤波特性与权重设计密切相关。在特定权重条件下，GPR可以表现为低通或高通滤波器。具体而言，如果权重满足 对所有 ，且 ，同时存在某个 使得 ，则 为低通滤波器，倾向于保留低频信号（如同质性图的特征）。相反，当权重为 ，其中 且 足够大时， 则表现为高通滤波器，能够更好地捕捉高频信号（如异质性图中的特征）。

综上所述，GPR方法通过灵活设计传播权重 ，能够自适应地调整其图滤波特性，从而在不同的图信号处理任务中展现出强大的适应性和泛化能力。这种灵活性使得GPR方法不仅能够有效地处理同质性图，还能在异质性图中取得良好的性能表现。

##### 模型实现

GPR-GNN模型的核心结构由两部分组成，分别是节点特征提取模块和基于广义PageRank（GPR）的图传播机制。通过这两部分的结合，模型能够自适应地调节每一步图传播的权重，从而更好地适应不同节点标签模式。

首先，GPR-GNN通过一个单层多层感知器（MLP）神经网络从输入的节点特征矩阵 中提取隐状态特征。对于每个节点 ，其初始隐状态特征表示为：

其中， 表示具有参数集合 的MLP网络， 为节点 的输入特征。该步骤为每个节点生成初始的隐状态特征矩阵 。

接下来，模型基于图的传播机制对 进行 步传播，生成多个不同步数的传播结果 。传播公式为：

其中 是归一化的图拉普拉斯矩阵，用于捕捉图的拓扑结构特性。通过 次递归传播，每一步传播结果都编码了不同范围内的邻域信息。

最终，GPR-GNN对所有传播结果进行加权线性组合，输出预测矩阵 ：

其中 是每一步传播对应的GPR权重。这些权重由模型端到端训练，与MLP参数 一起通过梯度下降优化。通过应用Softmax函数对 进行归一化，生成最终的预测概率矩阵 ：

这种设计为GPR-GNN提供了很强的解释性。模型能够自适应地控制每一步传播的贡献，使得传播机制可以根据节点标签模式动态调整权重。通过分析学习到的GPR权重 ，还可以揭示图的拓扑信息特性，从而确定最优的多项式图滤波器形式。

GPR-GNN的端到端训练方式使得节点特征提取和图传播过程能够相互影响，协同优化。这种紧密耦合的设计显著提升了模型的表达能力和性能，使其在同质性图和异质性图中均表现优异。

#### 3、多项式滤波器扩展

##### BernNet

BernNet利用Bernstein多项式近似来表示任意的谱滤波器。具体来说，对于定义在图的归一化拉普拉斯矩阵谱上的任意滤波器函数，BernNet通过K阶Bernstein多项式来近似这个函数，即：

其中，是模型参数，可以被解释为在区间内均匀采样的滤波器值，而是Bernstein基多项式，定义为：

通过设计或学习，BernNet能够获得各种谱滤波器，其滤波操作可以表示为：

这里的是图信号。BernNet的一个显著优点是其系数与目标滤波器的谱属性高度相关，这增强了模型的可解释性。通过这种方式，BernNet不仅能够设计出典型的滤波器，如全通、线性低通、线性高通等，还能够表达更复杂的滤波器，如带通、带阻、梳状、低带通滤波器等，并且在真实世界的图建模任务中取得了优越的性能。

##### JacobiConv

JacobiConv利用Jacobi多项式作为谱滤波器的基，这种基具有正交性和灵活性，能够适应不同的权重函数和图信号密度。具体来说，JacobiConv的滤波器可以通过以下形式表示：

其中， 是第 个输出维度的预测， 是可学习的多项式滤波器系数， 是Jacobi多项式基， 是图的归一化邻接矩阵， 是转换后的特征矩阵的第 列。Jacobi多项式基的形式为：

这里， 是与Jacobi多项式相关的系数， 和 是控制多项式形状的超参数。JacobiConv通过这种设计，能够更好地适应不同的图结构和信号分布，从而提高模型的表达能力和性能。

##### 复合型图滤波器

另一种多项式滤波器是复合型图滤波器，它对频率响应有急剧变化的窄带有很好的近似性。前述多项式滤波器需要增加它们的阶数以适应这样的窄带，这可能导致数值不稳定。复合型图滤波器通过学习两个多项式之间的比率作为过滤来解决这个问题，它可以表示为：

其中 和 是两个多项式的阶数。 CayleyNets和GraphARMA分别是复域和实域中的两种传统复合型图滤波器。 复合型图滤波器可以用更少的阶数拟合窄带。

#### 三、高级图滤波器

高级滤波器的特点在于，它们通过显式地将图拉普拉斯矩阵的特征值作为神经网络的输入，从而捕捉图结构中的几何信息，其通式可表示为：

这类方法通常通过截断图谱（仅使用前个最小的特征值和对应的特征向量）来降低计算复杂度，尽管这种操作依然相对计算密集，但能够提取特征值中蕴含的图几何性质，例如第二小的特征值反映了图的代数连通性。这使得高级滤波器在表征图的深层结构特性方面具有显著优势。

#### 1、SpectralCNN

SpectralCNN 是第一个提出的高级图滤波器网络，它通过将图滤波器视为神经网络的参数，并直接利用梯度下降对其进行优化，从而实现图结构数据上的卷积操作。其网络输入和输出的关系可以表示为：

