

暖夏未眠、

昵称：暖夏未眠、
园龄：1年1个月
粉丝：3
关注：0
+加关注

博客园 首页 新随笔 联系 管理 订阅 XML

随笔- 467 文章- 0 评论- 4

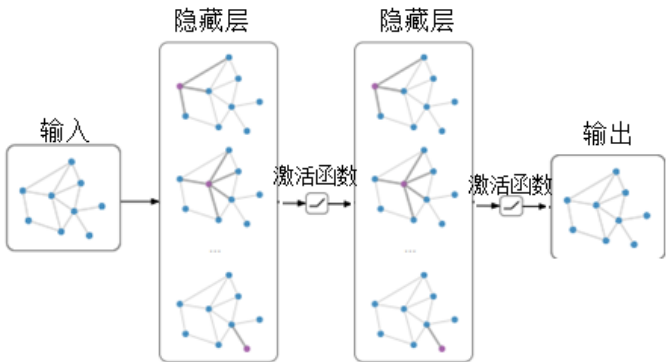
基于图卷积网络的图深度学习

摘要： 处理图结构数据的佼佼者！

更多深度文章，请关注云计算频道：

<https://yq.aliyun.com/cloud>

基于图卷积网络的图深度学习



Thomas Kipf, 6 April 2017
阿姆斯特丹大学



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

先简单回顾一下，深度学习到底干成功了哪些事情！

<	2018年7月						>
日	一	二	三	四	五	六	
24	25	26	27	28	29	30	
1	2	3	4	5	6	7	
8	9	10	11	12	13	14	
15	16	17	18	19	20	21	
22	23	24	25	26	27	28	
29	30	31	1	2	3	4	

搜索

找找看

谷歌搜索

常用链接

我的随笔
我的评论
我的参与
最新评论
我的标签
更多链接

随笔档案

2018年1月 (1)
2017年11月 (5)
2017年10月 (17)
2017年9月 (6)
2017年8月 (16)
2017年7月 (145)
2017年6月 (200)
2017年5月 (77)

最新评论

1. Re:程序员专用表情包_拿走不谢
666
--看起来没睡醒
2. Re:如何修复Kindle频繁自动锁屏和解锁
就说为啥我一出去就会频繁锁屏重开在家就不会有，原来我的包在腿上放着。包扣有磁铁。
--姜小豆

3. Re:程序员专用表情包_拿走不谢666
- 一片番薯
4. Re:为什么程序员适合做自由职业者别出来骗人了，比猪八戒还骗人
- 一个人的黑色的幽默

阅读排行榜

1. 程序员专用表情包_拿走不谢(10922)

2. Linux 之centos7 制作服务自启动systemd(2245)

3. 用“Keras”11行代码构建CNN(1628)

4. Linux 中 7 个判断文件系统类型的方法(1627)

5. BP算法双向传_链式求导最缠绵（深度学习入门系列之八）(1477)

评论排行榜

1. 程序员专用表情包_拿走不谢(2)

2. 如何修复Kindle频繁自动锁屏和解锁(1)

3. 为什么程序员适合做自由职业者(1)

推荐排行榜

1. 程序员专用表情包_拿走不谢(1)

2. 小白学习IOT之模拟设备RRPC命令下发(1)

深度学习成功的故事

ImageNet



利用深层神经网络

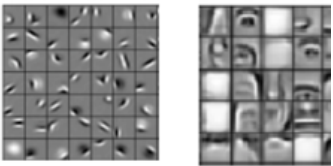
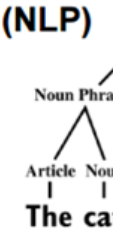
--平移不变性（权重共享）

