

# GNN综述

2020年12月10日 16:04

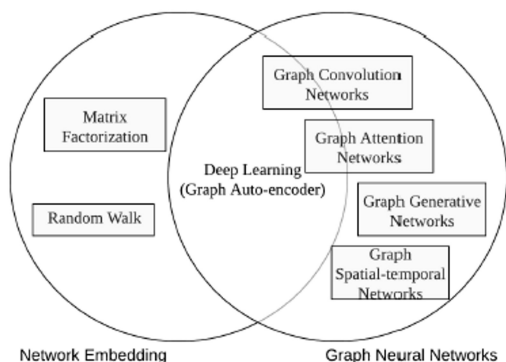
## 图神经网络GNN

借鉴了卷积网络、循环网络和深度自动编码器的思想，以此定义和设计的用于处理图数据的神经网络结构模型。

### 发展：

**图嵌入/网络嵌入：**通过保留图的网络拓扑结构和节点内容信息，将图中**顶点表示为低维向量**，以便使用简单的机器学习算法（例如，支持向量机分类）进行处理。

主要分为三类：**矩阵分解、随机游走、深度学习**（属于图神经网络）



: Network Embedding v.s. Graph Neural Networks.

图神经网络GNN总目录（分类）：

- 一、循环图神经网络（RecGNN）
- 二、卷积图神经网络（ConvGNN）
- 三、图自动编码器（GAE）
- 四、时空图神经网络（STGNN）

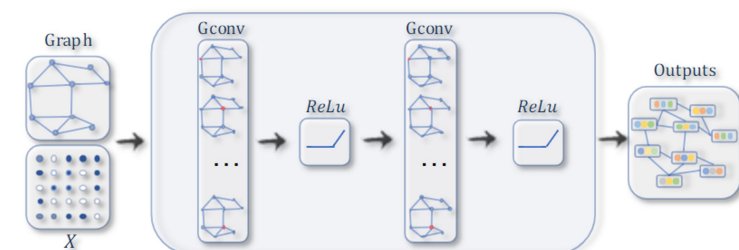
### 一、循环图神经网络（RecGNN）

**核心思想：**在图上的节点上反复应用相同的参数集，以提取高级节点表示形式。

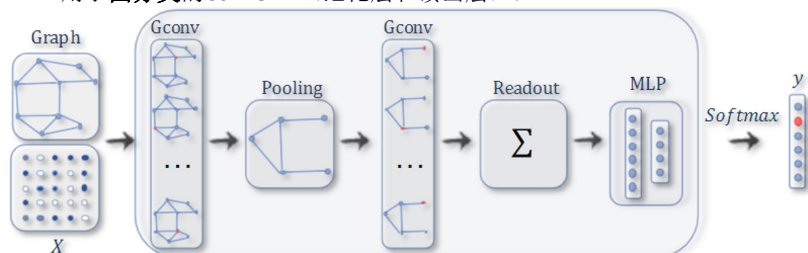
### 二、卷积图神经网络（ConvGNN）

**核心思想：**学习一个函数映射 $f(\cdot)$ ，通过该映射图中的节点 $V_i$ 可以聚合它自己的特征 $x_i$ 与它的邻居特征 $x_j$  ( $j \in N(V_i)$ ) 来生成节点 $V_i$ 的新表示。

➤ 用于**节点分类**的ConvGNN（多个图卷积层）：



➤ 用于**图分类**的ConvGNN（池化层和读出层）：



1、具有多个图卷积层的ConvGNN。图卷积层通过聚集来自其邻居的特征信息来封装每个节点的隐藏表示。特征聚合之后，将非线性变换应用于结果输出。通过堆叠多层，每个节点的最终隐藏表示形式从更近的邻居接收消息。

2、一个带有池化层和读出层的ConvGNN用于图分类。图卷积层之后是池化层，将图粗化为子图，这样粗化后的图上的节点表示就可以表示更高的图级表示。读出层通过读取子图的隐藏表示的和/均值来总结最终的图表示。

## ConvGNN 卷积图神经网络

### 基于频 (spectral-based)

无向图，图信号处理的角度引入滤波器来定义图卷积，其中图卷积操作被解释为从图信号中去除噪声。

### 基于空间 (spatial-based)

图卷积表示为从邻域聚合特征信息，将中心节点的表示与其邻居的表示进行卷积，以导出中心节点的更新表示。沿着边缘传播节点信息

### 1、图的表示 (正则化拉普拉斯矩阵)：

$$\mathbf{L} = \mathbf{I}_n - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$$

