

人工智能导论

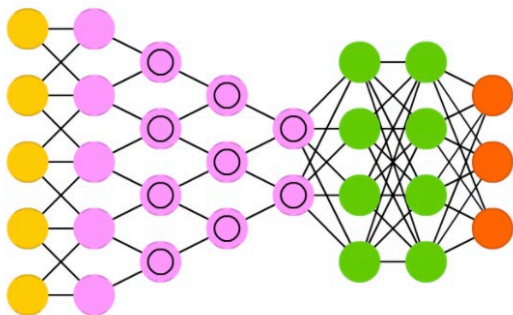
主讲：王博

人工智能与自动化学院

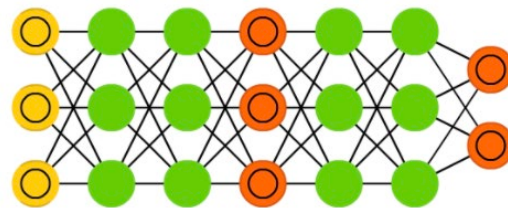
现代神经网络重要思想与结构

- 深度卷积网络
- 生成与对抗
- 注意力机制
- 图上的深度学习

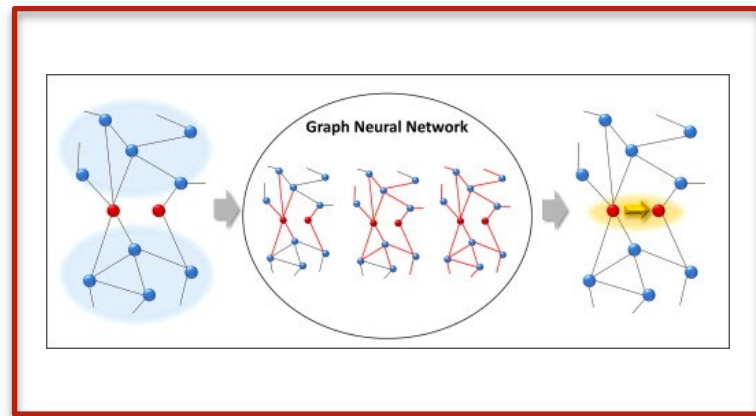
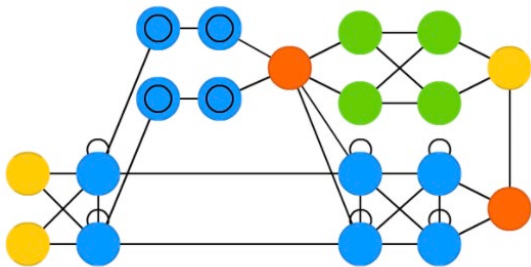
Deep Convolutional Network (DCN)



Generative Adversarial Network (GAN)



Attention Network (AN)



图上的深度学习

Deep Learning over Graph

- 基本概念
- 图神经网络
- 图卷积网络
- 典型应用

网格化数据

- 常见图像、语音、以及自然语言均为规则的网格化数据

IMAGENET

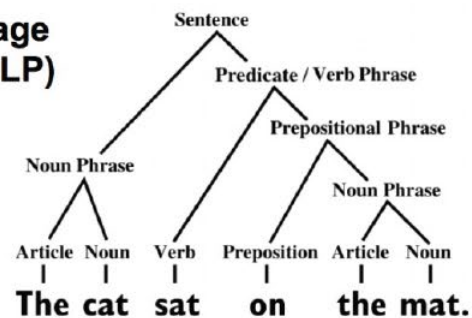


Speech data

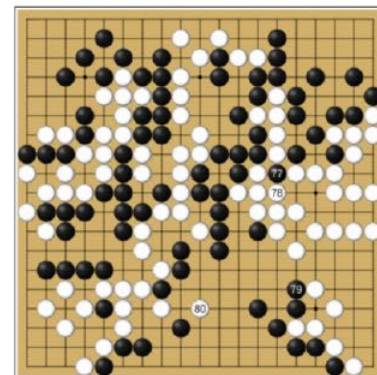


Natural language processing (NLP)

...



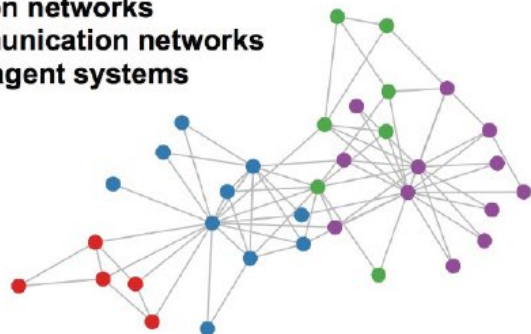
Grid games



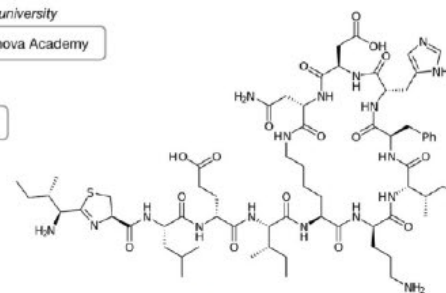
图结构数据

- 现实世界中的许多数据并非建立在网格之上

Social networks
Citation networks
Communication networks
Multi-agent systems

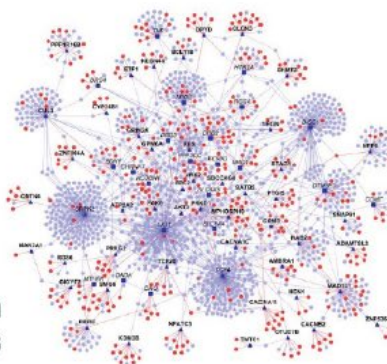


Knowledge graphs

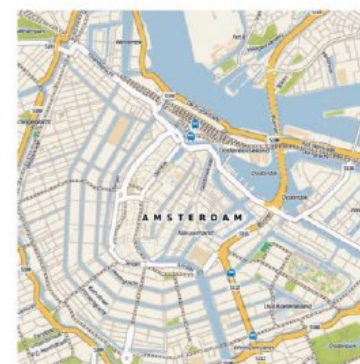


Molecules

Protein interaction networks



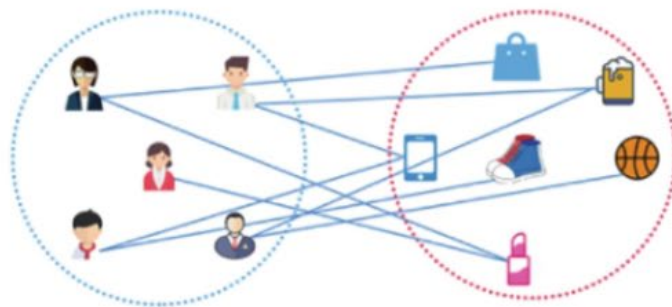
Road maps



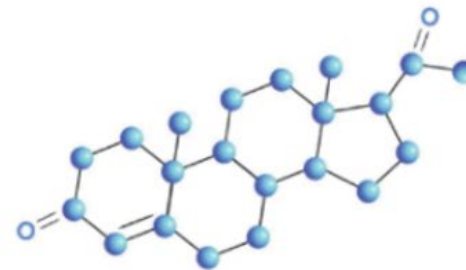
现实世界中的图数据



a) 社交网络



b) 电子购物



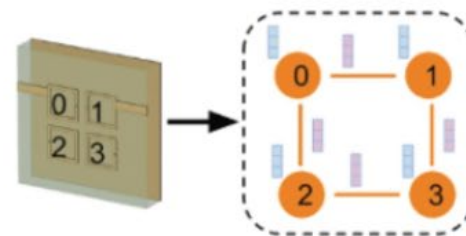
c) 化学分子



d) 交通网络



e) 场景图



f) 电路设计图

非结构化（图）数据的难点

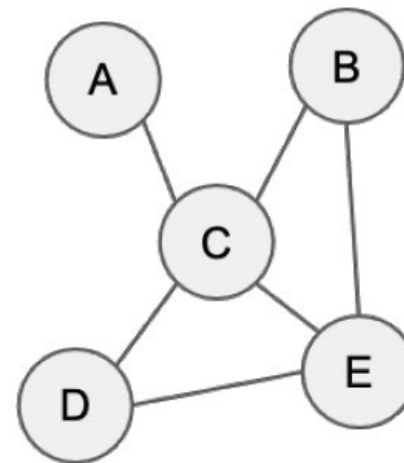
- 图的大小任意，拓扑结构复杂，没有像图像一样的空间规律性
- 图没有固定的节点顺序，或者说没有参考节点
- 图通常是动态的，可能包含多模态的特征

什么是图?

- 图 (graph) 是一种数据结构, 它可直观表示和可视化不同变量间的相互关系

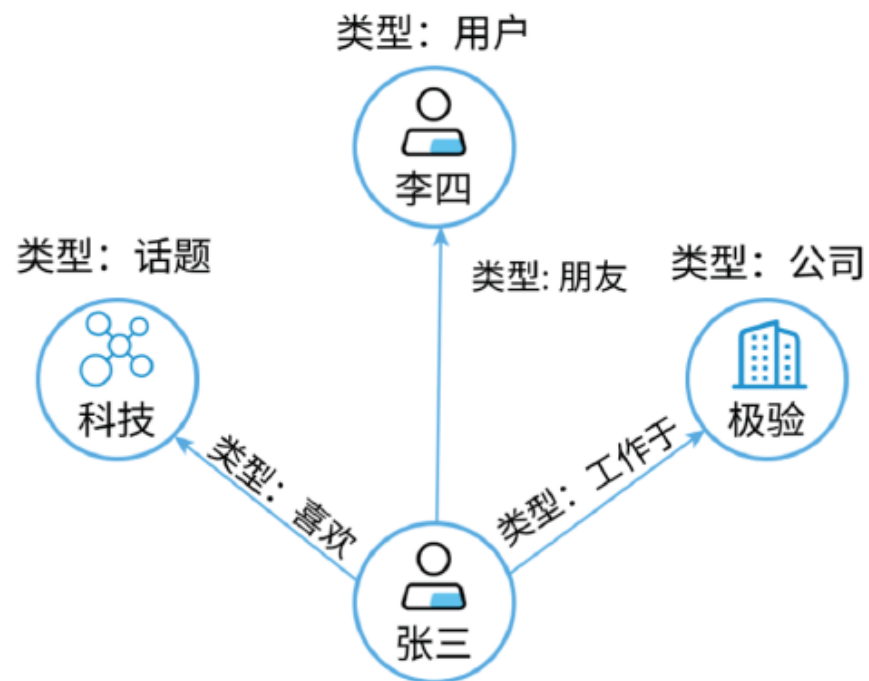
$$\mathcal{G} = \{\mathcal{V}, \mathcal{E}\}$$