--分层组合

ImageNet：是一个计算机视觉系统识别项目，是目前世界上图

语音数据

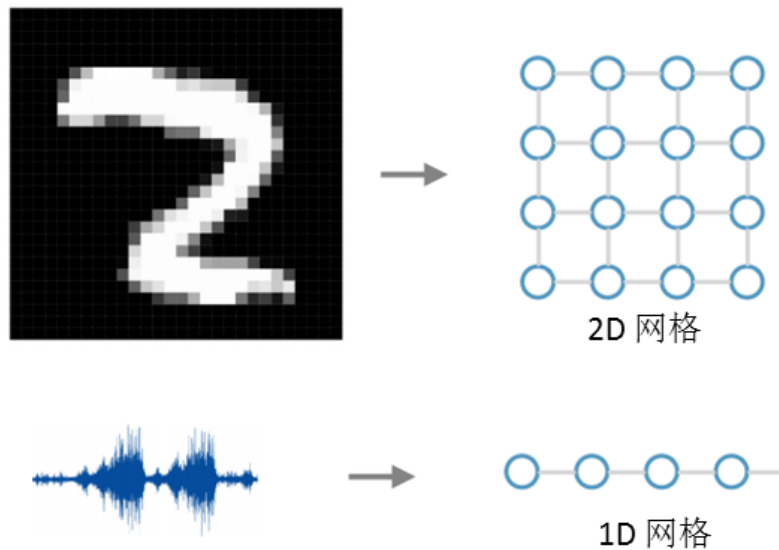
自然语言处理(NLP)



深度学习近些年在语音识别，图片识别，自然语音处理等领域可谓是屡建奇功。ImageNet：是一个计算机视觉系统识别项目，是目前世界上图像识别最大的数据库，并且被业界熟知。我们先回顾一下，没有大数据支撑的欧式深度学习技术。对于一个字母“Z”的识别，我们通常是建立一个2D网格（点阵），如果将其中的点连接起来，定义这样的连接方式所形成的就是“Z”。然后是用其他字母来测试，这个模型的正确性。

回顾：欧氏数据的深度学习

欧几里德数据：网格，序列.....

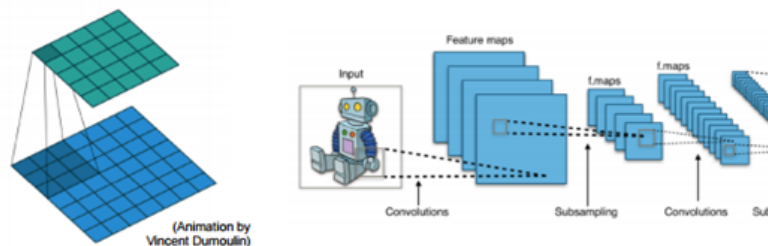


UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

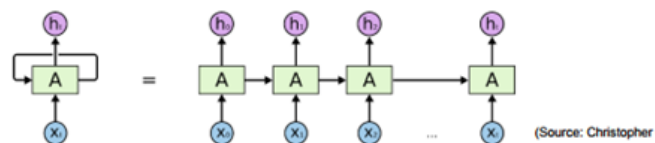
Deep Learning on Graph-Structured Data

回顾：欧氏数据的深度学习

卷积神经网络 (CNN)



递归神经网络 (RNNs)



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

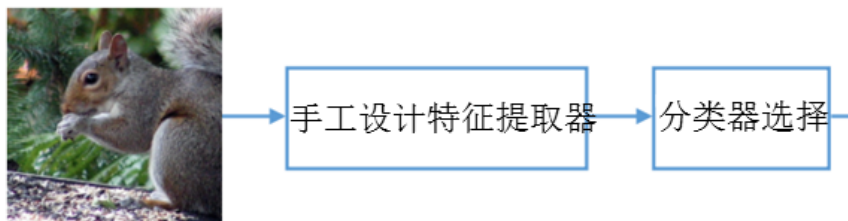
Deep Learning on Graph-Structured Data

传统深度学习的方法，实际上就是一种手工设计特征的过程。而且，在准确率上没有保障。而真正的深度学习，端

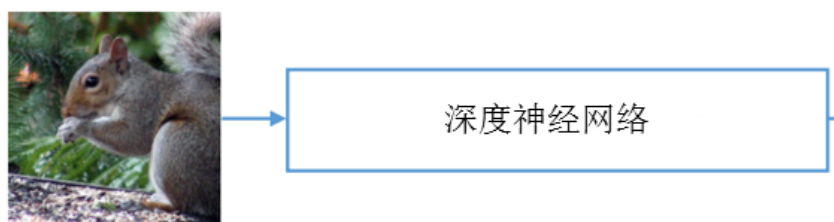
到端的学习，其中的过程到底发生了什么，设计者什么也不知道，自然也不会人为的去干涉。