其中， 是激活函数，用于引入非线性， 是第 层第 个特征的节点表示， 是图拉普拉斯矩阵的特征向量矩阵， 是第 层对应于特征 的图滤波器。

SpectralCNN 将卷积神经网络（CNN）的设计思想推广到图结构数据中，通过定义图滤波器 ，实现了类似于传统卷积的多层叠加效果。每个特征独立地应用一个图滤波器，这为模型提供了极大的灵活性和表达能力。然而，这种灵活性也带来了较高的时间和空间复杂度。由于需要对稠密特征向量矩阵 和滤波器 进行矩阵运算，SpectralCNN 的计算开销为 ，尤其在处理大规模图时会显得十分昂贵。

尽管SpectralCNN增强了模型的拟合能力，但其非参数化的图滤波器设计在处理特征值重复的图时存在固有的局限性。当图中存在多个重复特征值时，模型无法有效应对特征向量的模糊性，导致性能下降。此外，高计算开销也限制了其在实际大规模图任务中的应用。

SpectralCNN 的提出开创了基于图谱方法的图神经网络研究方向，为后续高级滤波器的设计提供了重要的理论基础，但也揭示了在图谱方法中处理计算复杂性和特征值模糊性问题的挑战。

#### 2、LanczosNet

LanczosNet 是一种基于谱卷积的多尺度图表示学习框架，其核心目标是通过高效计算图拉普拉斯矩阵的低秩近似，实现图卷积的高效化和表达能力的增强。传统的空间图神经网络通常通过堆叠多个消息传递层构造多尺度表示，即逐层递归计算 ，然而在大规模图上，这种方法因计算开销巨大而不可行。LanczosNet 利用以下谱域性质：

通过在谱域中直接计算长距离信息滤波器，显著降低了复杂度，并能够更有效地捕获长距离节点之间的依赖关系。

##### 长距离信息的谱滤波器

LanczosNet 引入了一种针对长距离信息的谱滤波器，其数学表达式为：

其中， 是逐元素函数，例如多层感知器（MLP），。

这一谱滤波器通过特征值的组合捕获了图的长距离依赖特性，同时有效降低了计算复杂度。

##### 短距离信息的空间卷积

为了捕获短程信息，LanczosNet 直接利用传统的空间卷积方式进行特征聚合。这种设计能够对局部图结构进行有效编码，与长距离信息的捕获相辅相成。

##### LanczosNet 总体框架

LanczosNet 将长距离信息的谱滤波器与短距离信息的空间卷积相结合，其总体框架为：

其中， 表示第 层的节点特征表示， 是线性变换矩阵，用于特征融合。

这一框架通过将谱域和空间域的信息有机结合，不仅提高了模型的计算效率，还显著增强了对多尺度图信息的表达能力。LanczosNet 的一个关键特点在于其设计能够直接将特征值作为输入，并输出长距离图滤波器。通过利用特征值和特征向量之间的对应关系，模型学习到对节点排列和特征向量模糊性的鲁棒表示。这种通过参数化特征值设计图滤波器的方法最早由 Defferrard 等人提出，并在 LanczosNet 中得到了进一步发展。LanczosNet 的谱卷积方式使其在捕获图的长距离依赖关系时具有更高的效率，同时保证模型能够适用于大规模图任务。

总的来说，LanczosNet 在效率与表达能力之间取得了良好的平衡，为基于图谱方法的图神经网络研究提供了重要的技术创新。

#### 3、SpecFormer

大多数现有的谱滤波器本质上是标量到标量（scalar-to-scalar）的函数，即对每个特征值单独应用相同的滤波器。这种机制忽略了特征值集合中蕴含的全局谱信息，例如特征值的代数重数可以揭示图的连通分量数量等关键信息，而这些信息在标量到标量的过滤机制中无法捕获。

为了捕捉频率的大小和相对频率，SpecFormer提出了一种基于 Transformer 的集合到集合（set-to-set）的谱域滤波器。具体来说，Specformer 通过特征值编码来表示特征值的幅值信息，然后利用自注意力机制从特征值集合中学习相对信息，即特征值之间的依赖关系。

##### 特征值编码

为了有效利用特征值的绝对大小和相对差异进行谱滤波，Specformer 引入了一种新颖的特征值编码机制。这一机制解决了直接使用标量特征值计算 Transformer 注意力矩阵时表现能力受限的问题。Specformer 不再将特征值简单视为标量，而是通过映射将每个特征值转换为有意义的向量表示，从而更好地利用图拉普拉斯矩阵的谱信息。特征值编码函数定义为：

其中， 是表示的维度， 是一个超参数， 是向量的维度。该编码函数的优势有三个方面：（1）能够捕捉特征值的相对频率偏移，并提供高维向量表示。（2）它的波长范围从 到 ，形成了特征值的多尺度表示。（3）通过调整超参数 ，可以控制特征值 的影响程度。

尽管该特征值编码函数与 Transformer 中的位置编码（Positional Encoding）函数形式相似，都是通过一系列的正余弦函数来近似，但两者的作用有显著不同。位置编码描述了空间域中离散位置的信息，而特征值编码则表示了频谱域中连续的特征值信息。将位置编码应用于特征值的空间位置（即索引）将破坏其置换不变性。

将特征值和它们的编码的拼接起来，然后使用标准的 Transformer 层来学习特征值之间的依赖关系。

通过堆叠多个 Transformer 块，Specformer 获得了具有强大表示能力的频谱表示机制，能够有效地捕获特征值的大小和相对依赖性，并执行非局部图卷积。在合成数据集和真实数据集的实验中，Specformer 通过捕获特征值之间的依赖关系，能够学习出更好的滤波器，其性能优于多种传统图神经网络。

