



GNN图神经网络

作者: Calvin

QQ: 179209347

Mail: 179209347@qq.com

介绍

笔记简介:

- 面向对象: 深度学习初学者
- 依赖课程: **线性代数, 统计概率**, 优化理论, 图论, 离散数学, 微积分, 信息论

知乎专栏:

<https://zhuanlan.zhihu.com/p/693738275>

Github & Gitee 地址:

https://github.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning

https://gitee.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning

* 版权声明:

- 仅限用于个人学习
- 禁止用于任何商业用途

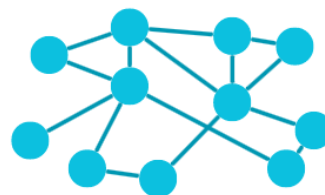
图神经网络定义

图神经网络 (Graph Neural Networks) 是一种基于图结构的深度学习方法。

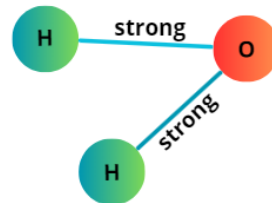
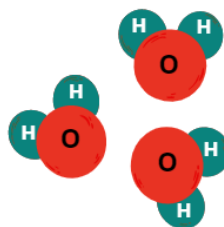
- 传统的神经网络主要用于处理规则结构的数据，如图像、文本等，而图神经网络则专门设计用于处理图结构数据，如社交网络、分子结构等。
- 图神经网络的核心思想是利用节点之间的关系来丰富节点的表示。通过在图上定义节点之间的连接关系，图神经网络可以利用节点的邻居信息来更新节点的表示，从而实现对整个图的信息传递和学习。

图神经网络几个核心功能：

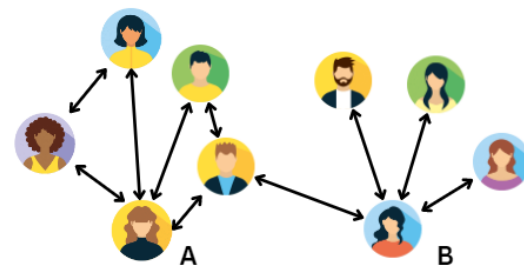
- 节点表示** (Node Embedding)：将每个节点映射到一个低维向量空间中，以便进行后续的计算。
- 图结构表示** (Graph Structure Representation)：表示整个图的拓扑结构，包括节点之间的连接关系。
- 消息传递** (Message Passing)：节点通过与其邻居节点交换信息来更新自身的表示，从而实现信息在图上的传递。



Brain networks



Chemical compounds

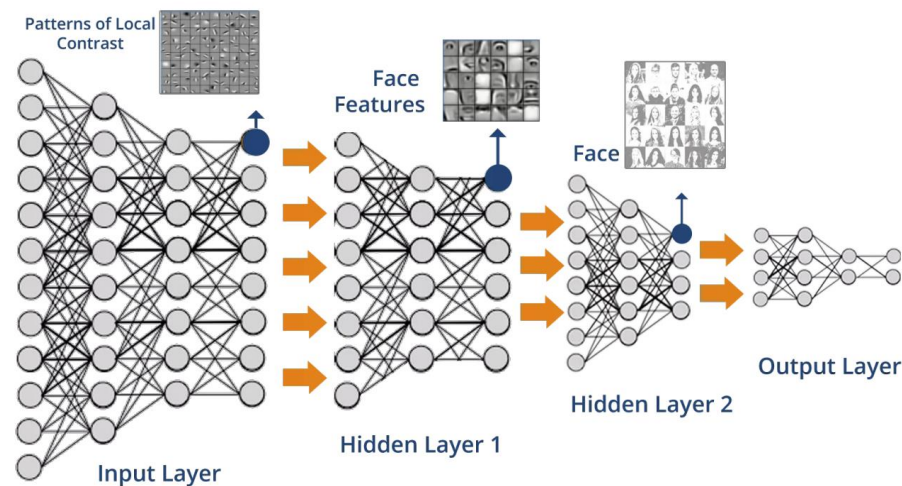
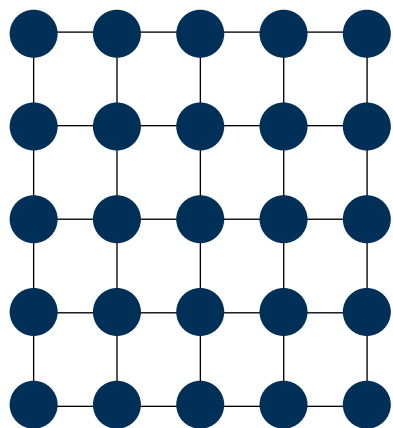