传统学习与“深度”学习

传统方法



端到端学习

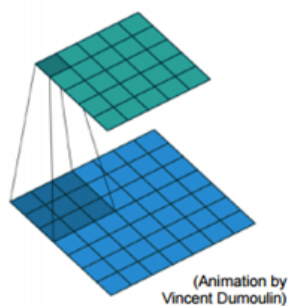


UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

CNNs: 消息传递在网格图

具有3x3过滤器的单神经网络层:



更新一个像素:

· 分别改变信

· 把所有的加

$$\text{完整的更新: } \mathbf{h}_4^{(l+1)} = \sigma \left(\mathbf{W}_0^{(l)} \mathbf{h}_0^{(l)} + \mathbf{W}_1^{(l)} \mathbf{h}_1^{(l)} + \dots \right)$$



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

如果数据不能网格化，那么CNNs就失去了作用。所以，CNNs在一定程度上还是有很多缺陷的。例如图结构数据，如何处理？在现实世界中这样的例子很多很多：社交网络（著名的六度理论），万维网，知识图，等等这些都是图结构，不是网格结构，对于这些我们该怎么解决。

图结构数据

如果我们的数据看起来像这样怎么办？



or this:



现实世界的例子:

- 社交网络
- 万维网
- 蛋白质相互作用网络

- 电信网络
- 知识图
-



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

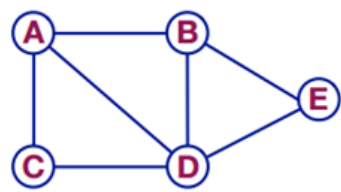
Deep Learning on Graph-Structured Data

云图

图结构的数据

图: $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$

邻接矩阵: A



	A	B	C	D	E
A	0	1	1	1	0
B	1	0	0	1	1
C	1	0	0	1	0
D	1	1	1	0	1
E	0	1	0	1	0

模型的愿望清单:

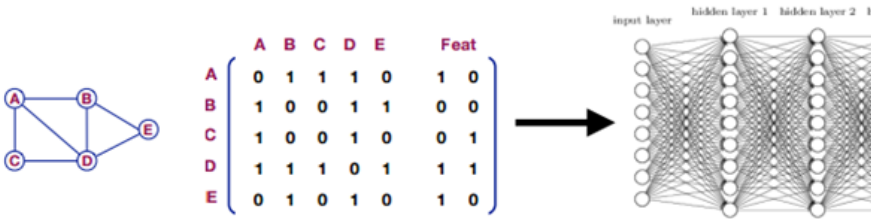
- 在 $\mathcal{O}(|\mathcal{E}|)$ 的时间内可训练
- 即使输入图改变也适用



下面是一个简单的解决图结构数据的方法。

一个简单的方法:

- 求邻接矩阵 A 和特征矩阵 X
- 串连它们 $X_{in} = [A, X]$
- 将它们输入全连接神经网络
- 难道这样就行了?



问题:

- 数量庞大的参数 $\mathcal{O}(N)$
- 重新训练, 如果图形变化



这个方法到底会出现什么样的问题呢？为了解决问题，我们需要什么呢？

问题:

- 数量庞大的参数 $\mathcal{O}(N)$
- 重新训练，如果图形变化

有问题的方法，我们不用！
我们需要分享权重！
➡CNN图或“图卷积网络”（GCNs）



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

先简单介绍一下第一阶消息传递的GCNs，这个理论在2009年就已经被提出来了。

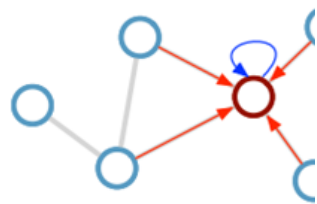
第一阶的消息传递的GCNs

相关理念的首次提出是在Scarselli 等

考虑一下这个无向图:



计算节点更新为红色:



$$\text{更新规则: } \mathbf{h}_i^{(l+1)} = \sigma \left(\mathbf{h}_i^{(l)} \mathbf{W}_0^{(l)} + \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \frac{1}{c_{ij}} \mathbf{h}_j^{(l)} \mathbf{W}_1^{(l)} \right)$$

注: 我们也可以选择简单或更一般的功能在附近的节点



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

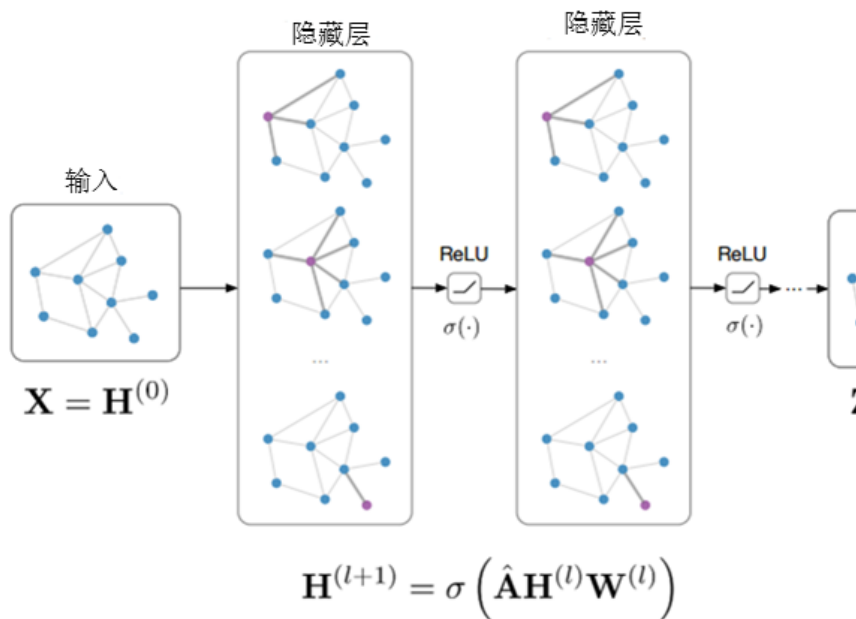
云栖

接下来, 我们了解一下GCN模型架构!