### 基于谱图位置编码的图神经网络

##### 位置编码

位置编码（Positional Encoding, PE） 是提升图神经网络表达能力的关键技术之一，尤其在Graph Transformers（GTs）和消息传递网络（MPNNs）中具有重要作用。

在传统Transformer中，输入通常包括词元序列和对应的位置信息，其中位置编码用于明确词元在序列中的相对或绝对位置。对于图数据，节点特征可以自然地对应于Transformer中的词元序列。但是，由于图结构往往是不规则的，并且图上没有标准的坐标系，因此节点的位置信息难以直接获得。

传统的消息传递网络（MPNNs）依赖于简单的邻域特征聚合操作（如求和或平均），在捕捉图结构中的细粒度差异方面存在局限性。这种设计使得MPNNs的表达能力受限，仅能区分通过1WL测试可区分的图，对于具有相同局部邻域统计特性的异构图，则难以有效区分。此外，MPNN在建模全局拓扑模式方面也存在不足，进一步限制了其在复杂图关系和高阶结构学习中的表现。位置编码通过为节点提供额外的全局或相对位置信息，弥补了MPNNs在全局信息捕捉和细粒度表达上的缺陷，不仅增强了模型的表达能力，还显著提升了对复杂图结构的建模效果，使其在许多图学习任务中表现更加优异。

##### 谱图位置编码

特征向量不仅能够作为图拉普拉斯矩阵的基底，还蕴含了丰富的图结构信息，能够捕捉节点间的关系和拓扑结构。基于这一特性，谱图位置编码（Spectral Graph Positional Encoding）利用图的特征向量对节点的全局位置和距离信息进行编码，从而增强图神经网络的表达能力。这种编码方法不仅可以帮助模型理解图的几何结构，还能够有效地弥补传统消息传递机制在全局信息建模方面的不足，为复杂图任务提供更强的支持。

#### 一、基础谱图位置编码

在传统的Transformer模型中，绝对位置编码（Absolute Positional Encoding, APE）用于为词元序列引入位置信息，使模型能够感知序列数据的结构。在自然语言处理中，APE通常基于词元的顺序（）计算，例如使用以下公式：

其中， 表示词元在序列中的位置， 是编码的维度。

然而，图数据具有不规则的拓扑结构，节点之间并没有固定的序列顺序，因此无法直接使用传统的APE方法为节点提供位置信息。

Dwivedi 等（2020）提出通过预计算图的拉普拉斯特征向量，选取前 个最小的非平凡特征向量（即不包括对应于零特征值的常量特征向量）作为节点的位置编码，称为拉普拉斯位置编码（Laplacian Positional Encoding，LPE）。每个节点 的位置编码表示为：

其中 是节点 在第 个特征向量上的分量。

这种编码方法能够有效地捕捉图的局部和全局结构信息。首先，拉普拉斯位置编码具有良好的距离感知能力。由于拉普拉斯特征向量反映了图中的频谱特性，相邻节点在特征向量空间中的编码相似性较高，而远距离节点的编码差异显著。这种特性帮助模型在学习过程中更加准确地捕捉图中的局部依赖和全局拓扑关系。其次，拉普拉斯位置编码是一种广义的位置编码方法。相比于Transformer中正弦位置编码的序列形式，LPE将位置编码的概念自然地推广到了图数据中，能够适应图的非规则拓扑结构，为节点提供结构化的位置信息，从而增强模型对图谱特性的表达能力。

然而，由于特征向量的符号具有任意性，这可能导致模型在训练过程中出现不稳定性。为了应对这一问题，Dwivedi 等提出了一种简单而有效的解决方案：在训练过程中随机翻转特征向量的符号，以确保模型对符号的不确定性具有鲁棒性。这一设计使得LPE能够在复杂的图学习任务中表现出色，同时保持模型的稳定性。

#### 二、谱注意力网络

直接使用图的特征向量作为位置编码虽然在捕捉节点间的全局拓扑结构和距离信息方面表现出一定的优势，但仍存在多个不足之处。特征向量的符号不确定性是一个主要问题，由于特征向量可以任意取正或负符号，这可能导致模型在训练过程中表现出不稳定性。此外，当特征值具有较高的重数时，相应的特征向量空间维度增加，难以选择唯一的特征向量组合进行编码，导致模型在使用这些特征向量时可能丢失信息。

为了解决这些问题，谱注意力网络（Spectral Attention Network, SAN）在特征向量的基础上引入了一种可学习的位置编码机制（Learnable Positional Encoding, LPE）。相比直接使用特征向量，SAN 的方法能够充分利用图的拉普拉斯频谱，通过学习的方式解决符号不确定性以及多重特征值的选择问题。具体而言，SAN 通过在预计算的特征向量和特征值之上构建一个 Transformer 编码器，生成固定大小的节点嵌入向量，从而实现对频谱的全局建模。这种方法不仅能够捕捉图的全局和局部特性，还具备处理复杂图学习任务的能力。

##### LPE 的绝对位置编码

给定图的拉普拉斯矩阵 ，首先计算其前 个最小的非平凡特征值 以及对应的特征向量 ，其中 是一个超参数，表示用于计算的特征向量数量。为了捕捉整个数据集中所有图的频谱信息，可以选择 为数据集中图的最大节点数。对每个节点 ，初始位置编码矩阵定义为：

