

# 图神经网络的温和入门

李孙博闻

武汉科技大学  
理学院

冶金工业过程系统科学湖北省重点实验室

2024 年 1 月 18 日



# 前言

尽管图网络具体实现可通过简单调包实现，但在此之前仍然需要了解图的基础知识，掌握“图嵌入”的概念，即如何把数据整理为图网络可以计算的嵌入向量形式，然后才能正确调包。

本幻灯片材料主要参考 Sanchez-Lengeling[1] 等人的论文。

# 目录

- ① 图结构基础
- ② 哪里有图结构?
- ③ 图任务
- ④ 图的构建
- ⑤ 图神经网络
- ⑥ 参考文献

## ① 图结构基础

## ② 哪里有图结构?

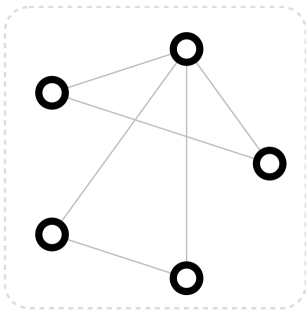
## ③ 图任务

## ④ 图的构建

## ⑤ 图神经网络

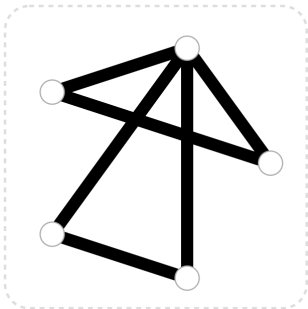
## ⑥ 参考文献

## Vertex, Edge and Global



- V** Vertex (or node) attributes  
e.g., node identity, number of neighbors
- E** Edge (or link) attributes and directions  
e.g., edge identity, edge weight
- U** Global (or master node) attributes  
e.g., number of nodes, longest path

# Vertex, Edge and Global



**V** Vertex (or node) attributes

e.g., node identity, number of neighbors

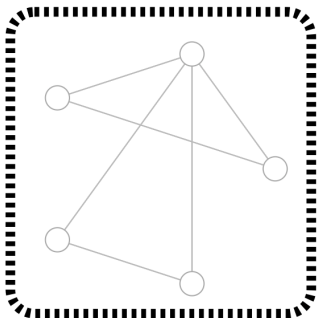
**E** Edge (or link) attributes and directions

e.g., edge identity, edge weight

**U** Global (or master node) attributes

e.g., number of nodes, longest path

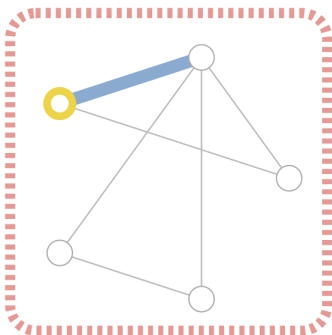
# Vertex, Edge and Global



- V** Vertex (or node) attributes  
e.g., node identity, number of neighbors
- E** Edge (or link) attributes and directions  
e.g., edge identity, edge weight
- U** Global (or master node) attributes  
e.g., number of nodes, longest path

注意全局用 U 而非 G 表示。

# Vertex, Edge and Global



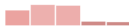
Vertex (or node) embedding



Edge (or link) attributes and embedding



Global (or master node) embedding



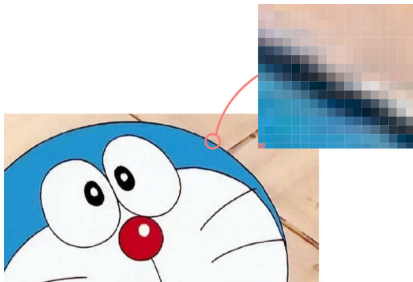
Information in the form of scalars or embeddings can be stored at each graph node (left) or edge (right).