- \mathcal{V} 是节点 (nodes) 或顶点 (vertices) 的集合
- \mathcal{E} 是边 (edges) 的集合



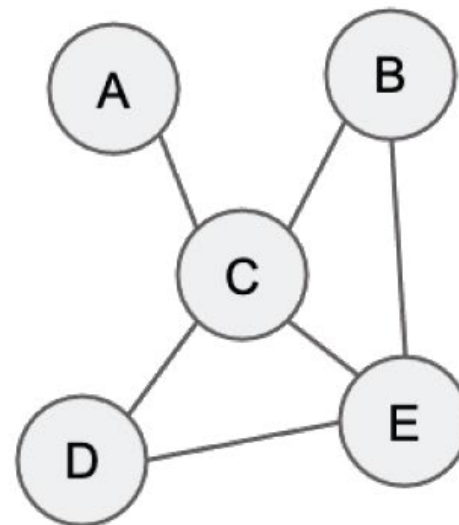
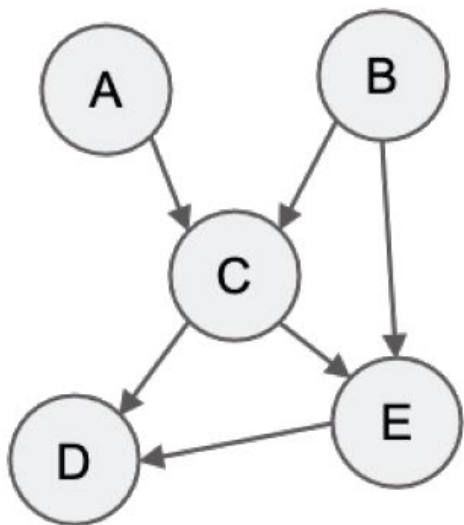
属性图

- 节点和边都可以具有属性（特征）
- 在一个图结构中，每一个节点由它自身的特征以及与其相连的节点特征来定义该节点



图的两类型

- **有向图**：表示不同变量间的因果关系
- **无向图**：表示不同变量间的相关性



关于图的研究

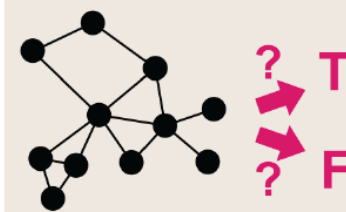
针对图的研究可以分为三类：

- **经典图算法**：生成树算法，最短路径算法，二分图匹配，费用流问题等等（《算法导论》）
- **概率图模型**：研究图结构的概率表示，典型的有条件随机场、马尔科夫随机场等（《概率图模型》）
- **图神经网络**：研究图结构数据挖掘的问题，典型的有图嵌入（graph embedding），图卷积网络（graph convolutional networks）等（《机器学习》，《深度学习》）

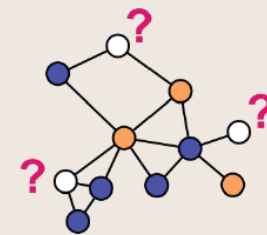
图相关任务

- 图分类
- 节点分类
- 连接预测
- 群体检测（图聚类）
- 图嵌入/节点嵌入
- 图生成

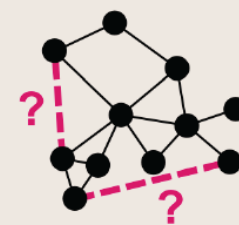
Graph Classification



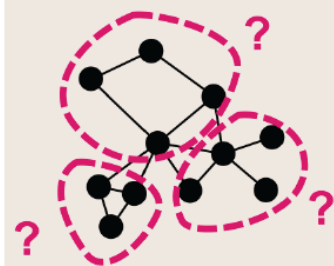
Node Classification



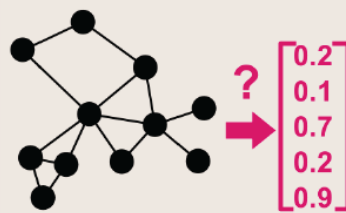
Link Prediction



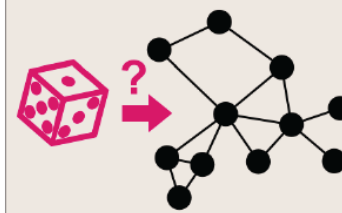
Community Detection



Graph Embedding



Graph Generation



图上的深度学习

Deep Learning over Graph

- 基本概念
- 图神经网络
- 图卷积网络
- 典型应用

图神经网络的提出

- 图神经网络的概念首次在2005年被提出，其理论基础在论文《The Graph Neural Network Model》中被正式定义



Franco Scarselli

[University of Siena](#)

Verified email at ing.unisi.it - [Homepage](#)

[Artificial intelligence](#) [machine learning](#) [artificial neural networks](#) [graph neural networks](#)
[deep learning](#)

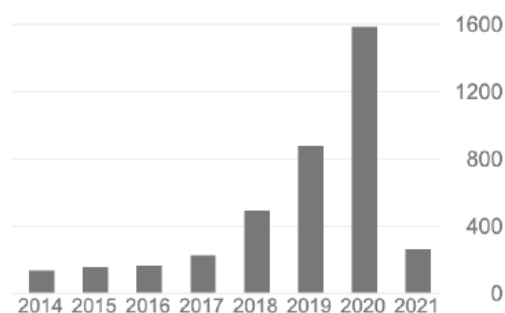
[FOLLOW](#)

| TITLE | CITED BY | YEAR |
|---|----------|------|
| The graph neural network model F Scarselli, M Gori, AC Tsoi, M Hagenbuchner, G Monfardini IEEE transactions on neural networks 20 (1), 61-80 | 2041 | 2008 |
| A new model for learning in graph domains M Gori, G Monfardini, F Scarselli Proceedings. 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks ... | 643 | 2005 |

Cited by

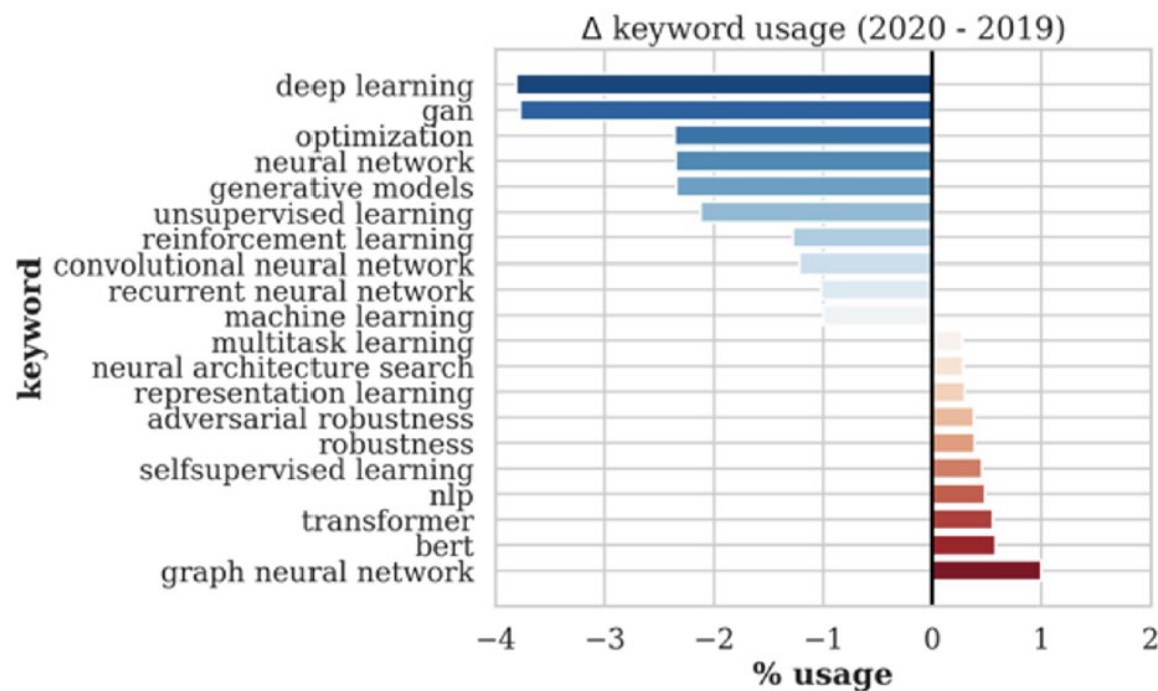
[VIEW ALL](#)

| | All | Since 2016 |
|-----------|------|------------|
| Citations | 5548 | 3607 |
| h-index | 22 | 12 |
| i10-index | 49 | 18 |



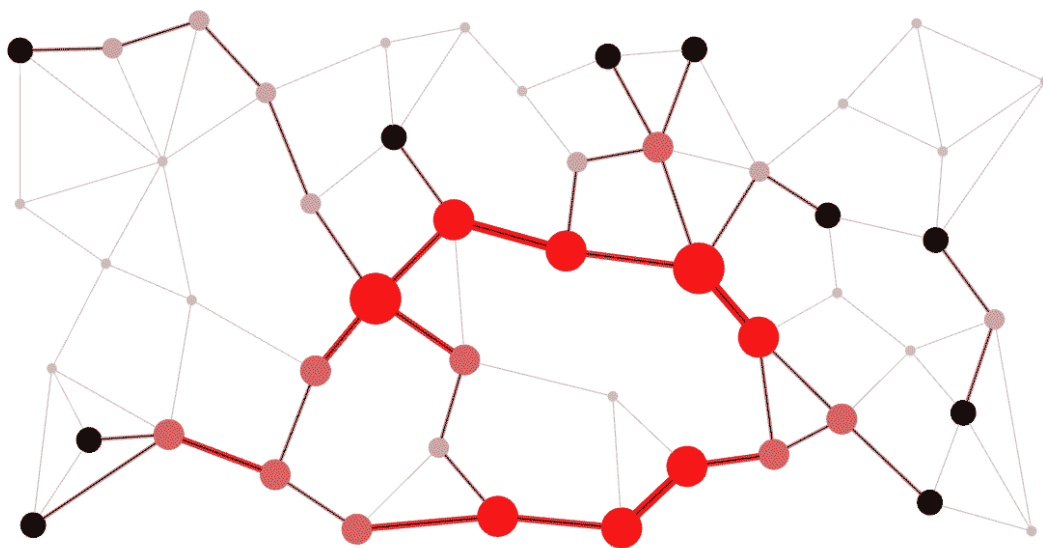
图神经网络元年

- graph neural network在2019年到2020年之间力压deep learning、GAN等，成为各大顶会的增长热词
- 2019 年被称为图神经网络元年