其中 表示特征向量 在节点 上的值， 是对应的特征值。这种方法通过将特征值和特征向量结合，捕捉节点在频谱空间中的位置信息，能够很好地反映节点的局部和全局结构特性。

**学习固定维度的位置编码。**由于不同图的节点数可能不同，直接使用上述矩阵表示位置编码会导致维度不一致。SAN 通过一个线性变换将初始位置编码 投影到固定的维度 ，统一节点表示的大小：

其中， 和 是可学习的参数。通过这种方式，位置编码不仅具有固定维度，便于与节点特征结合，还能通过参数化学习进一步优化位置表示。

**自注意力机制生成节点嵌入。**在生成固定维度位置编码后，SAN 利用 Transformer 编码器对节点的频谱特征进行处理。首先将节点的 LPE 作为输入，构建长度为 ，中间维度为 的序列，并通过 Transformer 的自注意力机制计算频率之间的交互关系。最终通过一个求和池化操作，将序列压缩为固定大小为 的节点嵌入。这一步进一步整合了特征值与特征向量的信息，为每个节点生成一个位置编码。

由于拉普拉斯特征向量的符号具有任意性，这可能导致模型在训练过程中表现不稳定。为了解决这一问题，SAN 在训练过程中同样随机翻转特征向量的符号，从而使模型对符号变化具有鲁棒性。

|  |
| --- |
|  |

SAN模型架构

##### LPE 的相对位置编码

给定一对节点 ，假设节点 和 在第 个特征向量 上的分量分别为 和 。RPE 通过以下两个算子生成符号不变的边特征：

这种构造方式确保了特征向量的符号对结果不产生影响，同时保留了节点间的相对关系，捕捉了频谱特性中关键的相对信息。相比于绝对位置编码，相对位置编码更关注节点对之间的相对关系。这种方法能够消除特征向量符号的对称性，使模型对符号变化具有鲁棒性，强调的是节点间的相对频率信息，而非单一节点的绝对频率值，并且提供了一种更灵活的机制，能够通过学习选择更相关的频率，从而避免低频信息的偏置。

尽管该方法在理论上具有显著优势，但在计算复杂度和内存需求方面存在瓶颈。对于完全连接的图，其边的数量是节点数 的平方，因此计算复杂度为 ，若考虑所有特征向量，则复杂度可达 。这种高昂的计算代价对大规模图的应用构成了主要限制，同时也影响了批量训练的内存需求。

SAN 中的 LPE 设计克服了传统位置编码的局限性，通过将特征值与特征向量结合，显著提升了位置编码的表达能力。LPE 不仅能够捕捉图的局部和全局特性，还通过自注意力机制灵活处理频谱特征之间的关系。与节点特征结合后，LPE 为 Graph Transformer 提供了更强的建模能力，在图分类、节点分类等任务中表现出色。

#### 三、符号与基不变的谱图位置编码

尽管拉普拉斯特征向量作为位置编码已被广泛应用，但特征向量的对称性问题对模型的稳定性和表达能力构成了显著挑战。这些对称性主要包括以下两类：（1）符号对称性，即对于特征向量，其符号取反的向量同样是特征向量；（2）基对称性，即对于高维特征空间存在无限多种特征向量基底的选择。这些对称性可能导致现有模型在处理特征向量时缺乏一致性和鲁棒性，从而限制其对复杂图结构的表达能力。

针对这些问题，本文提出了两种新的神经网络架构：SignNet 和 BasisNet，这些架构专为满足上述对称性而设计，确保了模型在处理特征向量时的符号不变性和基不变性。相比现有的谱图位置编码方法，SignNet 和 BasisNet 不仅能够包含它们作为特例，还具备更高的表达能力。

##### SignNet，解决符号对称性

**符号不变性。**对于特征值不同的每个特征向量 ，其符号可以任意取正或负，因为 同样是该特征值对应的特征向量。因此，定义在特征向量集合上的任意函数 都应满足符号不变性，即对于任意的符号选择 ，函数 应具有以下性质：

该性质确保了函数 对特征向量符号的选择具有鲁棒性。

在处理特征向量的符号不确定性时，SignNet 利用了对称性函数的性质。具体来说，对于任意一个特征向量 ，构造一个对符号翻转不变的函数形式：

其中 是一个任意可微的连续函数，可以由一个神经网络（如多层感知机，MLP）参数化。这种形式确保了无论输入是 还是 ，输出 都保持一致，从而实现了符号不变性。

为了将 SignNet 扩展到多个特征向量的场景，网络采用以下形式：

其中， 和 是任意的神经网络； 表示向量的级联操作。通过引入 的形式，SignNet 确保了对每个特征向量符号翻转的鲁棒性，从而满足符号不变性。

为了进一步实现符号不变性和置换等变性，SignNet 将 和 限制为置换等变网络，例如元素级多层感知机，DeepSets，Transformers和图神经网络等。