A邻接矩阵，D度矩阵，L实对称半正定性简化后：

$$\mathbf{L} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{U}^T$$

U是由L的特征向量构成的矩阵，Λ是对角矩阵，对角线上的值为L的特征值。

### 2、图的输入信号： $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$

$\mathbf{x}_i$ 是图的第i个节点的特征向量

### 3、图的傅里叶变换：

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^T \mathbf{x}$$

傅里叶反变换：

$$\mathcal{F}^{-1}(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{U} \hat{\mathbf{x}}$$

$\hat{\mathbf{x}}$ 是傅里叶变换后的结果

### 4、图卷积操作：

$$\begin{aligned} \mathbf{x} *_G \mathbf{g} &= \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(\mathbf{x}) \odot \mathcal{F}(\mathbf{g})) \\ &= \mathbf{U}(\mathbf{U}^T \mathbf{x} \odot \mathbf{U}^T \mathbf{g}), \end{aligned}$$

$\mathbf{g}$ 是定义的滤波器， $\odot$ 是哈达玛乘积 (同阶矩阵对应元素相乘)

定义滤波器：

$$\mathbf{g}_\theta = \text{diag}(\mathbf{U}^T \mathbf{g})$$

图卷积操作简化为：

$$\mathbf{x} *_G \mathbf{g}_\theta = \mathbf{U} \mathbf{g}_\theta \mathbf{U}^T \mathbf{x}.$$

基于谱的图卷积网络都遵循这样的模式，关键的不同点在于选择的滤波器不同。

5、现有的基于谱的图卷积网络模型有：谱CNN、Chebyshev Spectral CNN (ChebNet)、自适应GCN (AGCN)

6、常见缺点：需要将整个图加载到内存中以执行图卷积，处理大型图时不高效

### 基于谱模型和基于空间模型比较：

**效率：**基于谱模型需要执行特征向量计算或同时处理整个图，而基于空间模型通过聚集相邻节点直接在图域中执行卷积。

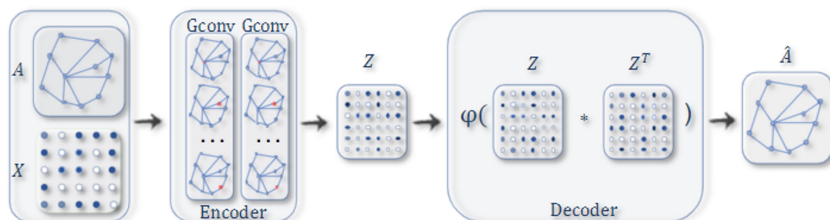
**通用性：**基于谱模型假设已有固定图，很难在图中添加新节点，而基于空间模型在每个节点上局部执行图形卷积，可以在不同位置和结构之间轻松共享权重。

**灵活性：**基于谱模型仅限于工作在无向图，基于空间模型更灵活地处理多源输入，这些输入可以合并到聚合函数中。

综上：基于空间模型更优。

## 三、图自动编码器 (GAE)

编码器使用图卷积层获得每个节点的网络嵌入。解码器计算给定网络嵌入的成对距离。应用非线性激活函数后，解码器重建图邻接矩阵。通过最小化实际邻接矩阵和重构的邻接矩阵之间的差异来训练网络。



### 1、网络嵌入

保留了节点拓扑信息的低维向量表示。编码器提取网络嵌入，解码器重建正点向互信息矩阵 (PPMI) 和邻接矩阵来保留节点拓扑信息。

两大主要特征：深度神经网络 (DNGR)、结构深度网络嵌入 (SDNE) 都利用多层感知机进行编码和解码来分别获得节点共现信息和节点的一阶和二阶近似值。但以上两种仅获得节点信息，输入增加了特征信息的GAE\*、ARGA、NetRA、DRNE可学习当拓扑信息和节点内容特征都存在时的节点嵌入。

### 2、生成图

通过使用多个图，GAE可以通过将图编码为隐藏表示并在给定隐藏表示的情况下对图结构进行解码来学习图的生成分布。

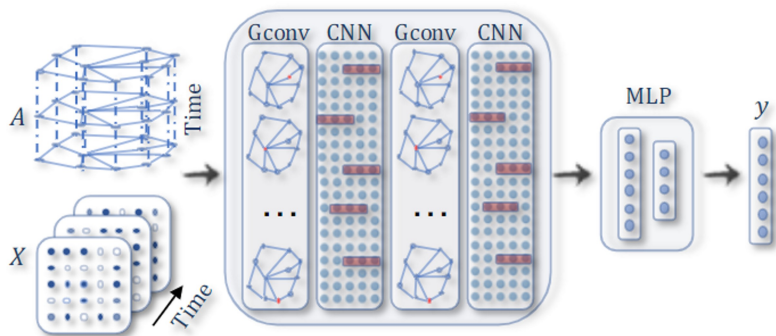
顺序方法：通过迭代的方式将nodes和Edges添加到一个不断增长的图中，直到某个标准得到满足。