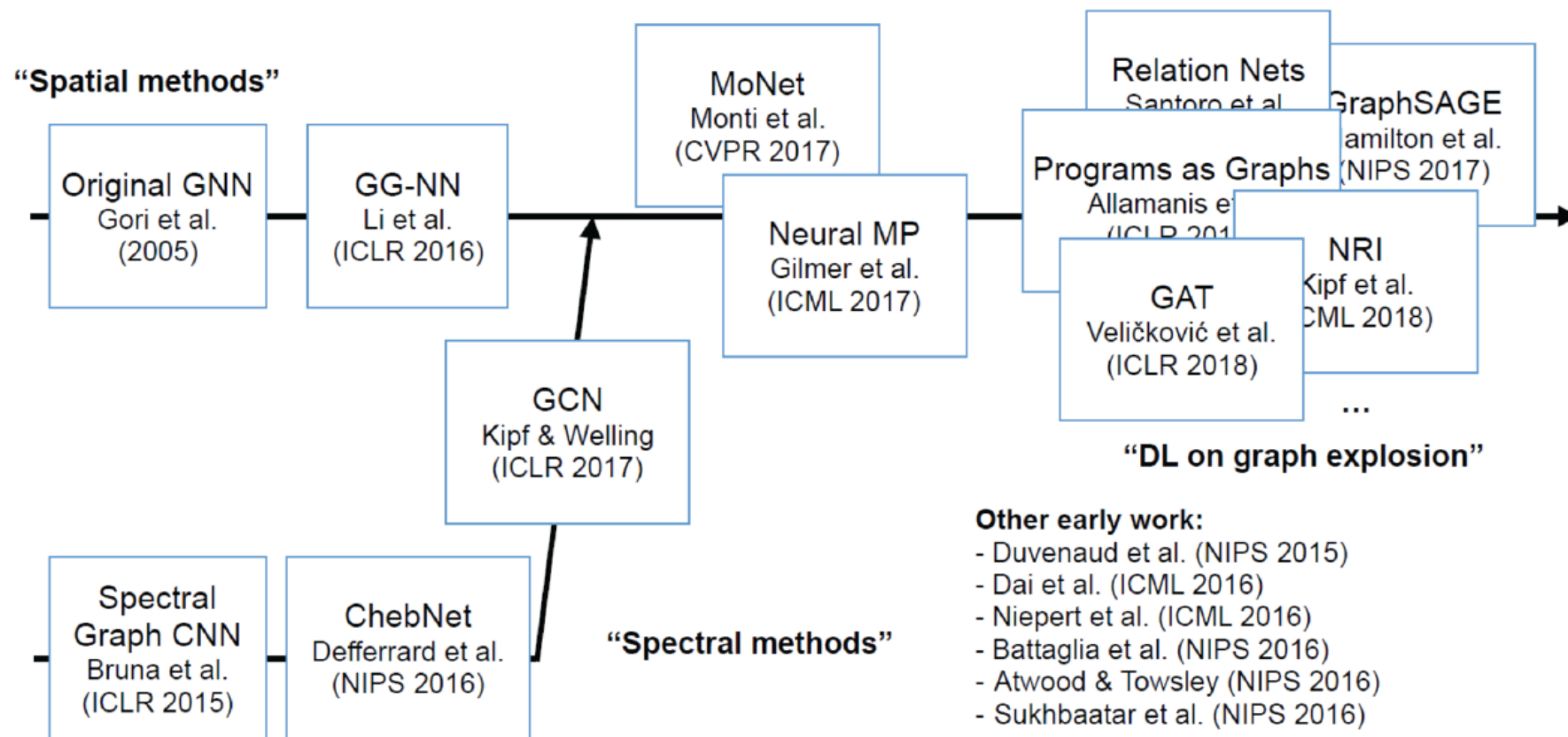


何为图神经网络?

- 图神经网络 (GNN)，简而言之就是将图数据和神经网络进行结合，在图数据上进行端对端的学习和计算。



图神经网络简史

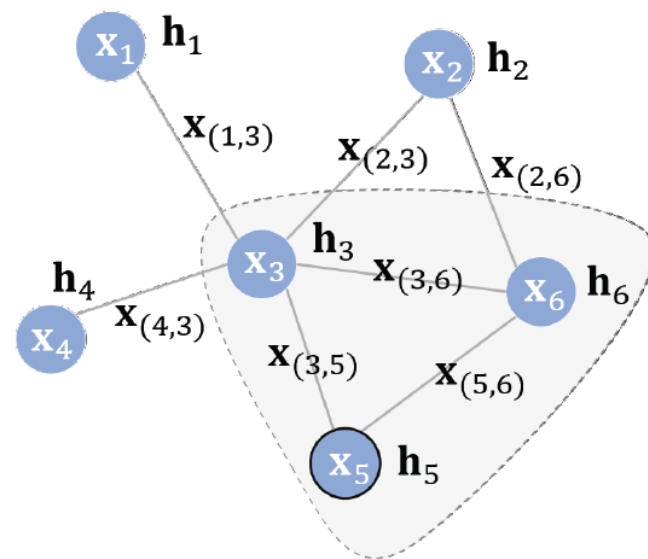


初代GNN

- 给定一张图 \mathcal{G} ，每个节点 v 的特征用 x_v 表示，连接节点 v 和节点 u 的边的特征用 $x_{(u,v)}$ 表示。GNN的学习目标是：获得每个节点 v 的隐藏状态 h_v 。