GCN 模型架构

输入: 特征矩阵 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times E}$

预处理的邻接矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

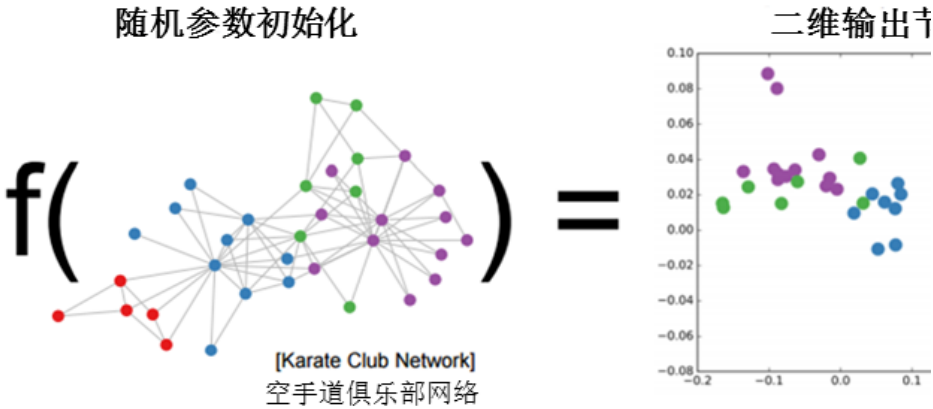
Deep Learning on Graph-Structured Data

云栖

GCN模型架构到底能干什么呢？先举个小栗子。

它是用来做什么的，举个例子！

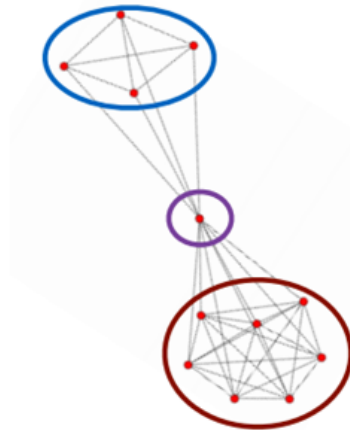
向前推算，通过一个未训练三层GCN模型



GCN模型与大名鼎鼎魏勒雷曼算法的关系到底是什么样的呢？

与魏勒雷曼算法的关系

节点功能分配的古典方法



Algorithm 1: WL-1 algorithm (Weisfeiler &

Input: Initial node coloring $(h_1^{(0)}, h_2^{(0)}, \dots, h_N^{(0)})$

Output: Final node coloring $(h_1^{(T)}, h_2^{(T)}, \dots, h_N^{(T)})$
 $t \leftarrow 0$;

repeat

for $v_i \in \mathcal{V}$ **do**

$h_i^{(t+1)} \leftarrow \text{hash} \left(\sum_{j \in \mathcal{N}_i} h_j^{(t)} \right)$;

$t \leftarrow t + 1$;

until stable node coloring is reached;

对于大多数图的图同构检查有用
 （例外：高度正则图）



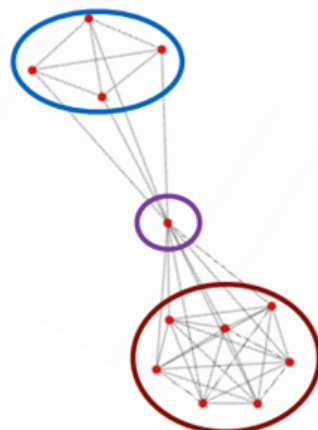
UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data



与魏勒雷曼算法的关系

节点功能分配的古典方法



Algorithm 1: WL-1 algorithm (Weisfeiler & Le

Input: Initial node coloring $(h_1^{(0)}, h_2^{(0)}, \dots, h_N^{(0)})$

Output: Final node coloring $(h_1^{(T)}, h_2^{(T)}, \dots, h_N^{(T)})$
 $t \leftarrow 0$;

repeat

for $v_i \in \mathcal{V}$ **do**

~~$h_i^{(t+1)} \leftarrow \text{hash} \left(\sum_{j \in \mathcal{N}_i} h_j^{(t)} \right)$;~~

until

$$\text{GCN: } \mathbf{h}_i^{(l+1)} = \sigma \left(\sum_{j \in \mathcal{N}_i} \frac{1}{c_{ij}} \mathbf{h}_j^{(l)} \right)$$

对于大多数图的图同构检查有用
 （例外：高度正则图）



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data



图的半监督分类也是一种不错的方法。

图的半监督分类

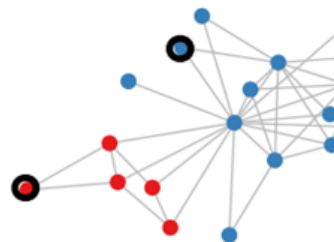
设置:

一些节点被标记 (黑圆圈)

所有其他节点未标记

任务:

未标记节点的节点标号预测



标准的方法:

基于图的正则化。

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \lambda \mathcal{L}_{\text{reg}} \quad \text{with} \quad \mathcal{L}_{\text{reg}} = \sum_{i,j} A_{ij} \|f(X_i) - f(X_j)\|$$

假设: 连接节点可能共享相同的标签



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

半监督分类嵌入方法——两步管道，这个方法也有一些问题，但我想这是可以解决的。

图的半监督分类

嵌入方法

两步管道:

1) 为每个节点进行嵌入

2) 训练分类器节点嵌入

Examples: DeepWalk [Perozzi et al., 2014], node2vec [Grover & Leskovec, 2016]

问题: 嵌入的分类是不优化的!