Social networks

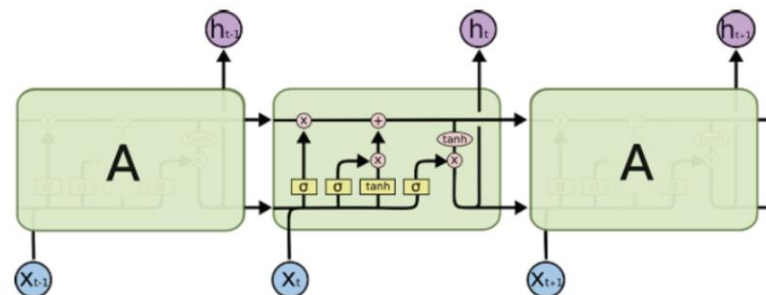
传统神经网络

- 传统神经网络设计用于简单的序列和网格。

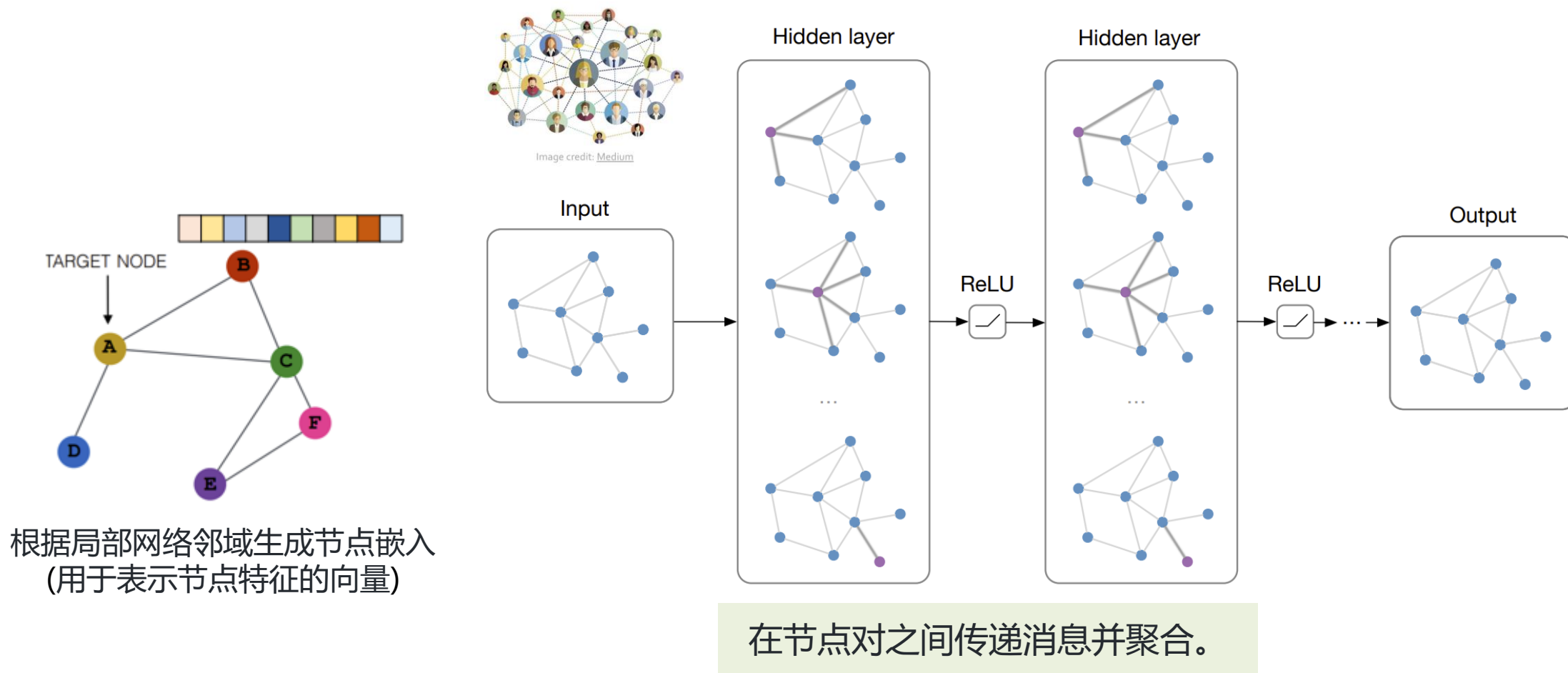