图的三种元素都可以包含嵌入向量，这里嵌入是一维的，可视化呈现。



- 1 图结构基础
- 2 哪里有图结构?
- 3 图任务
- 4 图的构建
- 5 图神经网络
- 6 参考文献

## 从图像到图



**图 1:** 图片是由许多像素点构成的，每个像素点有一个或多个数值，如灰度值或者 RGB 值。

# 从图像到图

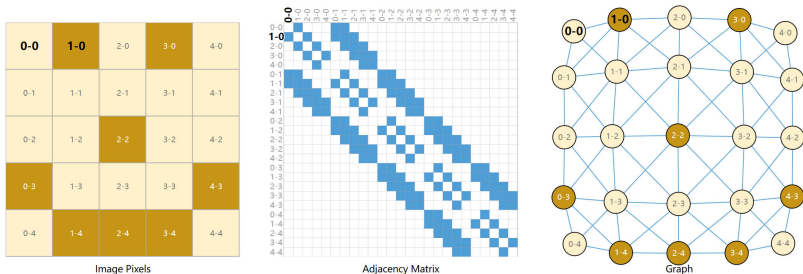


图 2: 左边是图像，中间是邻接矩阵，右边是图。

图像也可以表示为图，一个 5\*5 的图像可以表示为邻接矩阵和图的形式。这里三种不同的表现方法是同一个信息的不同表示方法。

## 句子表示为图

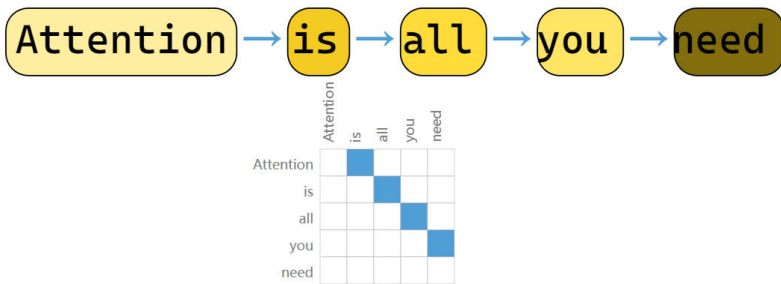


图 3: 语句表现为图的形式。

这里邻接矩阵去掉了对角连接和下三角表示。另外，语句在机器学习中通常不会用图表示，而是通过编码并映射到嵌入向量。

# 分子图

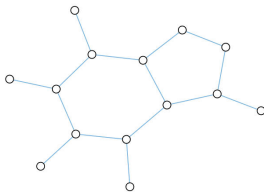
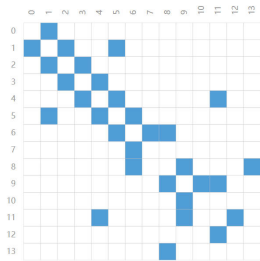
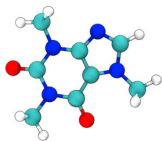


图 4: 分子结构表现为图。

相比于前面的图，分子图更具有异质性。

# 人物关系图

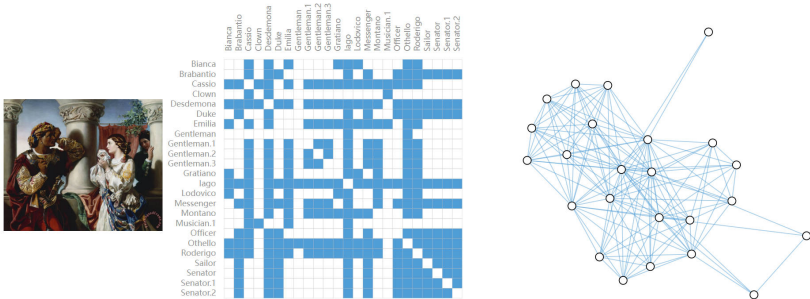


图 5: 人物关系建模为图。

话剧奥赛罗中的人物关系可以建模为图，节点表现为角色，边建模为人物间联系。

# 论文关系图

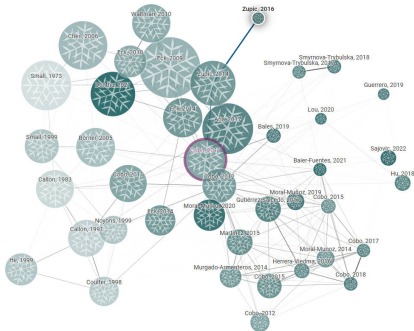
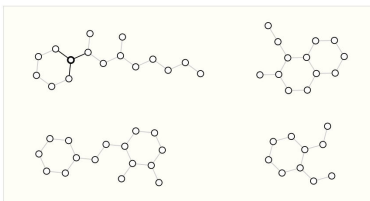