为了增强 SignNet 的表达能力，可以将特征值 和节点特征矩阵 共同输入模型：

##### BasisNet，解决基对称性

当某些特征值具有高重数时，特征值的特征子空间维度将高于1。在这种情况下，与该特征值对应的特征向量存在无限多种正交基的选择，并不唯一。

**基不变性。**假设特征子空间的正交基为 ，其可以通过与正交矩阵 的乘积生成新的正交基，其中 是 维正交群。任何定义在特征向量上的函数 应满足以下基不变性：

该性质表明函数 对每个特征子空间的基选择具有鲁棒性。符号不变性是基不变性的一个特例。当所有特征值均为不同值时，特征子空间的维度 ，此时正交群 为符号对称性 。

为了实现对特征子空间基选择的鲁棒性和不变性，BasisNet 专门设计了一种网络结构，能够捕捉特征子空间的对称性，同时高效地处理拉普拉斯特征向量的基不确定性。设每个特征子空间的正交基为 ，其维度为 ，且满足 。BasisNet 的参数化形式定义为：

其中， 是一个作用于维度为 的特征子空间的神经网络，相同维度的特征子空间，共享参数 ， 是一个作用于所有特征子空间的聚合神经网络，用于整合子空间的信息。

对于不同图，其特征子空间的数量 可能有所不同。为了解决这一问题，BasisNet 提供了两种解决方案。第一种是使用零填充来统一特征子空间数量，从而适配固定维度的网络结构。第二种是采用序列模型来处理可变长度的特征子空间序列，从而实现灵活的适配。

为了确保 BasisNet 的置换等变性， 被指定为置换等变网络，例如 DeepSets、Transformers 或图神经网络等。同时， 被约束为从矩阵到向量映射的置换等变网络。

SignNet 和 BasisNet 分别解决了符号和基的对称性问题，显著提升了拉普拉斯特征在图位置编码中的适用性，能够统一现有的多种位置编码方法，同时扩展了谱图方法的表达能力。

#### 四、稳定的谱图位置编码

尽管拉普拉斯特征向量作为位置编码已被广泛应用，其方法仍面临两大核心挑战。首先是上述小节重点关注的特征向量的对称问题：同一个拉普拉斯矩阵可能存在多种不同的特征分解形式，这会导致生成的特征向量不一致，从而使位置编码缺乏鲁棒性。其次是不稳定性问题：图的拉普拉斯矩阵对微小扰动极为敏感，可能引发特征子空间的剧烈变化，进而导致位置编码的不确定性。这种不稳定性使得现有方法在处理未知或分布外（OOD）图结构时表现出较差的泛化能力。

尽管已有研究尝试解决特征向量的对称性约束，但大多数方法忽略了不稳定性问题的影响，从而限制了模型的广泛适用性。通过深入分析，研究发现不稳定性的根本原因在于对特征子空间进行的“硬划分”（Hard Partition），即对特征空间采用严格固定的划分策略。这种划分方式在特征子空间受到扰动时无法保持一致性，进而降低了模型的鲁棒性和泛化能力。

基于上述挑战，作者提出了一种稳定且表达能力强大的位置编码（Stable and Expressive Positional Encodings, SPE）。该方法利用特征值对特征子空间进行“软划分”（Soft Partition），有效地缓解了硬划分带来的不稳定性问题。

为解决上述问题，SPE 通过“软分区”（soft partitioning）方法实现了稳定性和表达力的统一。其设计包括以下核心步骤：

##### 位置编码的稳定性

在图学习任务中，位置编码的稳定性是模型泛化能力的关键因素之一。直观上，稳定性意味着输入的微小扰动仅会引起输出的微小变化。对于基于特征向量的位置编码方法而言，这种扰动表现为拉普拉斯矩阵的微小变化，并应仅导致节点级位置编码的细微改变。

给定位置编码方法，其中输入为特征值和特征向量，输出为节点的位置编码矩阵。位置编码的稳定性定义如下：如果存在常数 ，对于任意拉普拉斯矩阵 和 ，满足以下不等式：

其中， 表示矩阵的 Frobenius 范数， 是最优排列矩阵，用于匹配 和 对应的特征向量，即，其中 表示所有可能的 -阶排列矩阵。

该定义基于广义的稳定性概念，借助 Hölder 连续性描述了位置编码方法的稳定性行为，其中 是 Hölder 连续性参数。当 时，该定义退化为更为常见的 Lipschitz 连续性，这种形式强调了输入扰动和输出变化之间的线性关系。而在更广泛的情况下， 的值可以为其他正数，捕捉更复杂的稳定性特性。

##### 稳定的位置编码（SPE）

SPE 的核心思想是避免对特征子空间的“硬划分”，相反通过特征值对特征子空间进行“软划分”，以缓解拉普拉斯矩阵扰动时模型的不稳定性。

当两个特征值接近或相等（即特征值存在多重性）时，特征子空间可能发生显著变化，例如特征向量的顺序交换或基向量彻底改变，这种现象会导致输出的位置编码出现显著波动。SPE 通过以特征值为权重对特征向量进行加权求和，确保即使特征值接近或相等，模型输出也能保持稳定，从而提高鲁棒性。SPE 的位置编码形式如下：

其中， 是前 个最小特征值对应的特征向量， 是 个最小特征值， 是超参数，表示软划分的数量， 是置换等变神经网络（例如逐元素 MLP、Deep Sets 等）， 是作用于 的聚合函数，同样是置换等变网络。