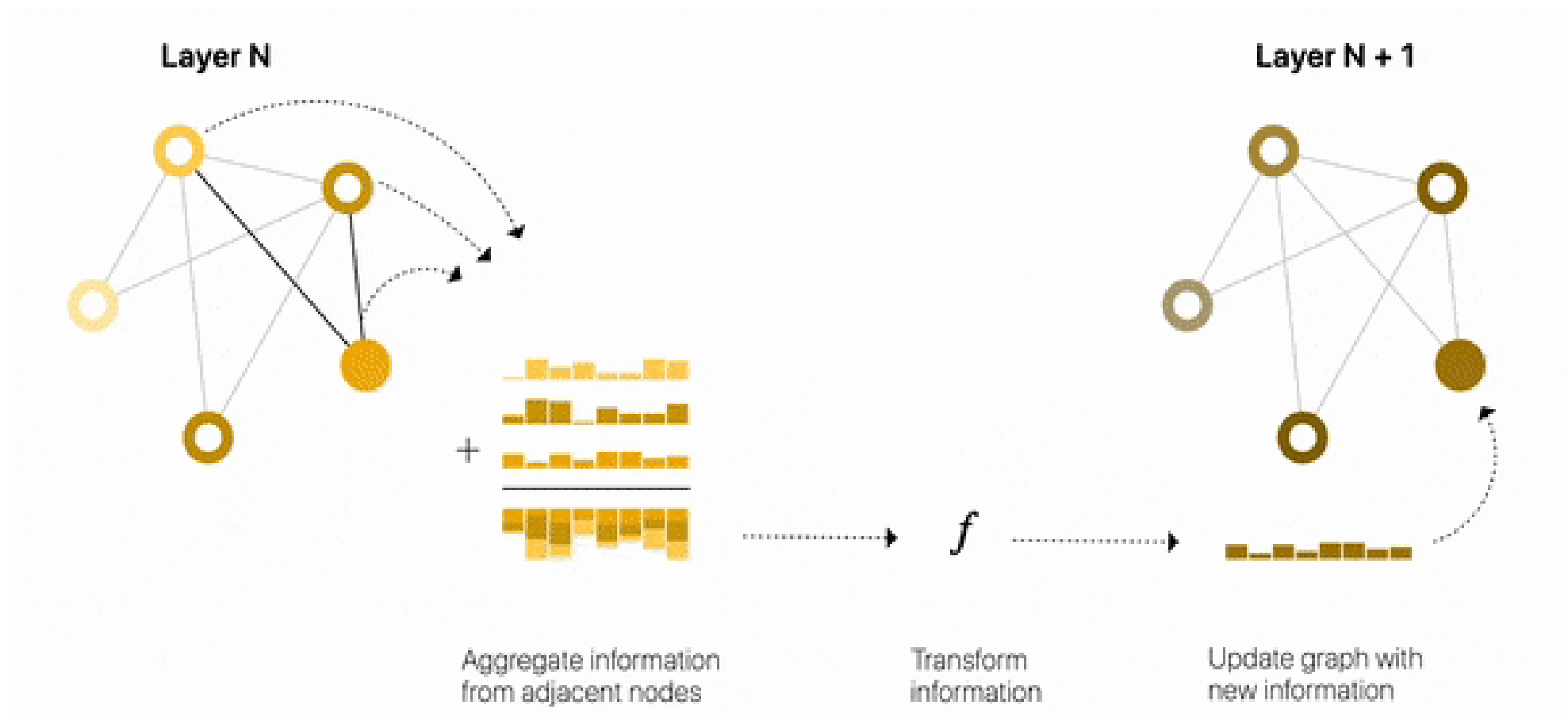
注意：

对于每个节点，它的隐藏状态由自身节点的特征、相邻节点的特征和隐藏状态以及与自身节点相连的边的特征共同决定。

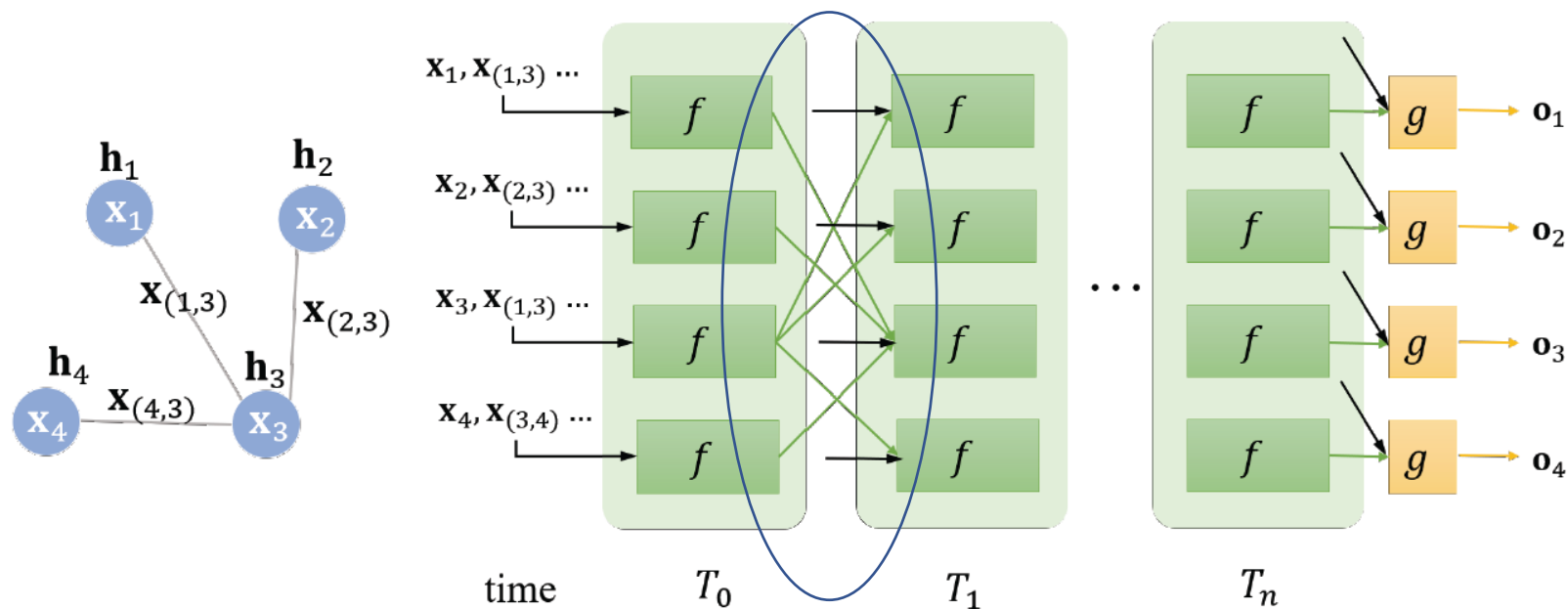


$$h_5 = f(x_5, x_{(3,5)}, x_{(5,6)}, h_3, h_6, x_3, x_6)$$

GNN的信息传递



GNN的信息传递



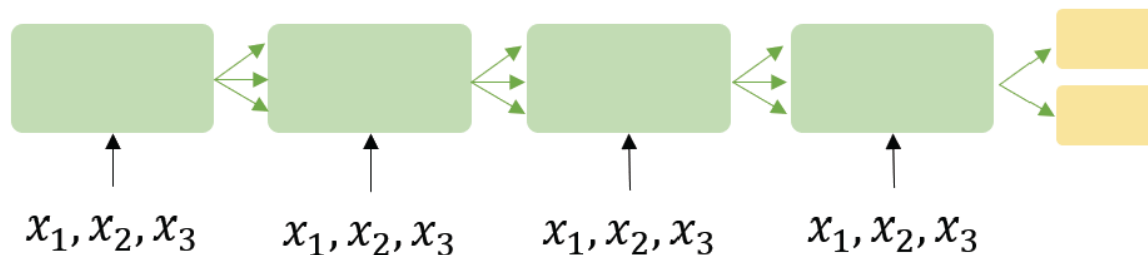
注意：

不同时刻间信息的传递与图的拓扑结构一致。

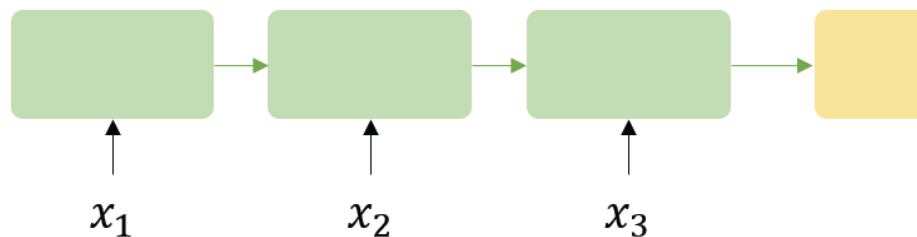
GNN与RNN的区别

- GNN在不同时刻的输入相同，RNN在不同时刻的输入不同
- GNN可以是结构化的输出（多个任务），RNN是单输出

**Graph
Neural
Network**



**Recurrent
Neural
Network**



图上的深度学习

Deep Learning over Graph

- 基本概念
- 图神经网络
- 图卷积网络
- 典型应用

图卷积网络

- 图卷积网络（Graph Convolutional Networks，以下简称GCN）是GNN的主要变体之一
- CNN有能力去抽取多尺度局部空间信息，并将其融合起来构建特征表示，但只能应用于常规的欧几里得数据上
- GNN和CNN的共同点：
 - ① 局部连接
 - ② 权值共享
 - ③ 多层网络

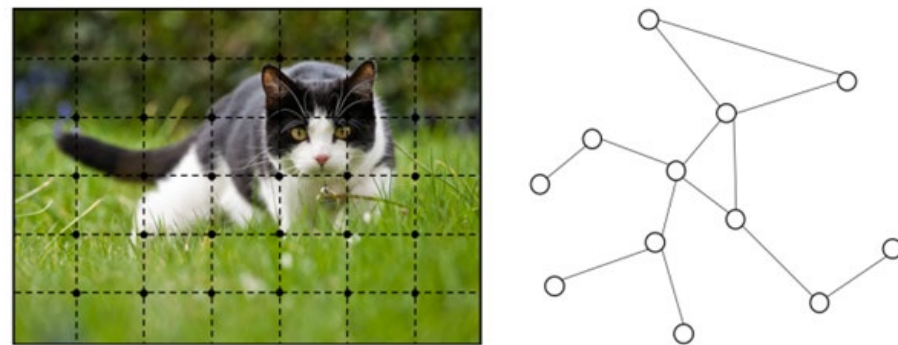
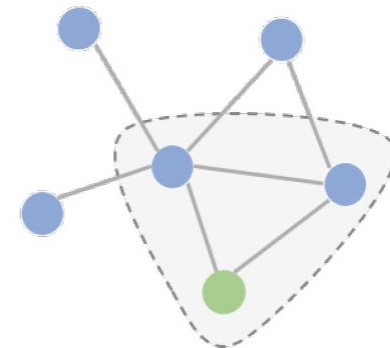
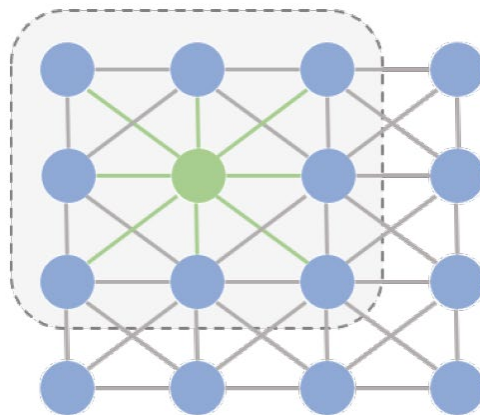