想法: 训练分类器基于端到端的使用,
仅在标记节点上评估损失。

$$\mathcal{L} = - \sum_{l \in \mathcal{Y}_L} \sum_{f=1}^F Y_{lf} \ln Z_{lf}$$

\mathcal{Y}_L 组标记节点索引

\mathbf{Y} 标签矩阵

\mathbf{Z} GCN的输出

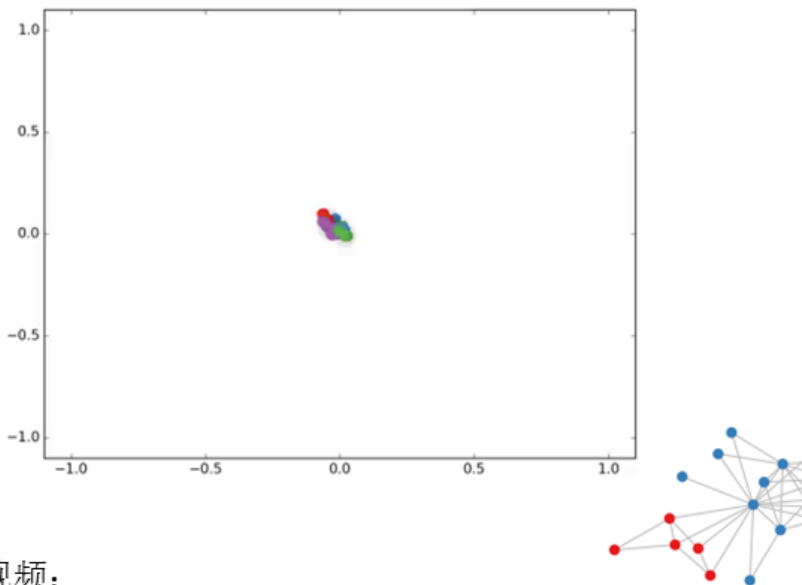


UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

举个小栗子，视频链接是一个关于半监督学习的小例子，有兴趣的朋友可以去看一下。

小例子（半监督学习）



视频:

<http://tkipf.github.io/graph-convolutional-networks/>



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

视频:

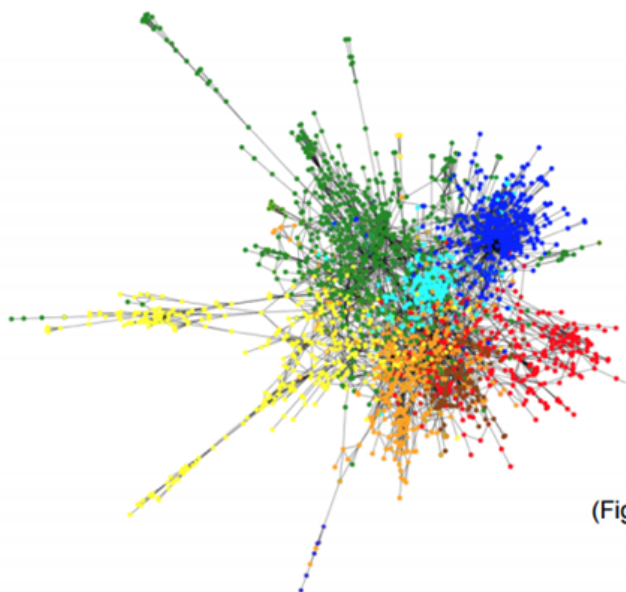
<http://tkipf.github.io/graph-convolutional-networks/>

此外，还有关于引文网络的分类，也可以通过这个方法实现。

应用：引文网络的分类

输入：引文网络（节点是文件，边缘是引用链接，可选的单词包特征节点）

目标：论文类（如stat.ml, cs.LG,...）



(Figure from: Bronst Szlam, Var



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

下面2-layerGCN模型的实验结果

实验和结果

模型：2-layer GCN $Z = f(X, A) = \text{softmax}(\hat{A} \text{ReLU})$

Dataset statistics

Dataset	Type	Nodes	Edges	Classes	Features
Citeseer	Citation network	3,327	4,732	6	3,703
Cora	Citation network	2,708	5,429	7	1,433
Pubmed	Citation network	19,717	44,338	3	500
NELL	Knowledge graph	65,755	266,144	210	5,414

