GCN

理解:

卷积,从应用的角度而言,实际上本质就是一种"加权"求和。

对于欧几里得性质的数据,比如图像,直接求和就可以,~~但对于~~因为形状固定,确卷积核之后参数共享就可以了

但是,对非欧几里得结构数据,这里指的就是图结构数据,无法找到一个在空间结构上的卷积核(类似CNN那种),因为每个顶点的连结情况是不一样的,无法直接滚动得到,除非每个顶点度一样,这是不恰当的。所以必须想办法不在顶点域上卷积(和每个度的degree有关。

因此,想到在谱域上进行,就是将每个顶点的特征从vertex domain转化到spectral domain,这类似于傅利叶空间(将函数以 $e^{-i\omega t}$ 作为基序表示),~~因此就要寻找图上~~的根据卷积定理

$$f * h = F^{-1}(F(f) \cdot F(h))$$

所以我们可以对傅利叶变换后的函数直接加权求和(内积)再逆变换就得到结果

关键在于图上的傅利叶是什么样子的?

其实傅利叶变换本质上就是一种函数的基变换,以 $e^{-i\omega t}$ 作基,$f(t)$ 作参数,求和就是 $F(w)$

所以关键在于找到图上的这组基,既然是基,那么最好是正交基形式

类比 $e^{-i\omega t}$,其是 ∇ 的特征函数,因为

$$\nabla e^{-i\omega t} = \omega^2 e^{-i\omega t}$$

类比至图上,∇ 等同于 $L = D - W$

$$LV = \lambda V$$

∴ 这组我们要找的基就是L的特征向量

并且L是实对称阵,那么必有n个线性无关而两两正交的特征向量 $U = (u_1, u_2 \dots u_n)$

由此我们定义图上的傅利叶变换

$$\hat{f} = U^T f$$

(积分在离散情况下就是求和对应)

$$\hat{f}(\lambda_l) = \sum_{i=1}^{N} f(i) u_l^*(i)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{f}(\lambda_1) \\ \vdots \\ \hat{f}(\lambda_N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1(1) & \cdots & u_1(N) \\ \vdots & & \vdots \\ u_N(1) & \cdots & u_N(N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(1) \\ \vdots \\ f(N) \end{pmatrix}$$

∴ 先变换至谱域卷积核h

$$h * f = U\left((U^T h) \odot (U^T f)\right) = U \,\mathrm{diag}(\hat{h}(\lambda_l)) U^T f$$

1) $y = \sigma(U g_\theta(\Lambda) U^T x)$ $g_\theta(\Lambda)$ 就是 $\mathrm{diag}(\hat{h}(\lambda_l))$

参数没有共享。

2) $y = \sigma(U g_\theta(\Lambda) U^T x)$

$$g_\theta(\Lambda) = \begin{pmatrix} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \lambda_1^j & & \\ & \ddots & \\ & & \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \lambda_n^j \end{pmatrix}$$

$$U \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \Lambda^j U^T = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j U \Lambda^j U^T = \sum_{j=0}^{K} \alpha_j L^j$$

$$\therefore y = \sigma\left(\sum_{j=0}^{K-1} \alpha_j L^j x\right)$$

其中K就是感受野

还有一种 vertex domain

$$y = \sigma(D^{-\frac{1}{2}}(A+I)D^{-\frac{1}{2}} H W)$$

n层就是感受野多大

但参数完全无共享