Fig. 1. Left: image in Euclidean space. Right: graph in non-Euclidean space

常规卷积和图卷积

• 常规卷积

- 1) 定义在欧式空间
- 2) 节点的邻域数量固定
- 3) 卷积核大小固定



邻居结点数量不固定



• 图卷积

- 1) 定义在非欧空间
- 2) 节点的邻域不固定
- 3) 卷积核大小不固定

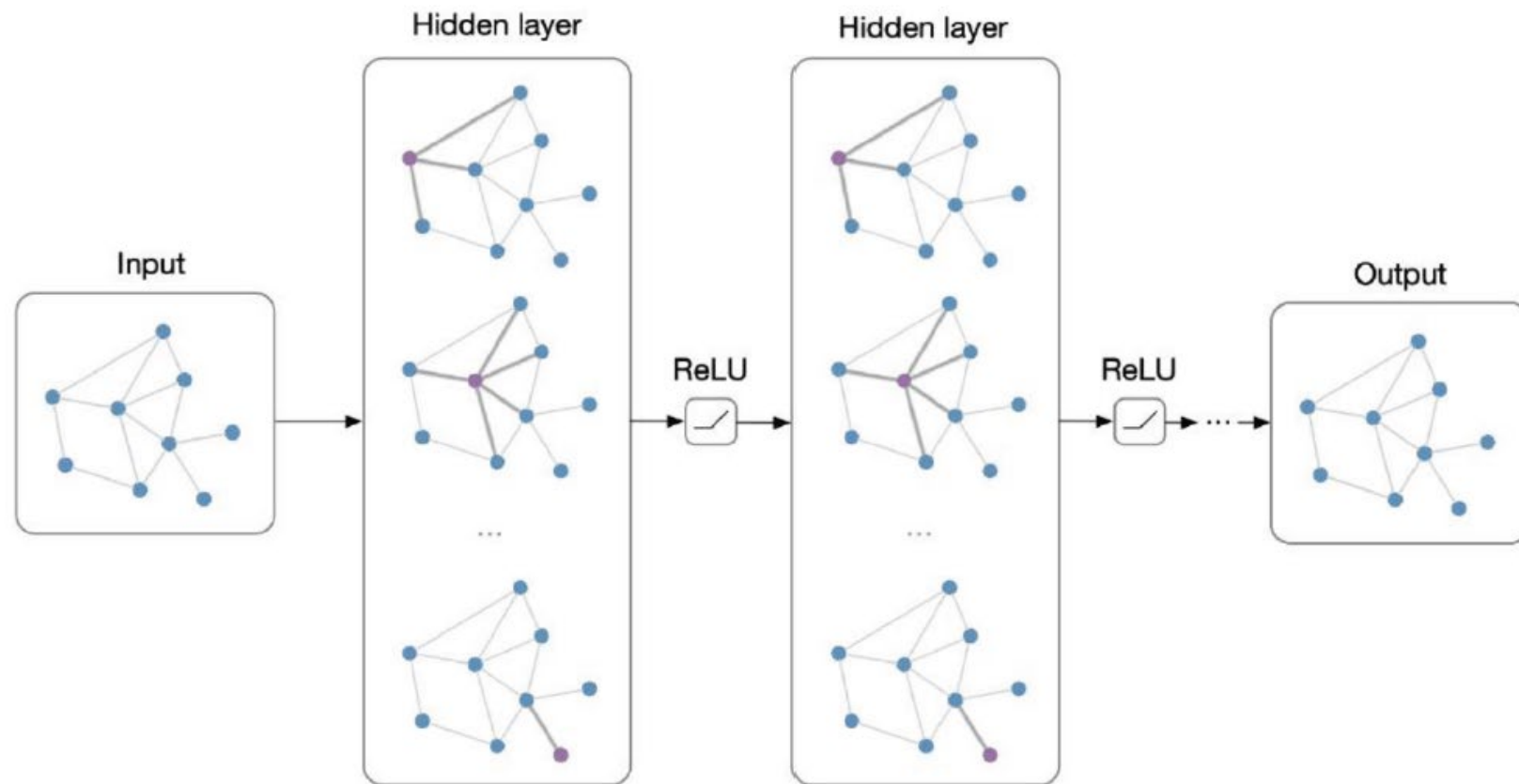
- 把非欧空间的图转换成欧式空间
- 可处理变长邻居结点的卷积核在图上抽取特征

图卷积的本质是想找到适用于图的可学习卷积核

图卷积网络框架

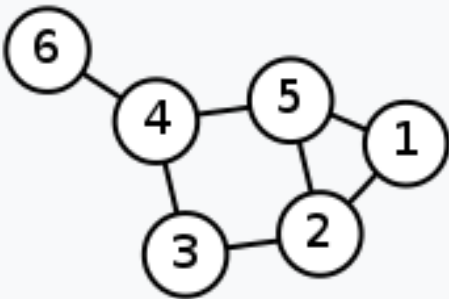
- 图卷积网络特点

- 局部特性
- 一阶特性
- 参数共享



GCN的输入

- 图卷积神经网络的目标是在图 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 上学习一个信号/特征函数，输入包括：
- 节点特征：** 节点 i 的特征 x_i ，表示为一个 $N \times D$ 的特征矩阵 X ， N 表示节点数， D 表示特征维数。
- 图结构特征：** 图结构的信息通常表示为邻接矩阵 A 。

| Labeled graph | Adjacency matrix |
|--|--|
|  | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ |

不同数据的邻接矩阵

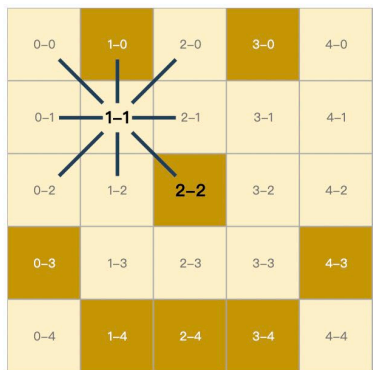
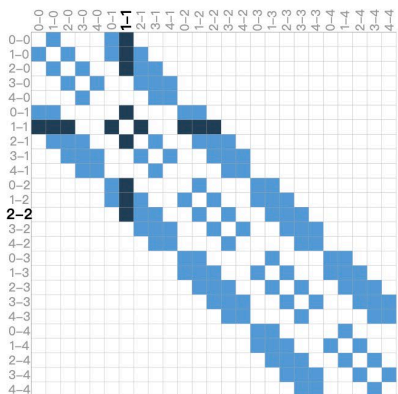
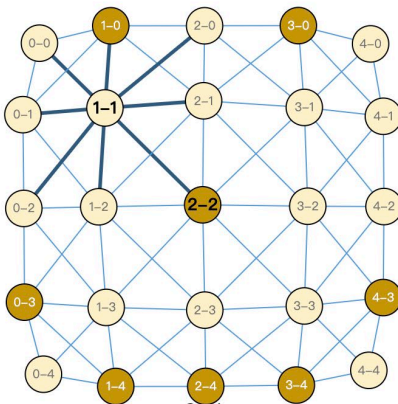


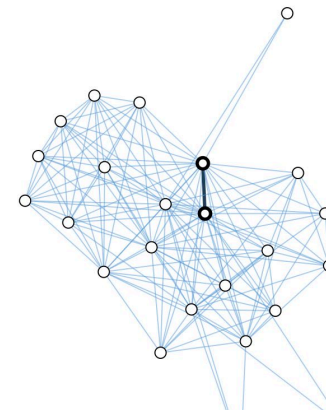
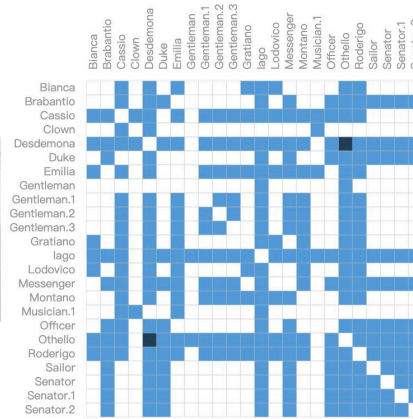
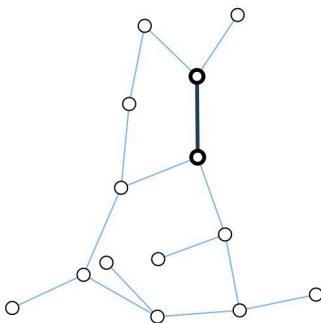
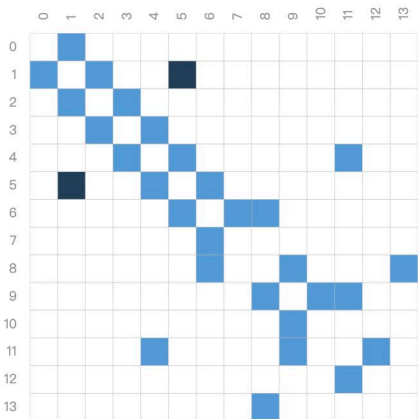
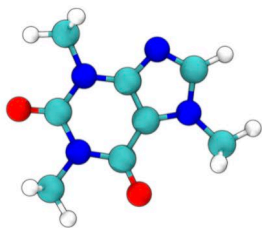
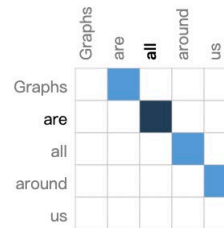
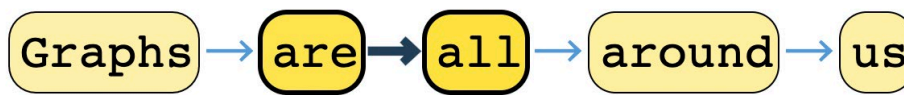
Image Pixels



Adjacency Matrix



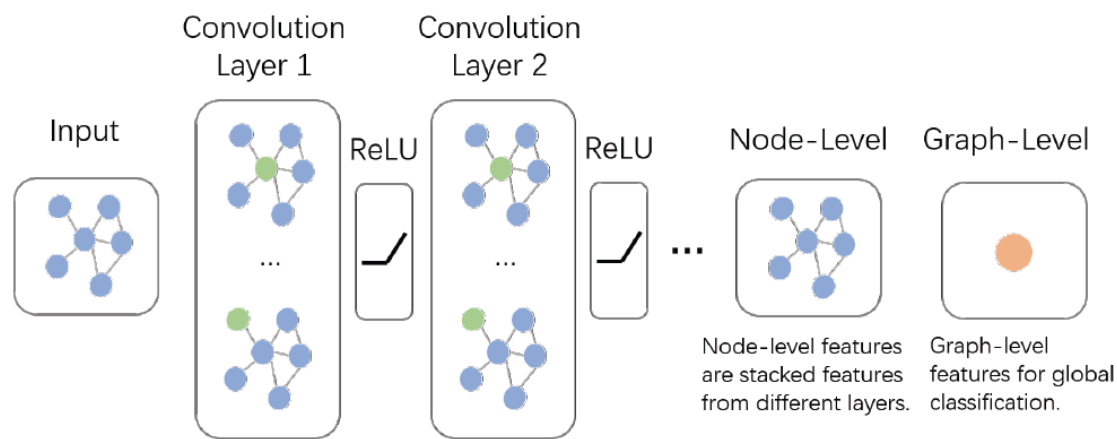
Graph



GCN的输出

GCN的输出包括：

- **节点级别输出：** 节点级别输出 Z 是一个 $N \times F$ 大小的特征矩阵， F 是输出特征维数；
- **图级别输出：** 图级别输出可通过引入某种形式的池化算子