尽管公式中的 看起来类似于谱图卷积的形式，但它并未用于卷积操作。SPE 将这一结果用作位置编码，而非通过 处理节点属性。

若令 ，（是第小的特征值)，上述公式则变为硬划分，完全分离特征子空间。为保证稳定性，SPE 对 施加连续性约束，使其能够执行连续的软划分操作。

此外，作者进行了理论分析，证明当和满足特定的连续性时，SPE 能够保证位置编码方法的稳定性。

### 谱图对比学习

图对比学习通过对比正样本和负样本的差异，在无监督的情况下学习图或节点的有效表示。通常，图对比学习会针对图数据的特性设计特定的增强策略，用于生成正视图和负视图。早期方法主要在空域中对图结构进行扰动，例如随机删除节点、边，或者对抗性地改变图结构。然而，这些空间扰动策略可能忽略了图数据的频谱特性，难以充分保留图的全局和局部信息。

为了解决这一问题，谱图对比学习提出了一种新的增强方式，通过在谱域中操作图的频谱特性生成增强数据。具体而言，这种方法在图的拉普拉斯频谱上进行扰动，以捕捉图的结构特性和频域信息，从而更好地生成与原始图相似但有一定差异的视图。这种基于谱域的增强方式为图对比学习提供了新的思路，有助于更充分地挖掘图数据中的结构信息，提高模型对下游任务的适应能力。

#### 一、基于谱图理论的图对比学习

图对比学习（GCL）是一种通过增强图数据学习节点表示的自监督学习方法，近年来受到了广泛关注。尽管现有研究提出了多种图增强策略，但仍存在一些关键的未解问题：GCL 方法本质上编码了哪些信息？不同的图增强策略背后是否存在通用规则？如果存在，这些规则又能提供哪些启示？

从谱图的视角重新审视了 GCL，通过在频谱域中的实验研究，揭示了 GCL 的基本工作原理。研究发现，图对比学习的核心遵循一个通用的图增强规则（General grAph augMEntation，GAME），即两张增强图的高频部分差异应显著大于低频部分的差异。该规则不仅为重新理解当前图增强方法提供了理论支持，也为设计新的有效增强策略带来了启发。

此外，作者从理论上证明了 GCL 可以通过对比学习的方式捕获不变信息，并结合 GAME 规则首次揭示了 GCL 所学习到的表示本质上编码了图的低频信息。这一发现解释了为何 GCL 在各种任务中表现出色，并为改进现有方法提供了新的思路。基于理论分析，作者进一步提出了一个谱图对比学习模块（Spectral Graph Contrastive Learning Module, SpCo1），这是一个通用且易于集成的插件模块。

#### 从谱图视角重新审视GCL的通用图增强规则

**探索实验。**为了探索GCL中增强策略的内在机制，作者从谱域视角设计了一系列实验，系统分析了不同频率信息对图对比学习效果的影响。

实验的核心在于生成不同的增强图视图，并通过其与原始邻接矩阵的对比学习来探索频率信息在 GCL 中的作用。具体来说，首先对原始图的拉普拉斯矩阵进行特征值分解，特征值按照大小排序后，可以将频谱划分为低频部分和高频部分。对于低频增强，保留高频部分，并从最低频逐步加入低频部分的特征空间，加入比例依次为。类似地，高频增强的视图在低频部分上保持不变，而逐步增加高频部分的特征空间。实验使用共享的单层 GCN 编码器对节点表示进行计算，并通过最小化 InfoNCE 损失优化模型。

|  |
| --- |
|  |

GCL的框架，与最佳对比对的定义

实验结果表明，在生成的增强视图中，当保留最低频部分时，模型性能最佳；而当引入更多高频分量时，模型性能显著提升。此外，从原始图和增强图的图频谱对比可以观察到，当仅保留低频部分时，和在低频部分的振幅差异较小；当引入更多高频分量时，和在高频部分的频谱差异显著增大。

**GAME规则。**基于实验结果，作者提出了一个通用的图增强规则（GAME规则）： 给定两张增强图和，其图频谱分别为和。若满足如下条件：

则和为一对有效的图增强对，称为**最优对比对**（Optimal Contrastive Pair）。

**对比不变性定理。**基于上述 GAME 规则，作者进一步从理论上探讨了 GCL 如何通过对比学习机制捕获频谱域中的不变信息，提出了一个对比不变性定理，明确了GCL如何在频谱域中实现不变性。

具体而言，假设给定一个原始图的邻接矩阵 和生成的增强图 ，其在第 个频率上的振幅分别为 和 。在优化 InfoNCE 损失 的过程中，损失函数的上界可以表示为：

其中， 是第 项的自适应权重。

该定理表明，优化 InfoNCE 损失的目标等价于最大化其上界。在此过程中，较大的 会分配给使 较小的频率项，即使得 。换言之，在第 个频率下，GCL 会倾向于学习增强视图之间的共同不变性信息。如果 ，则这两张增强视图在第 个频率上被认为具有不变性。

#### 谱图对比学习框架（SpCo）

基于GAME规则，作者对图对比学习作出了改进，其主要目标是学习一种通用且适用于GCL的变换，从邻接矩阵生成新的增强矩阵（或），要求和构成一对最优对比图对。随后，将它们输入现有的GCL方法，即采用中的相同增强策略生成和，并使用相应的对比损失进行训练，如图[1.4](#fig:GCL)所示。