IMAGENET



Speech/Text



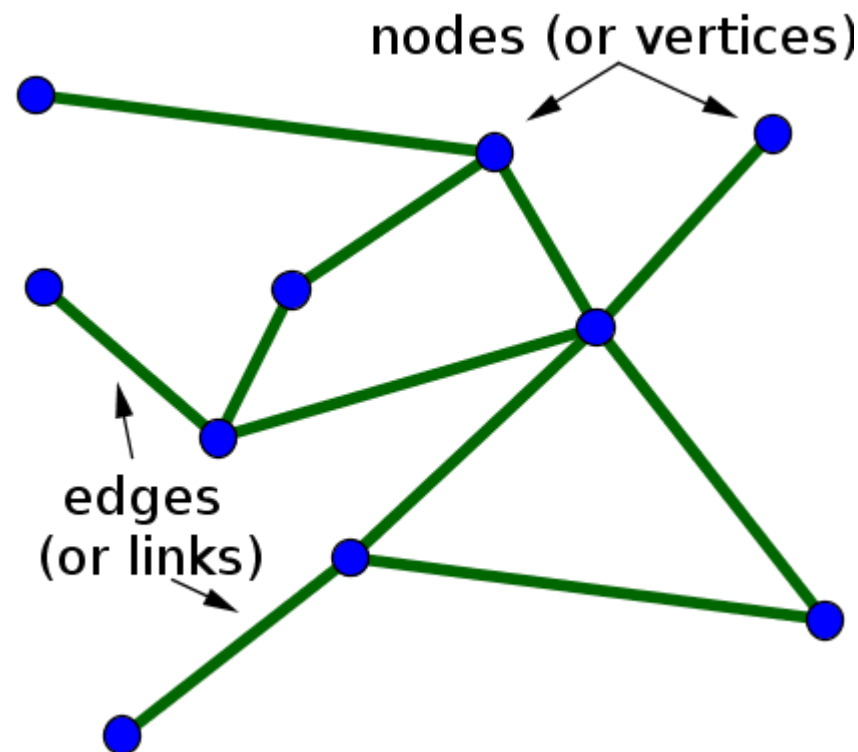
图神经网络 (Graph Neural Networks)