GCN的层级传播规则 f

- GCN的每一层可以写作一个非线性函数

$$\mathbf{H}^{(l+1)} = f(\mathbf{H}^{(l)}, \mathbf{A})$$

- 其中 $\mathbf{H}^{(0)} = \mathbf{X}$, $\mathbf{H}^{(L)} = \mathbf{Z}$, L 是GCN 的层数。
- 不同模型的主要差别在于 $f(\cdot, \cdot)$ 如何选择。
- 一个简单的示例：

$$f(H^{(l)}, A) = \sigma(AH^{(l)}W^{(l)})$$

GNN与GCN

联系

初代GNN 和GCN 都属于图表示学习的范畴，也叫图嵌入（Graph Embedding）。通常有两个层次的含义：

- 将图中的节点表示成低维、实值、稠密的向量形式；
- 将整个图表示成低维、实值、稠密的向量形式。

区别

- 初代GNN 通过**循环迭代**更新节点的特征，而GCN 通过**堆叠层**更新节点特征。

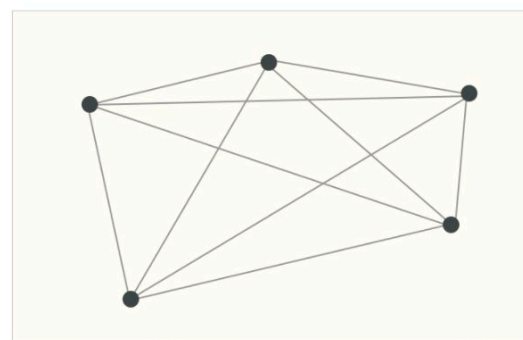
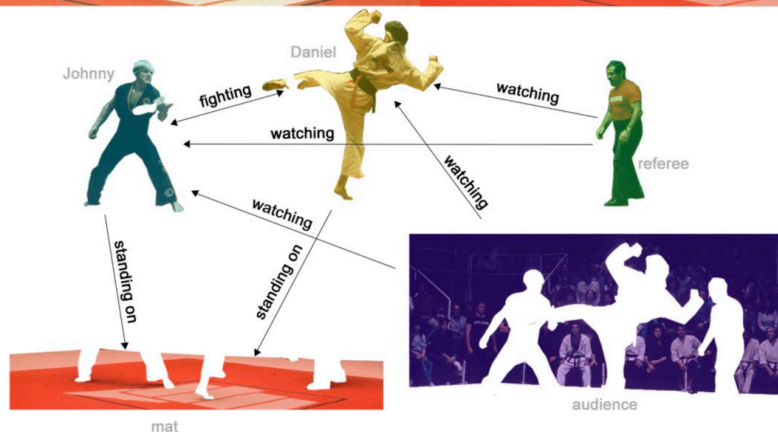
图上的深度学习

Deep Learning over Graph

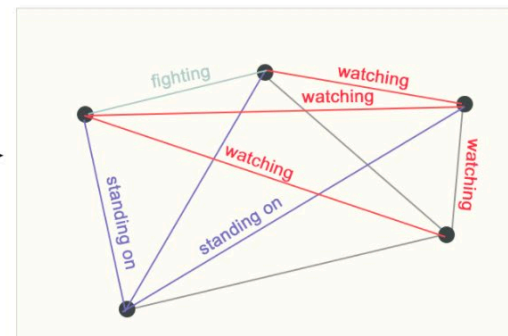
- 基本概念
- 图神经网络
- 图卷积网络
- 典型应用

图神经网络的典型应用

- 计算机视觉—图像生成场景图生成 (scene graph generation)



Input: fully connected graph, unlabeled edges

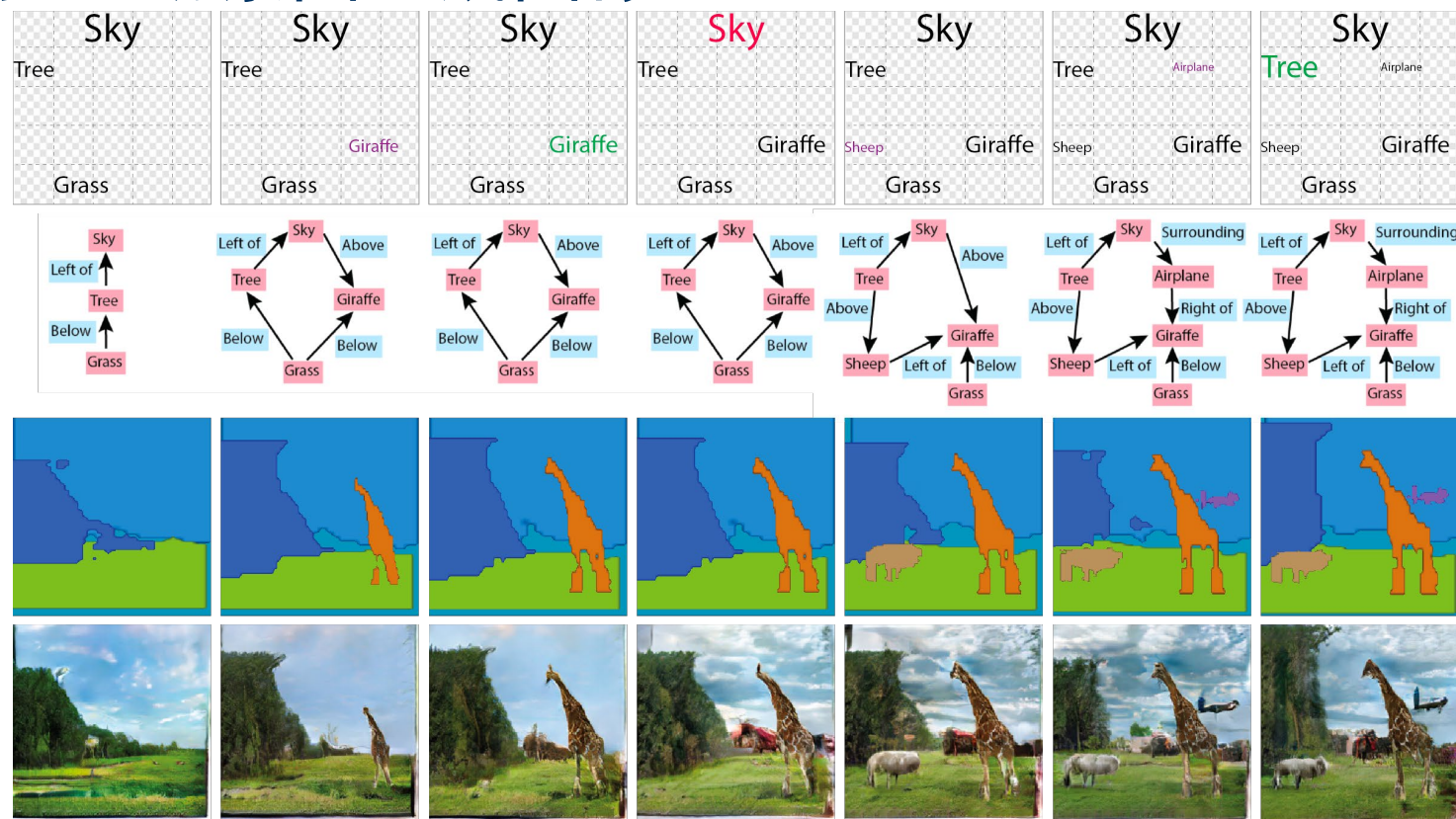


Output: labels for edges

- 场景中的每个类别都被抽象为图中的一个节点
- 场景图生成的目标是生成一个图以及图中两两节点之间的关系能尽可能描述图像的内容

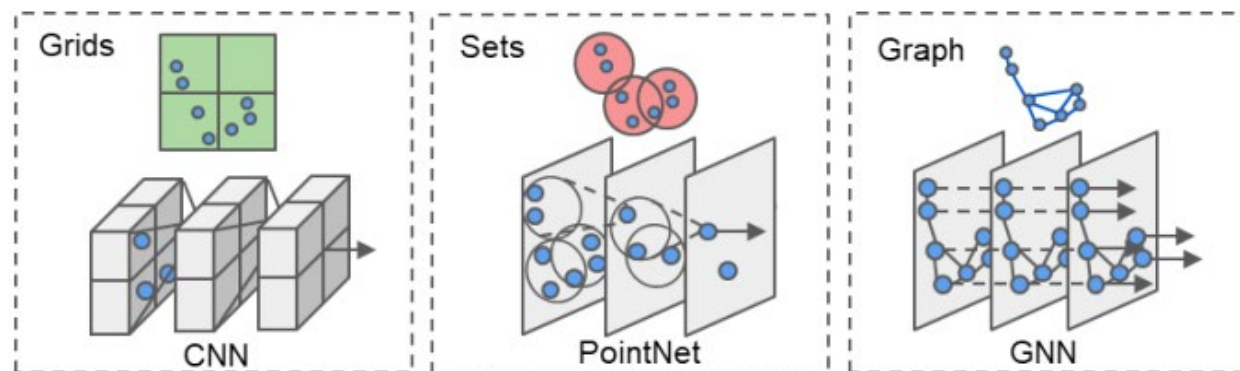
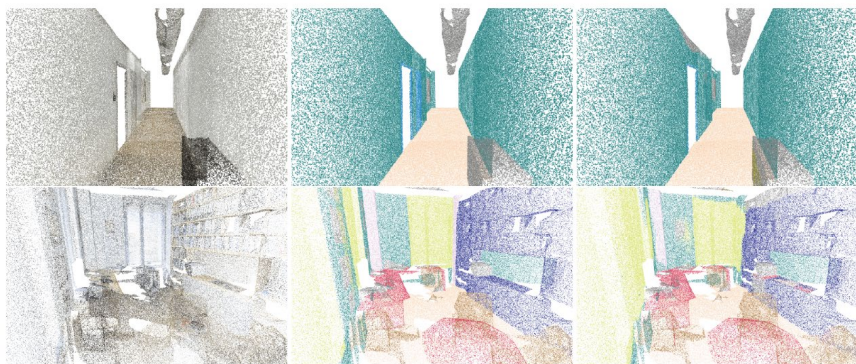
图神经网络的典型应用

• 计算机视觉—场景图生成图像

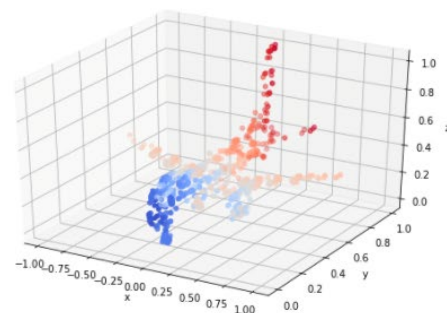


图神经网络的典型应用

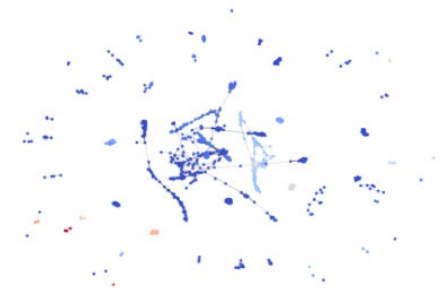
- 计算机视觉—点云分类（point cloud classification）