可以分解为，其中和分别表示新增边和删除边的集合。根据原文附录A.2中的理论推导，的优化目标函数被定义为（的计算同理）：

其中包含以下三部分：

（1）匹配项（Matching Term）。目标是最大化，从而使与相匹配。其中，。

（2）熵正则化项（Entropy Regularization）。该项旨在增加的不确定性，从而鼓励更多边参与优化。其中，。

（3）拉格朗日约束条件（Lagrange Constraint Conditions）。该项将的行和列和限制在一定范围内。其中是拉格朗日乘子，是分布向量。

#### 二、最大化频谱变化的图增强技术

图对比学习的性能在很大程度上依赖于图增强策略，而现有方法通常在空间域中以均匀随机的方式执行拓扑增强，忽视了这种操作在频谱域中对图内在结构属性的影响。这一局限性导致目前的增强策略缺乏理论指导，并可能错失对图不变性的重要刻画。

为此，从频谱视角重新审视了图拓扑增强策略，提出了一种基于频谱增强的图拓扑增强方法。通过最大化频谱变化，频谱增强可以有效指导拓扑增强策略，捕获图中蕴含的内在不变性。这种方法为拓扑增强提供了一个有原则的操作准则，为未来的图对比学习研究提供了重要启发。

#### GCL中的结构不变性问题

**结构不变性。**一个理想的 GCL 编码器应当能够保持结构不变性（Structural Invariance），即当输入图进行一定边数的扰动后，编码器输出保持不变。具体而言，结构不变性可以通过以下公式进行定义：

$$\mathcal{L}\_{\text{GCL}}(A, t(A), \Theta) \leq \sigma, \text{s.t. } t(A) = \argmax\_{\|A - t(A)\|\_1 \leq \epsilon} D(p(A), p(t(A))),$$

其中， 是一个度量图结构属性的距离函数， 是一个关于图结构属性的向量值函数，例如图的直径、连通性、聚类系数等。

要实现结构不变性，GCL 的有效增强应当集中在对图结构属性影响显著的边上。通过最小化对比损失 ，扰动导致结构不稳定的边会被视为噪声，编码器将忽略与这些边相关的信息。

然而，捕获结构不变性要求拓扑增强能够识别边对图结构属性的敏感性，而现有的均匀随机边扰动方法无法实现这一目标。这一差异表明当前方法存在改进空间，同时也激发了本文对改进拓扑增强策略的探索。

**谱不变性。**直接捕获 GCL 的结构不变性是一个不简单的任务，因为这需要同时表征多个结构属性。由于图的频谱能够综合性地总结许多图的结构属性，例如聚类性、连通性等，作者利用图频谱作为分析图结构属性的“桥梁”，提出一种称为谱不变性的代理指标来表征结构不变性。

谱不变性要求当扰动边导致图频谱发生较大变化时，编码器的输出仍需保持相似。谱不变性定义为：

$$\mathcal{L}\_{\text{GCL}}(A, t(A), \Theta) \leq \sigma, \quad \text{s.t. } t(A) = \argmax\_{\|A - t(A)\|\_1 \leq \epsilon} D(\text{eig}(\text{Lap}(A)), \text{eig}(\text{Lap}(t(A)))),$$

其中，两个图结构之间的距离以其图频谱来度量。一个有效的拓扑增强方法应更多关注那些对图频谱引入较大扰动的敏感边，而对比学习应当消除这些边的影响。与基于簇的启发式增强方法不同，该目标是通过直接最大化谱变化来设计一种基于原则的增强策略。

#### 谱增强（SPAN）

作者提出了一种基于谱图增强（SPectral AugmentatioN，SPAN）的图拓扑增强方法，用于在图对比学习（GCL）中保持谱不变性。SPAN 首先定义了一种基于伯努利分布的边扰动拓扑增强方案，并在此基础上将增强原则形式化为一个谱变化最大化问题。

**基于边扰动的拓扑增强方案。**SPAN 将拓扑增强 定义为一个基于每个邻接矩阵项 的伯努利分布 ，所有伯努利参数构成一个概率矩阵 。接着可以从中采样一个边扰动矩阵 ，其中 表示是否翻转节点 和节点 之间的边。如果 ，则翻转该边；否则，边保持不变。一个增强图的采样结果可通过以下公式获得：

其中， 是邻接矩阵 的补矩阵，计算公式为 ，其中 表示无自环的完全图。因此， 表示每对节点间合法的边添加或移除操作：如果 ，则允许在节点 和节点 之间添加边；如果 ，则允许移除边。通过对 的哈达玛积操作，最终获得对图的有效边扰动。

由于 是一个遵循伯努利分布的随机变量矩阵，式（[[eq:zengqiangtu]](#eq:zengqiangtu)）中采样增强图的期望值为：

因此， 的设计决定了拓扑增强方案。例如，对于均匀随机移除边的情形，当 时， 设置为一个固定的丢弃比率；否则 。

**谱变化最大化。**针对传统均匀扰动中固定设置 的方法，作者提出通过图谱指导优化 ，以实现谱变化最大化。

具体而言，其目标是搜索一个在期望意义上最大化原始图和增强图之间谱差异的 。需要注意的是，虽然扰动是从 所对应的伯努利分布中采样得到的，但 的所有边权参数是联合优化的。设 的归一化拉普拉斯矩阵为 ，其图频谱可以通过 计算得到。在单一增强分支中搜索最优的目标公式形式化如下：

其中 ， 控制扰动强度。通过求解公式（[[eq:danyizengqiang]](#eq:danyizengqiang)），可以获得最优的伯努利概率矩阵 ，从中可以采样出增强视图，这些视图在期望意义上与原始图在图谱上的差异最大化。