图 6: 文章引用表示为图

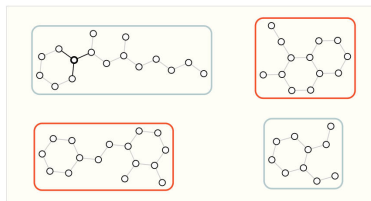
- ① 图结构基础
- ② 哪里有图结构?
- ③ 图任务
- ④ 图的构建
- ⑤ 图神经网络
- ⑥ 参考文献



# 图分类任务



Input: graphs



Output: labels for each graph, (e.g., "does the graph contain two rings?")

图 7: 识别哪些分子有两个苯环

输入多个分子的图信息，输出各个图的类别。

# 点分类任务

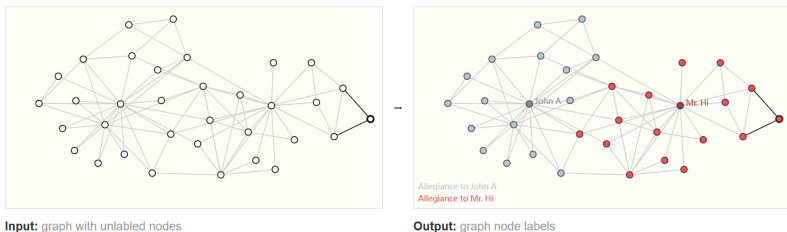


图 8: 识别那些人支持 John H, 哪些人支持 Hi。

输入一个图，输出各个点的类别，这里是二分类。

# 边分类任务

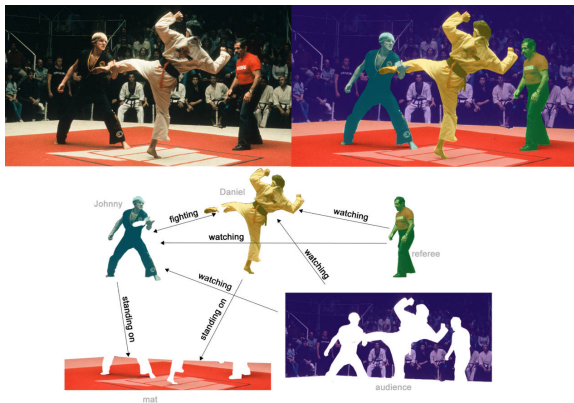


图 9: 先对图片做分割, 然后把被分割的部分作为节点, 识别各个节点之间的关系。对局者站在垫子上, 对局者相互对抗, 裁判和观众观看对抗。

# 边分类任务

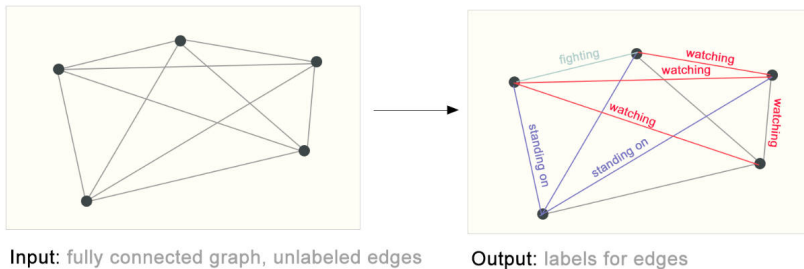
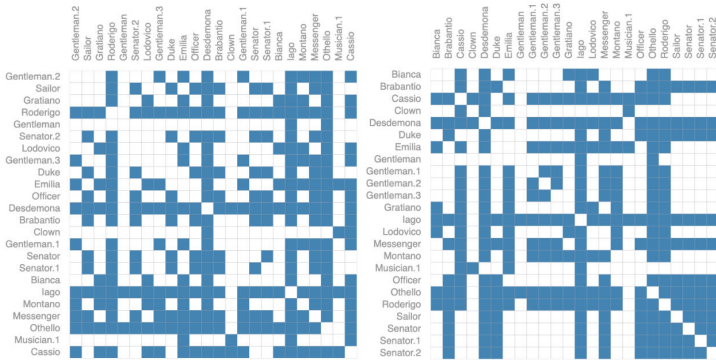


图 10: 图 9 简化图。

- 1 图结构基础
- 2 哪里有图结构?
- 3 图任务
- 4 图的构建**
- 5 图神经网络
- 6 参考文献

## 邻接矩阵不足以表示图信息



Two adjacency matrices representing the same graph.