- GNN特别适合处理点云这类本身就不规则的数据



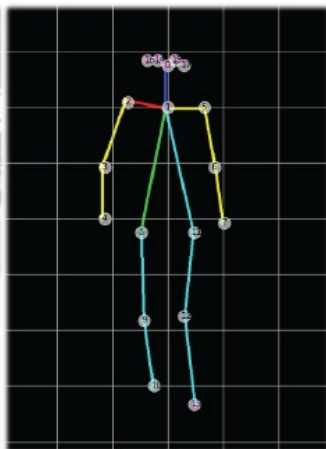
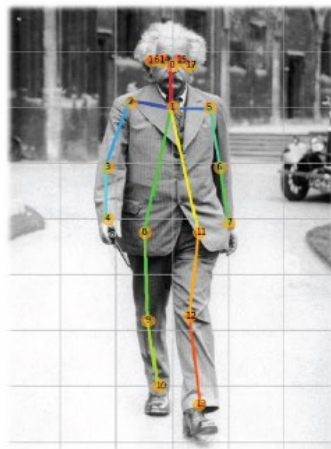
Airplane; 1000 points; PointNet Input



Graph Constructed based on Points; GNN Input

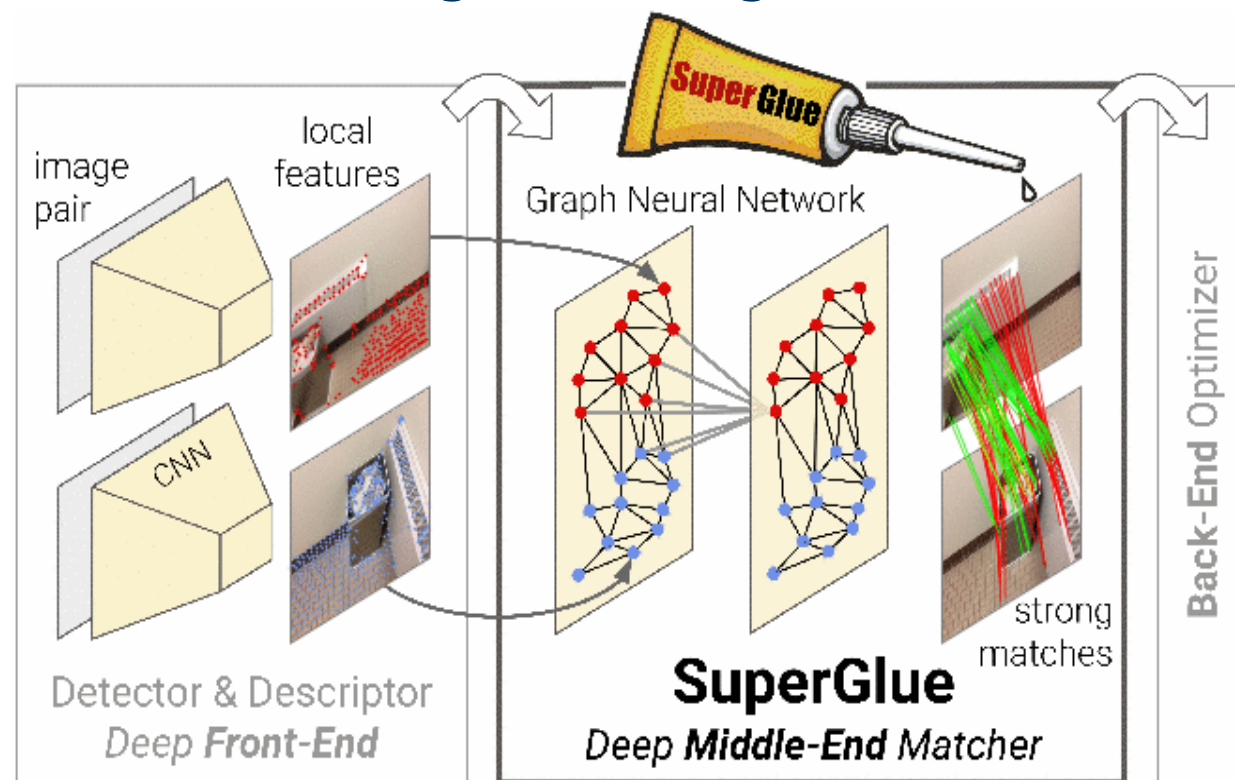
图神经网络的典型应用

- 计算机视觉—姿态估计 (pose estimation)
- 姿态的关节点天然适合作为图的节点



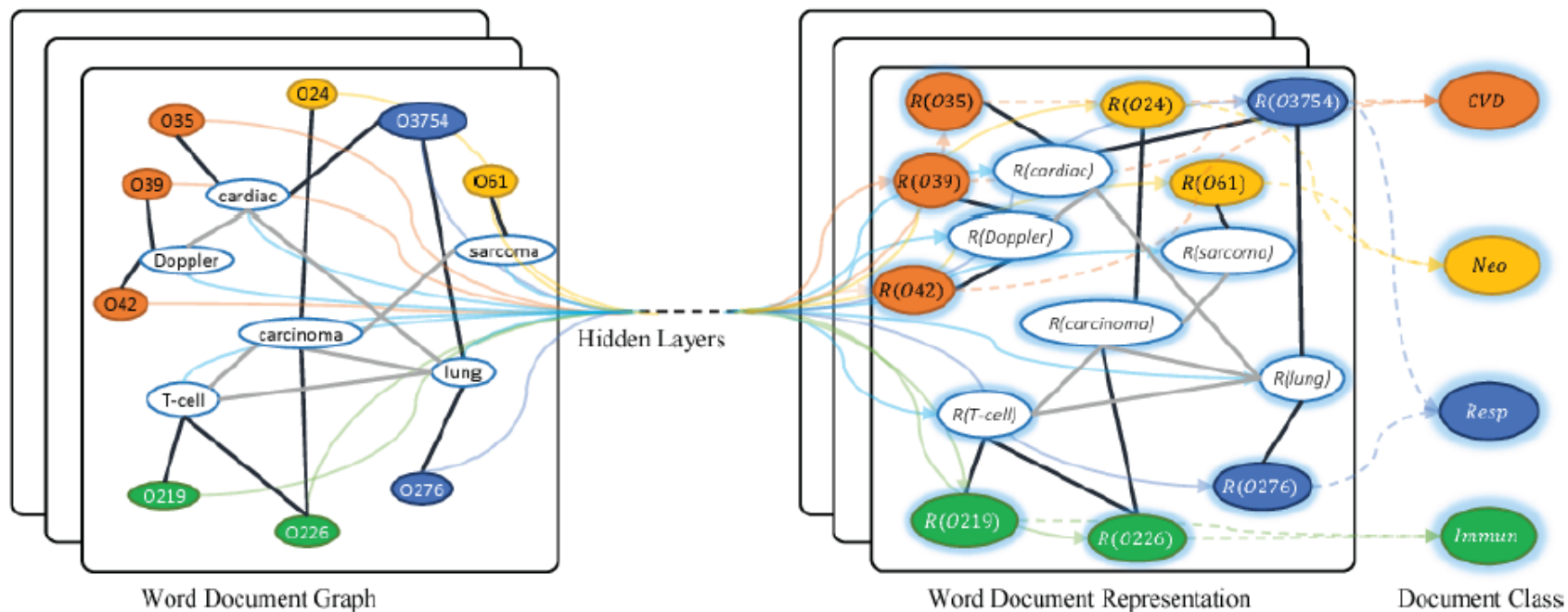
图神经网络的典型应用

- 计算机视觉—图像匹配 (image matching)



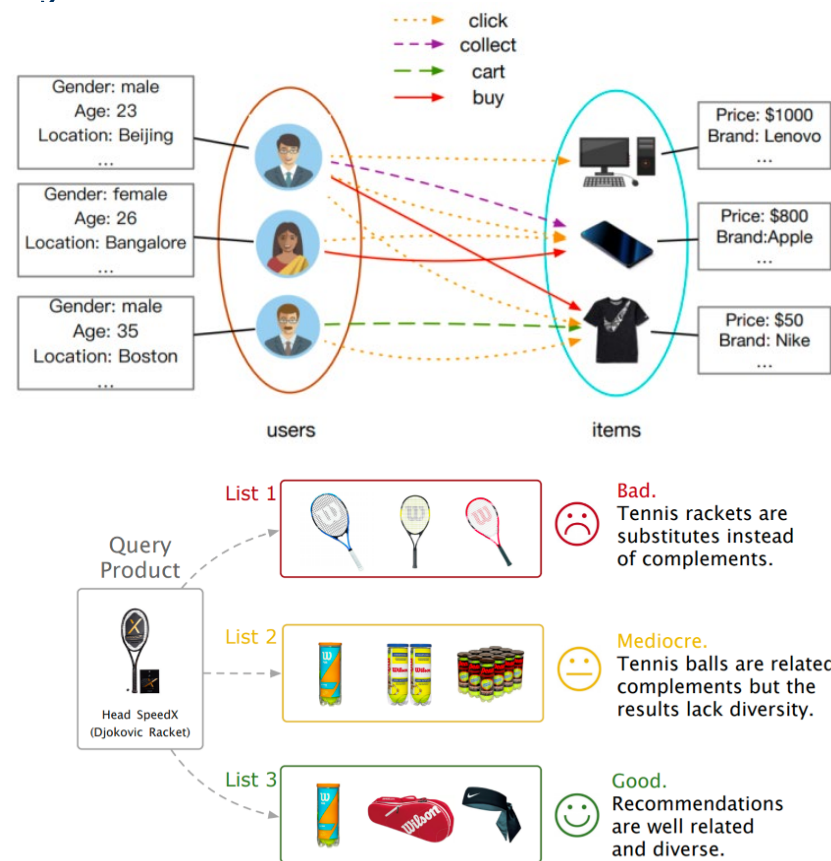
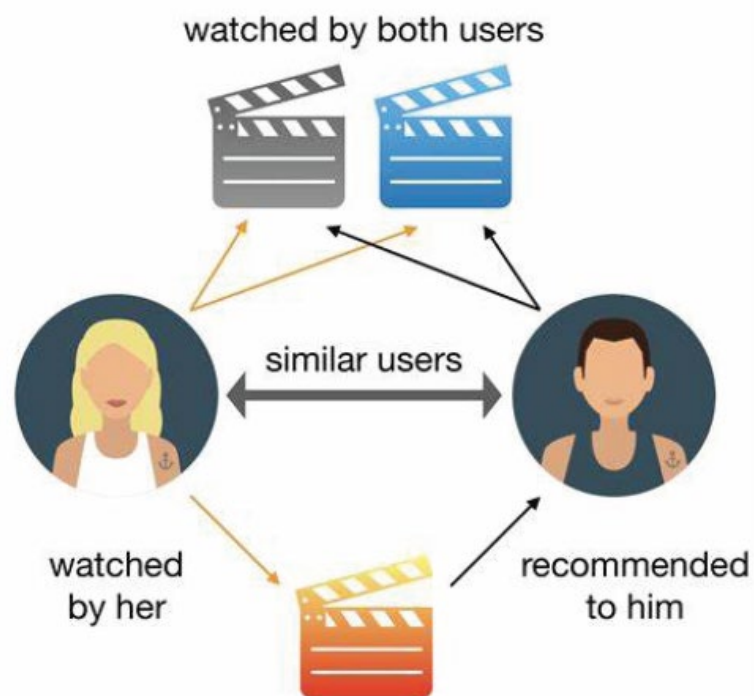
图神经网络的典型应用