全局方法：可一次输出全部图形，将节点和边的存在建模为独立随机变量。

缺点：顺序方法将图线性化为序列，图过大则序列也会过长，而使用RNN对长序列建模效率不高。全局方法一次输出整个图，输出空间复杂度较大。

## 四、时空图神经网络 (STGNN)

STGNN用于模拟动态节点输入，同时捕获图的空间和时间依赖性。图卷积层后接一维CNN层，图卷积层对邻接矩阵A和特征矩阵 $\mathbf{X}^{(t)}$ 进行操作以捕获空间相关性，一维CNN层沿着时间轴在X上滑动，以捕获时间依赖性。输出层是一个线性变换，为每个节点生成一个预测，例如它在下一个时间步的未来值。



已有方法都使用预定义图结构，是假设预定义的图结构反映了节点之间的真正依赖关系。但在真实环境中使用图数据的许多快照时可以从数据中自动学习潜在的静态图结构。Graph WaveNet提出了一个自适应邻接矩阵来进行图卷积：

$$\mathbf{A}_{adp} = \text{SoftMax}(\text{ReLU}(\mathbf{E}_1 \mathbf{E}_2^T))$$

其中 $\mathbf{E}_1$ 表示源节点嵌入， $\mathbf{E}_2$ 表示具有可学习参数的目标节点嵌入，将 $\mathbf{E}_1$ 乘以 $\mathbf{E}_2$ 可以得到从源节点到目标节点的依赖权重。

## 五、应用

### 1、计算机视觉CV：

- 场景图生成：应用1：将图像解析为包含对象及其语义关系的语义图。应用2：通过给定场景图生成逼真的图像来逆转该过程。
- 点云分类与分割：点云是激光雷达扫描记录的一组三维点。为了识别点云所描绘的物体，将点云转换为k-最近邻图或叠加图，并利用ConvGNN来探索拓扑结构。
- 动作识别：由骨骼连接的人体关节自然形成图表。给定人类关节位置的时间序列，应用STGNN来学习人类行为模式。此外，还包括人物交互、少镜头图像分类、语义分割、视觉推理和问答等。

### 2、自然语言处理NLP：

- 常见应用是文本分类。GNN利用文档或单词的相互关系来推断文档标签。自然语言数据中可能包含内部图结构，例如句法依赖树。句法依赖树定义了句子中单词之间的句法关系。
- 图到序列学习指学习给定一个抽象词的语义图，学习生成具有相同意义的句子。反向任务是序列到图的学习。给定一个句子生成语义图或知识图。

### 3、交通：

- 交通预测。STGNN将交通网络视为一个时空图，节点是安装在道路上的传感器，边缘是成对节点之间的距离，每个节点具有窗口内的平均交通速度作为动态输入特征。
- 出租车需求预测。结合LSTM，CNN和由LINE训练的网络嵌入，形成每个位置的联合表示，以预测某个时间间隔内某个位置所需的出租车的数量。

### 4、推荐系统：

- 基于图的推荐系统以条目和用户为节点。将推荐系统转换为链路预测问题。目标是预测用户和条目之间丢失的链接。

### 5、化学领域：

- 在分子/化合物图中，原子被视为节点，化学键被视为边缘。节点分类，图分类和图生成是获得分子/化合物图的三个主要任务。

### 6、其他

六、未来研究方向理，社会影响预测，对抗性攻击预防，电气健康记录建模，大脑网络，事件检测，组合优化等。

- 1、模型深度。理论上，随着图卷积将相邻节点的表示推向彼此更近的位置，图卷积层数无限，所有节点的表示将收敛到单个点。这就提出了一个问题，即深度学习是否仍然是学习图形数据的好策略。
- 2、可伸缩性权衡。GNN的可伸缩性是以破坏图形完整性的代价获得的。无论是使用采样还是聚类，模型都会丢失部分图形信息。通过采样，节点可能会错过其有影响力的邻居。通过聚类，图可能会失去独特的结构模式。如何权衡算法的可扩展性和图形完整性可能是未来的研究方向。
- 3、异质性。当前的大多数GNN假设为同质图，GNN异构图可能包含不同类型的节点和边缘，或不同形式的节点和边缘输入，例如图像和文本。因此，应该开发新的方法来处理异构图。
- 4、动态性。图在本质上是动态的，节点或边可能出现或消失，节点/边的输入可能会随着时间的推移而改变。为了适应图的动态性，需要新的图卷积。虽然STGNNs可以部分解决图的动态性问题，但很少有STGNNs考虑如何在动态空间关系的情况下进行图卷积。