**图 11:** 邻接矩阵经过初等变换，即行变换或者列变换，其含义并没有改变，但是矩阵特征发生很大改变。

## 邻接矩阵不足以表示图信息

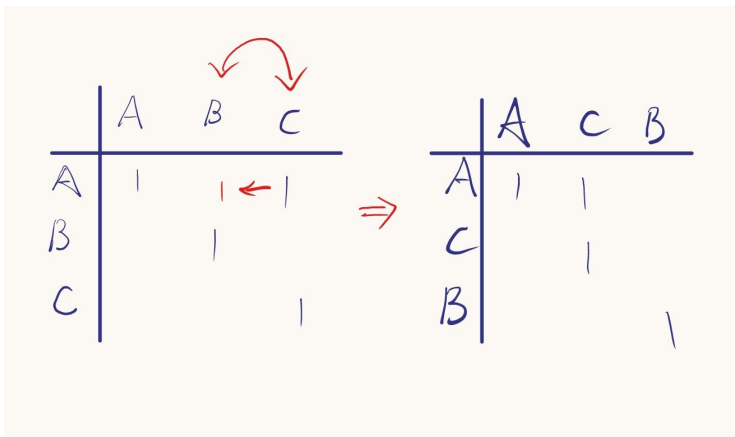
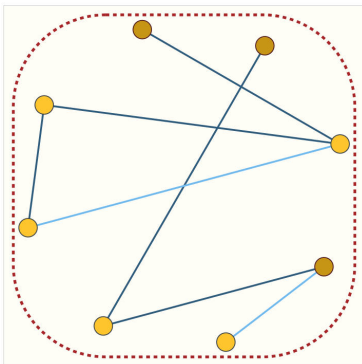


图 12: 简单例子

## 图嵌入



## Nodes

$$[1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0]$$

## Edges

[2, 1, 1, 1, 2, 1, 1]

### Adjacency List

```
[ [1, 0] , [2, 0] , [4, 3] , [6, 2] ,  
  [7, 3] , [7, 4] , [7, 5] ]
```

Global

1

**图 13:** 邻接矩阵无法用于学习，但是图可以转化为嵌入向量形式以用于学习。三个嵌入向量可以准确表示图信息。



# 图嵌入

- 以节点举例，图 12 中一个节点可以表示为 0 和 1 两个数字，实际上也可以表示为任意维度的张量，其他元素同理。

# 图嵌入

- 以节点举例，图 12 中一个节点可以表示为 0 和 1 两个数字，实际上也可以表示为任意维度的张量，其他元素同理。
- 如果一个节点表示一个学生，它的节点可以是包含多个信息的向量，比如【性别、班级、学校】。

# 图嵌入

- 以节点举例，图 12 中一个节点可以表示为 0 和 1 两个数字，实际上也可以表示为任意维度的张量，其他元素同理。
- 如果一个节点表示一个学生，它的节点可以是包含多个信息的向量，比如【性别、班级、学校】。
- 这里的邻接表可以表示为其他不同的形式，以使用的图网络的包的要求为准。

- ① 图结构基础
- ② 哪里有图结构?
- ③ 图任务
- ④ 图的构建
- ⑤ 图神经网络**
- ⑥ 参考文献



- ① 图结构基础
- ② 哪里有图结构?
- ③ 图任务
- ④ 图的构建
- ⑤ 图神经网络
- ⑥ 参考文献

- [1] Benjamin Sanchez-Lengeling, Emily Reif, Adam Pearce, and Alexander B. Wiltschko.  
A gentle introduction to graph neural networks.  
*Distill*, 2021.  
<https://distill.pub/2021/gnn-intro>.

*Thanks!*