- 自然语言处理—文本分类 (text classification)



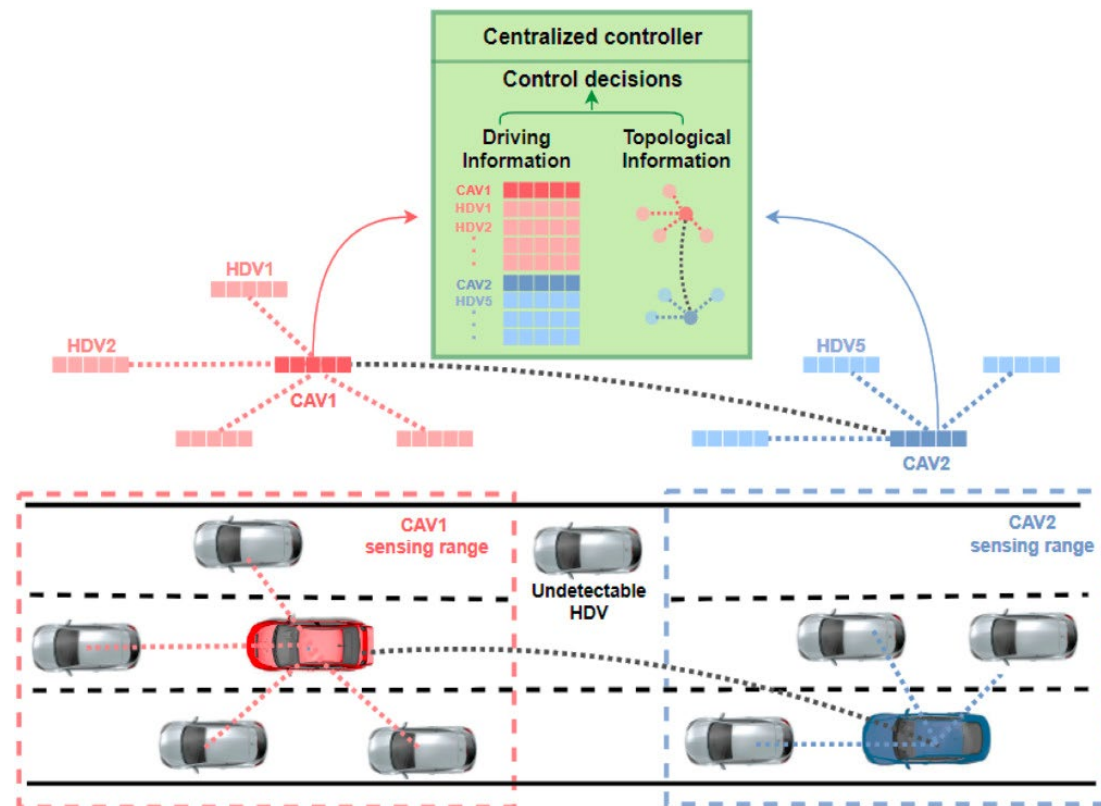
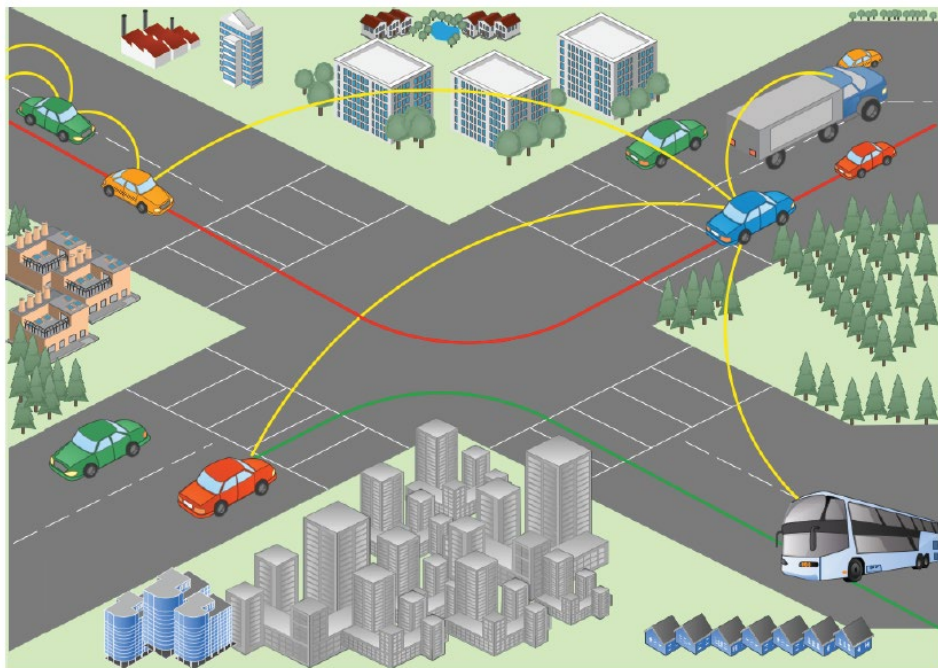
图神经网络的典型应用

• 网络应用：推荐系统（recommendation systems）



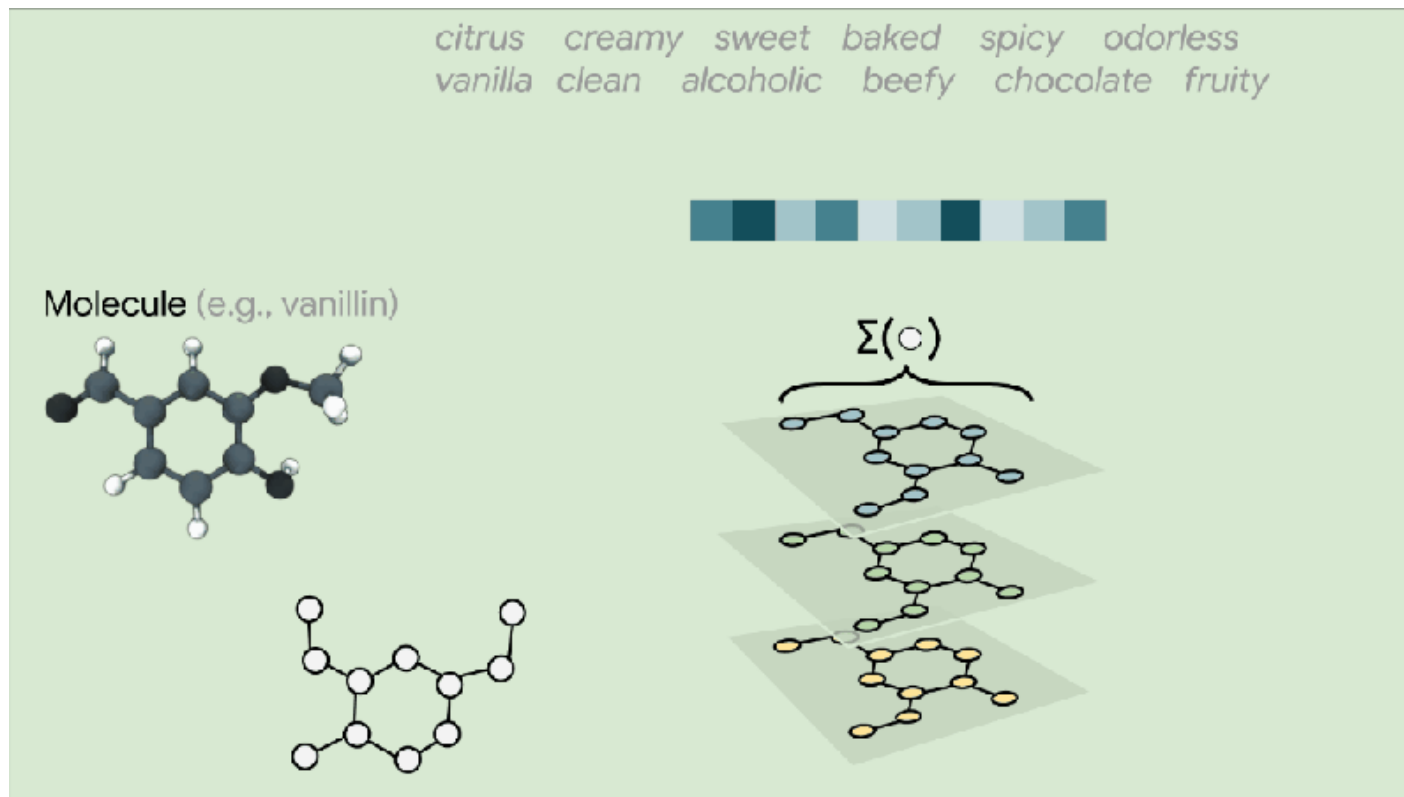
图神经网络的典型应用

- 智能交通：车联网（internet of vehicles）



图神经网络的典型应用

- 生物：分子分类



扩展阅读

1. A Gentle Introduction to Graph Neural Networks (Basics, DeepWalk, and GraphSage)
2. Structured deep models: Deep learning on graphs and beyond
3. Representation Learning on Networks
4. Graph neural networks: Variations and applications
5. <http://snap.stanford.edu/proj/embeddings-www/>
6. Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications
7. <https://math.stackexchange.com/questions/3035968/interpretationof-symmetric-normalised-graph-adjacency-matrix>
8. <https://distill.pub/2021/gnn-intro/>