Classification results (accuracy)

Method	Citeseer	Cora	Pubmed
ManiReg [3]	60.1	59.5	70.7
SemiEmb [24]	59.6	59.0	71.1
LP [27]	45.3	68.0	63.0
DeepWalk [18]	43.2	67.2	65.3
Planetoid* [25]	64.7 (26s)	75.7 (13s)	77.2 (25s)
GCN (this paper)	70.3 (7s)	81.5 (4s)	79.0 (38s)
GCN (rand. splits)	67.9 ± 0.5	80.1 ± 0.5	78.9 ± 0.7

无特征输入

(Kipf & Welling, Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional

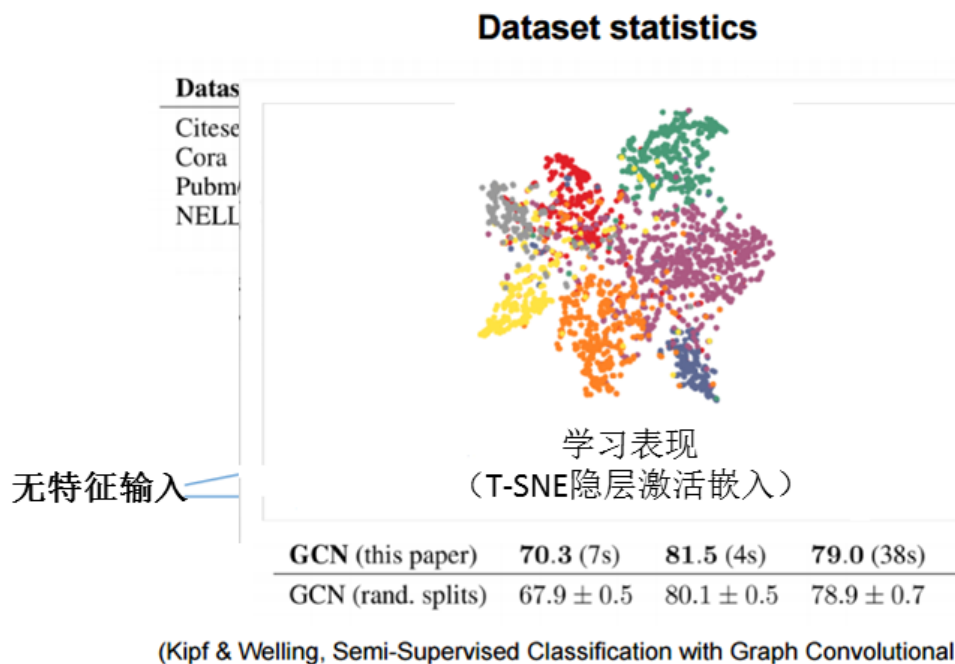


UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

实验和结果

模型: 2-layer GCN $Z = f(X, A) = \text{softmax}(\hat{A} \text{ReLU})$



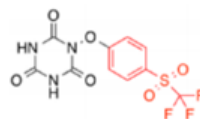
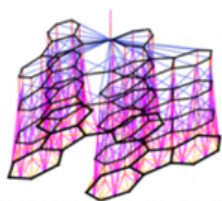
UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

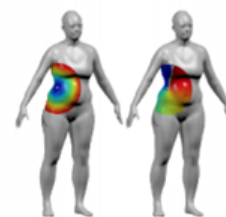
还要一些这个方法最近应用到其他程序的案例。

最近其他应用程序

分子



[Duvenaud et al., NIPS 2015]



Polar coordinates ρ, θ

[Monti et al.]

知识图



[Schlichtkrull et al.]



