

Geom-GCN: Geometric Graph Convolutional Networks

冯柏淋

2020 年 10 月 9 日

1 摘要

本文认为传统的消息传递网络 (MPNN) 在聚合时存在两个主要问题:

1. 丢失了邻居的结构信息, 因为将所有节点无差别对待 (为满足 permutation invariance).
2. 无法捕获长距离的关系, 因为仅仅聚合 one-hop 邻居或几跳之内的邻居.

2 Geometric Aggregation Scheme

为解决以上问题, 本文提出一种新的聚合模式: 即不仅考虑原始图中的邻居关系, 还将原图中的节点嵌入到一个新的隐空间中 (a latent continuous space), 考虑新空间中两个节点之间的距离关系, 根据不同的距离大小定义不同的关系.

然后依据以上两种不同的邻居类别, 分别进行聚合. 同时仍保证 permutation invariance (文中有定理来证明).

具体上图说话:

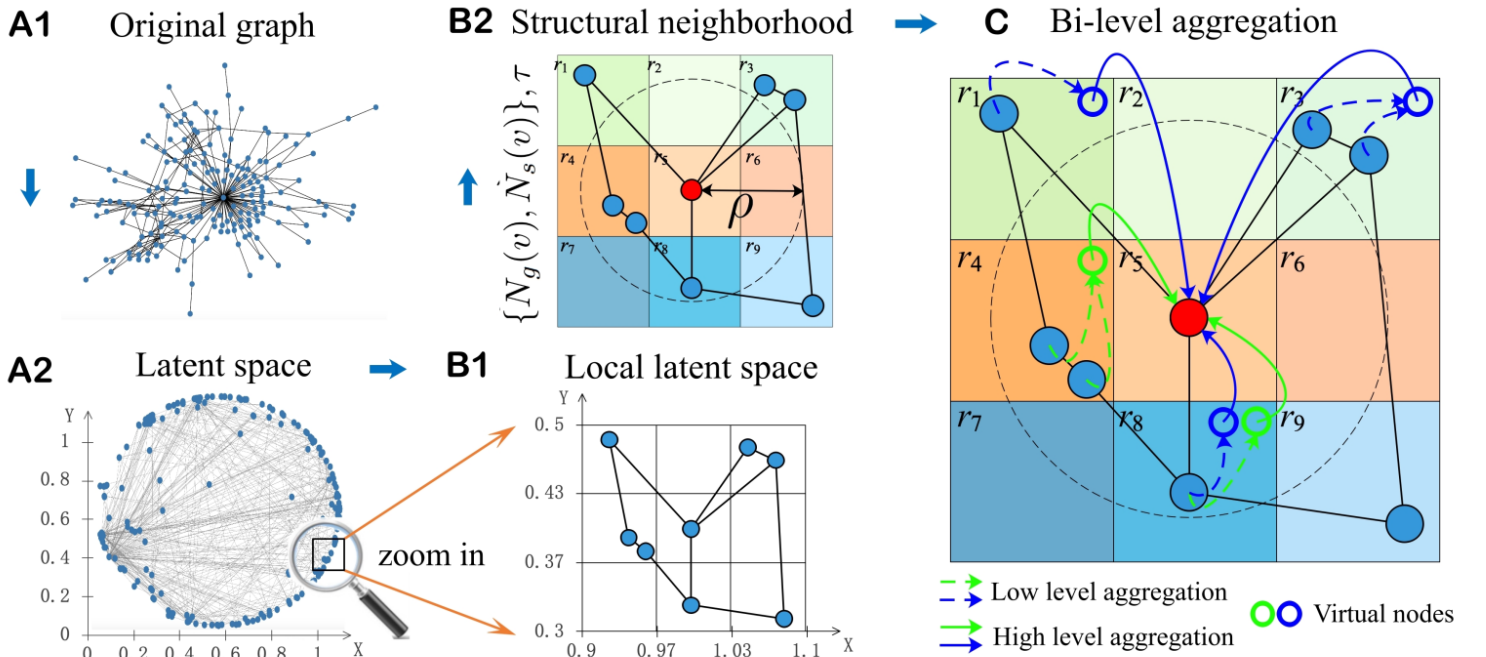


图 1: 模型整体框架

- ¶ 图中 A1 为原始图;
- ¶ A2 是原图经过某种嵌入技术进行嵌入后的在 latent continuous space 中的关系(维持原来的连边关系不变);
- ¶ B2: 根据预先设定的距离阈值,距离在阈值范围内的,则认为两点间具有邻居关系.如图 A3 中红点与 r_4 网格中的两个点,都认为互相为邻居.
- ¶ C 图,根据本文提出的 2-level 聚合模式,对目标节点(红色)进行聚合更新

2.1 关系算子

其中包含一个关系算子 τ :

$$\tau : (z_v, z_u) \rightarrow r \in R$$

即根据两个节点之间的距离关系(不一定是距离关系),为其指定一种关系.例如上图中 B2 中则包括 9 中关系, r_1 到 r_9 .

2.2 聚合

聚合操作一共分为两种, low-level 和 high-level. 其实理解为两个步骤. 但是注意到其中重要一点是, 其是根据不同的关系 r 来分别聚合的, 从而一定程度上解决问题 1.

Low-level, 先根据不同的邻居类型 (g 或者 s), 不同的关系类型 $r \in R$, 将同一类型的节点聚合到一个 virtual 节点 e 上:

$$e_{(i,r)}^{v,l+1} = p(\{h_u^l | u \in N_i(v), \tau(z_v, z_u) = r\}), \forall i \in \{g, s\} \forall r \in R$$

High-level, 再将以上的这些 virtual 节点统一聚合到中心节点上:

$$m_v^{l+1} = q_{i \in \{g, s\}, r \in R}((e_{(i,r)}^{v,l+1}, (i, r)))$$

最后再作个非线性变化:

$$h_v^{l+1} = \sigma(W_l \cdot m_v^{l+1})$$

3 实验

Geom-GCN 即是以上聚合模式的一种具体实现. 本文对比三种不同的 node embedding 方法, 分别为 Isomap, Poincare 和 struc2vec, 低层聚合采用 mean, 高层聚合采用 concat.

结果略.