图、节点、边

图 (Graph) 是由节点 (Node) 和边 (Edge) 组成的一种数据结构, 用于表示对象之间的关系。

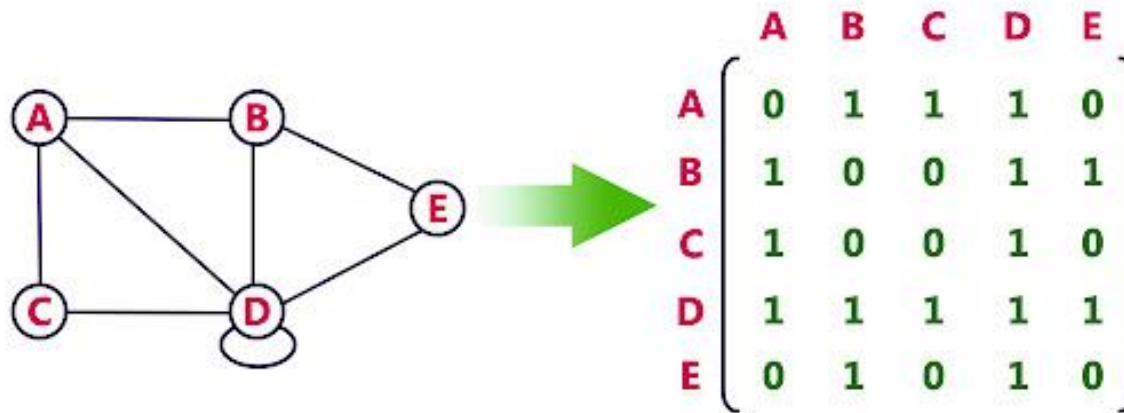
- **节点 (Node) :**
 1. 节点也称为顶点 (Vertex), 是图中的基本元素。
 2. 节点可以表示各种实体, 如人物、地点、物品等。
 3. 在图中, 节点通常用圆圈或者方框表示, 节点之间的连接由边表示。
- **边 (Edge) :**
 1. 边是节点之间的连接线, 用于表示节点之间的关系。
 2. 边可以是有向的 (箭头表示方向) 或者无向的 (双向连接)。
 3. 边可以具有权重, 用于表示节点之间的关联强度或者距离等信息。
- **图 (Graph) :**
 1. 图是由节点和边组成的数据结构, 用于描述对象之间的关系。
 2. 图可以是有向图 (Directed Graph) 或者无向图 (Undirected Graph)。
 3. 图可以是带权图 (Weighted Graph), 其中边具有权重。
 4. 图可以用于建模各种实际问题, 如社交网络、路线规划、网络拓扑等。



邻接矩阵

邻接矩阵是图论中一种常用的表示图结构的方法。在邻接矩阵中，图中的顶点用矩阵的行和列来表示，矩阵的元素表示顶点之间的连接关系。对于一个有 n 个顶点的图，邻接矩阵是一个 $n \times n$ 的矩阵。

- 在无向图中，如果顶点 i 和顶点 j 之间有边相连，则邻接矩阵中第 i 行第 j 列和第 j 行第 i 列的元素值为1；否则为0。
- 在有向图中，如果从顶点 i 到顶点 j 有一条有向边，则邻接矩阵中第 i 行第 j 列的元素值为1；否则为0。