公式（[[eq:danyizengqiang]](#eq:danyizengqiang)）仅生成单一增强视图，为了进一步引入双支增强框架的灵活性，并扩大生成的两视图之间的谱差异，公式（[[eq:danyizengqiang]](#eq:danyizengqiang)）可扩展为：

其中 是增强分支 的伯努利概率矩阵。需要注意的是，当设置 时，公式（[[eq:shuangzhi]](#eq:shuangzhi)）是公式（[[eq:danyizengqiang]](#eq:danyizengqiang)）的特例。

虽然公式（[[eq:shuangzhi]](#eq:shuangzhi)）提供了更高的灵活性，但也增加了优化问题的难度。基于三角不等式最大化其下界可得：，这意味着 和 可以沿相反方向独立优化，即一个分支最大化谱范数，另一个分支最小化谱范数，从而得到最终的优化目标：

其中， 是增强方案下的图谱范数度量。

#### 三、基于稳定可扩展频谱编码的图对比学习

传统的 GCL 方法主要在空间域生成图视图，但最近的研究表明，频谱域在补充空间视图方面也起到了至关重要的作用。然而，现有的基于频谱的图视图方法往往忽略了特征向量中蕴含的重要位置信息，在尝试解决频谱特性不稳定性问题时，通常面临着较高的计算复杂度，限制了其实用性。

为了解决这些挑战，作者首先设计了一种信息丰富、稳定且可扩展的频谱编码器，称为EigenMLP，以从频谱特征中学习有效表示，EigenMLP 对特征向量的旋转和反射变换具有不变性，并且对扰动具有鲁棒性。其次，作者提出了一种新的空间-频谱对比框架（SpGCL），通过捕捉图神经网络（GNNs）编码的空间信息与 EigenMLP 学习的频谱信息之间的一致性，有效地融合了这两种图视图。

#### EigenMLP

谱图编码器旨在从频谱特征中学习稳定的表示。一个理想的谱图编码器需要具备以下三个关键属性：(1) 能够同时编码特征值和特征向量的信息，因为这两者分别反映了图的不同结构属性；(2) 能够解决频谱特征中的符号和基对称性问题，从而学习稳定的表示；(3) 能够扩展至大规模图数据，并具有线性或亚线性的时间复杂度。

这些需求对谱图编码器的设计提出了巨大挑战。为此，作者提出了EigenMLP，一种基于MLP的架构，既保证了模型的高效性，又通过创新设计解决了符号和基底不确定性问题。

为了处理符号不确定性问题，作者采用了SignNet的设计，将正负特征向量同时作为输入：

其中， 和 是神经网络， 表示向量的拼接操作， 是符号不变的特征向量。在实际应用中，符号不变的神经网络可能会导致模型收敛速度变慢。在这种情况下，可以采用启发式的方法来确定特征向量的符号。

为了解决基底对称性问题，作者指出，每个特征向量都有对应的特征值，当特征向量的坐标发生旋转时，其特征值的位置也会随之移动。因此，EigenMLP将MLP的权重替换为特征值。通过这种方式，模型对特征向量坐标的旋转保持不变，即。

然而，直接将可学习的权重替换为固定的特征值会限制模型的表达能力。因此，EigenMLP将特征值扩展为高维傅里叶特征（Fourier Features）：

其中， 表示周期， 是一个可学习的矩阵。通过这种方式， 可以看作一种图滤波器，滤波后的特征值对特征向量坐标的旋转保持等变性，从而能够学习强表达力且基底不变的频谱表示：

其中， 表示所有滤波后的特征值。

需要注意的是，可学习矩阵在不同特征值之间共享，因此的大小与特征值的数量无关，而是依赖于周期，从而减少了EigenMLP的参数数量。此外，的设计显著降低了模型的参数规模，同时保证了其高效性和稳定性。

#### 空域-谱域图对比学习框架（SpGCL）

与现有GCL方法通常在单一域中生成图视图不同，SpGCL框架从空间域和频谱域分别建模图的视图，并利用跨域对比来捕获不变信息。

**空间视图（Spatial View）。**空间视图表示节点之间的显式连接关系，记为，其中为邻接矩阵，为节点特征矩阵。通过沿着图的子结构传播节点特征，空间视图能够自然地融合拓扑信息和节点内容信息，从而学习到图的局部平滑表示。

**频谱视图（Spectral View）。**频谱视图反映了节点之间的隐式关系，表示为，其中和分别为图拉普拉斯矩阵的特征值和特征向量。特征值和特征向量编码了图拓扑的几何信息和节点位置，可被视为图的全局结构信息。

**跨域对比学习。**由于图数据具有非欧几里得性质，直接对比空间视图和频谱视图的表示具有一定难度。因此，需要设计适当的编码器分别学习这两种视图的表示。定义空间编码器和频谱编码器，空间表示和频谱表示可表示为：

其中，分别为空间表示矩阵和频谱表示矩阵。

**正负样本对的定义与对比损失。** 对比学习的基本思想是定义正负样本对，从中捕获自监督信号。在SpGCL框架中，将同一节点或图的空间表示和频谱表示视为正样本对，不同节点或图的表示视为负样本对。为此，使用两个投影头将表示投影到对比空间中：

其中为投影后的表示。接着，采用经典的对比目标函数InfoNCE来最大化空间表示和频谱表示之间的一致性：

其中表示余弦相似度，表示节点或图的索引。

SpGCL框架联合空间视图与频谱视图，创新性地提出了跨域对比的思想，为图对比学习提供了一种全新的解决方案。