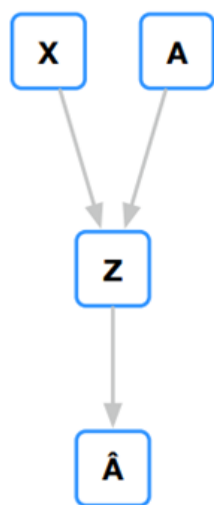
UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

用这个方法关于图auto-encoders链接的预测。下面是auto-encoders的介绍

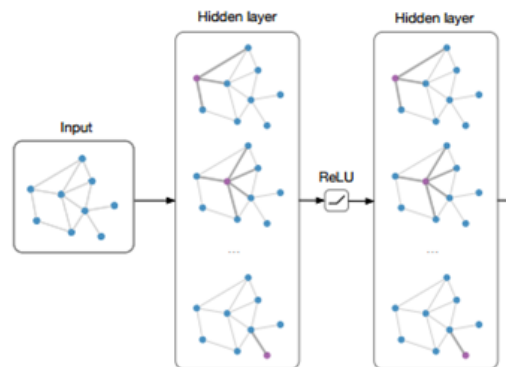
图auto-encoders链接预测

Kipf & Welling, NIPS Bayesian Deep Learning Workshop, 2016



GAE

编码器: $Z = \text{GCN}(X, A)$



解码器: $\hat{A} = \sigma(ZZ^T)$



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

Autoencoders

进一步的阅读

Blog post Graph Convolutional Networks:

<http://tkipf.github.io/graph-convolutional-networks>

Code on Github:

<http://github.com/tkipf/gcn>

Kipf & Welling, Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks, ICLR 2017:

<https://arxiv.org/abs/1609.02907>

Kipf & Welling, Variational Graph Auto-Encoders, NIPS BDL Workshop,

2016: <https://arxiv.org/abs/1611.07308>

与作者联系

- E-Mail: T.N.Kipf@uva.nl
- Twitter: [@thomaskipf](https://twitter.com/thomaskipf)
- Web: <http://tkipf.github.io>



UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Deep Learning on Graph-Structured Data

作者: Thomas Kipf

本文由北邮@爱可可-爱生活推荐, 阿里云云栖社区翻译。

文章原标题《Deep Learning on Graphs with Graph Convolutional Networks》, 作者: Thomas Kipf,

译者: 袁虎, 审阅: 我是主题曲哥哥, 附件为原文的pdf。

文章为简译, 更为详细的内容, 请查看[原文](#)


原文链接

好文要顶

关注我

收藏该文





暖夏未眠、
关注 - 0
粉丝 - 3

+ 加关注

« 上一篇: [Python正则表达式精讲](#)

» 下一篇: [想改进你的卷积神经网络? 看看这14种设计模式!](#)

posted @ 2017-07-28 15:30 暖夏未眠、 阅读(1437) 评论(0) 编辑 收藏

[刷新评论](#) [刷新页面](#) [返回顶部](#)

注册用户登录后才能发表评论，请 [登录](#) 或 [注册](#)，访问网站首页。

- 【推荐】超50万VC++源码: 大型组态工控、电力仿真CAD与GIS源码库!
- 【福利】校园拼团福利, 腾讯云1核2G云服务器10元/月!
- 【推荐】腾讯云新注册用户域名抢购1元起
- 【大赛】2018首届“顶天立地”AI开发者大赛



- 最新IT新闻:
- 宁德时代将在德国建厂 与宝马签署供应协议
 - 手机、平板电脑成哄娃利器，有两岁孩子近视达1000度
 - 蓝色光标回应使用假网红刷量骗钱：捏造事实博取眼球
 - 换届事宜迟迟未定 没有董明珠的格力该怎么办？
 - 旷视科技成OPPO FaceID供应商
- » 更多新闻...



- 最新知识库文章:
- 如何提升你的能力? 给年轻程序员的几条建议
 - 程序员的那些反模式
 - 程序员的宇宙时间线
 - 突破程序员思维
 - 云、雾和霭计算如何一起工作
- » 更多知识库文章...