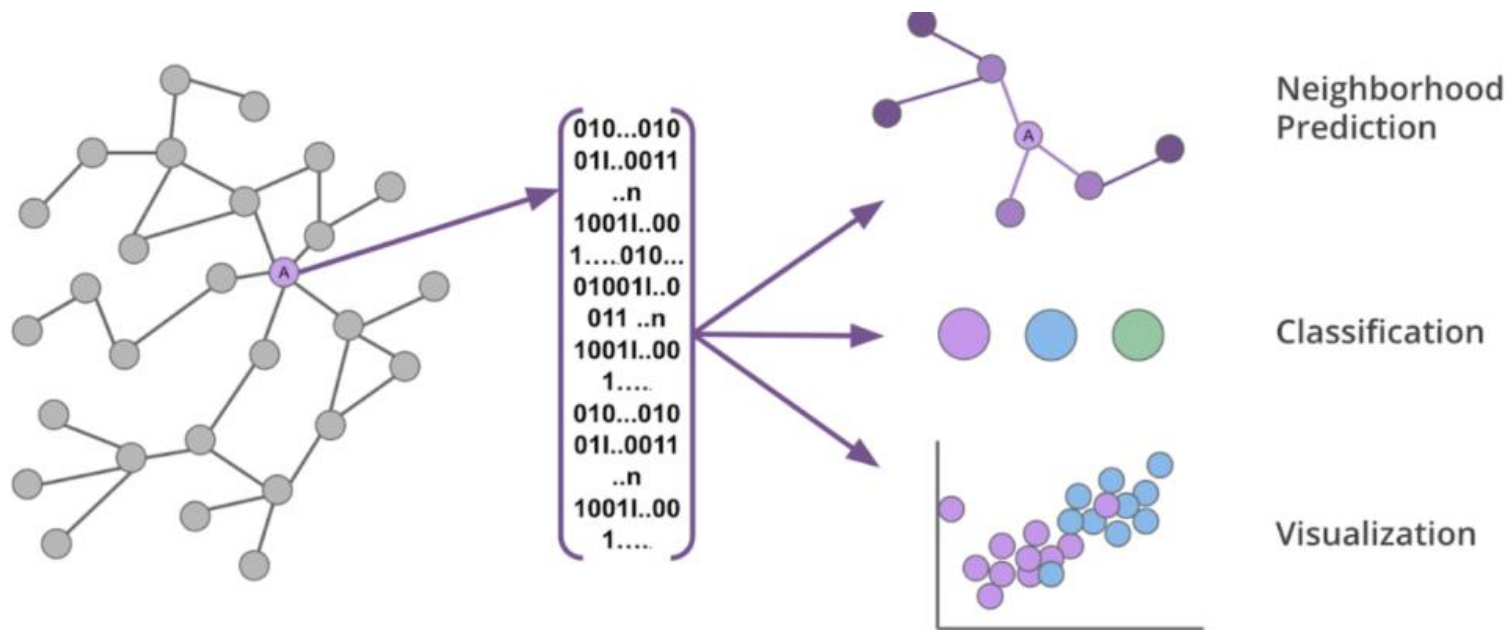


图表示学习

图表示学习 (representation learning) 专注于将数据表示为图结构以便进行学习和推理。这种方法在处理非结构化数据和关系数据时非常有用，例如社交网络、分子结构、推荐系统等领域。

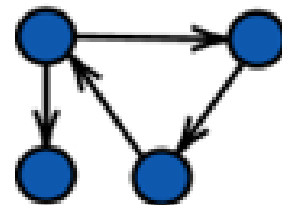
常见的图表示学习方法：

- 节点嵌入方法
- 图卷积神经网络 (GCN)
- 图注意力网络 (GAT)
- 图自编码器

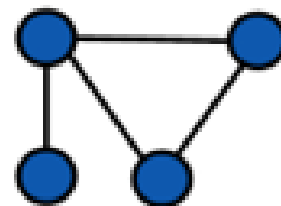


图类型

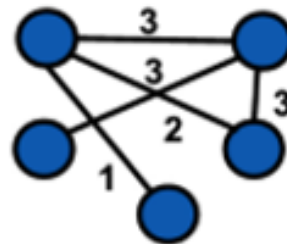
- 无向图: Undirected Graph
- 有向图: Directed Graph
- 权重图: Weighted Graph
- 异质图: Heterogeneous Graph
- 动态图: Dynamic Graph



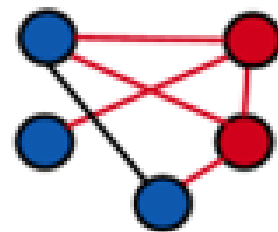
无向图



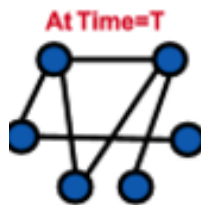
有向图



权重图



异质图

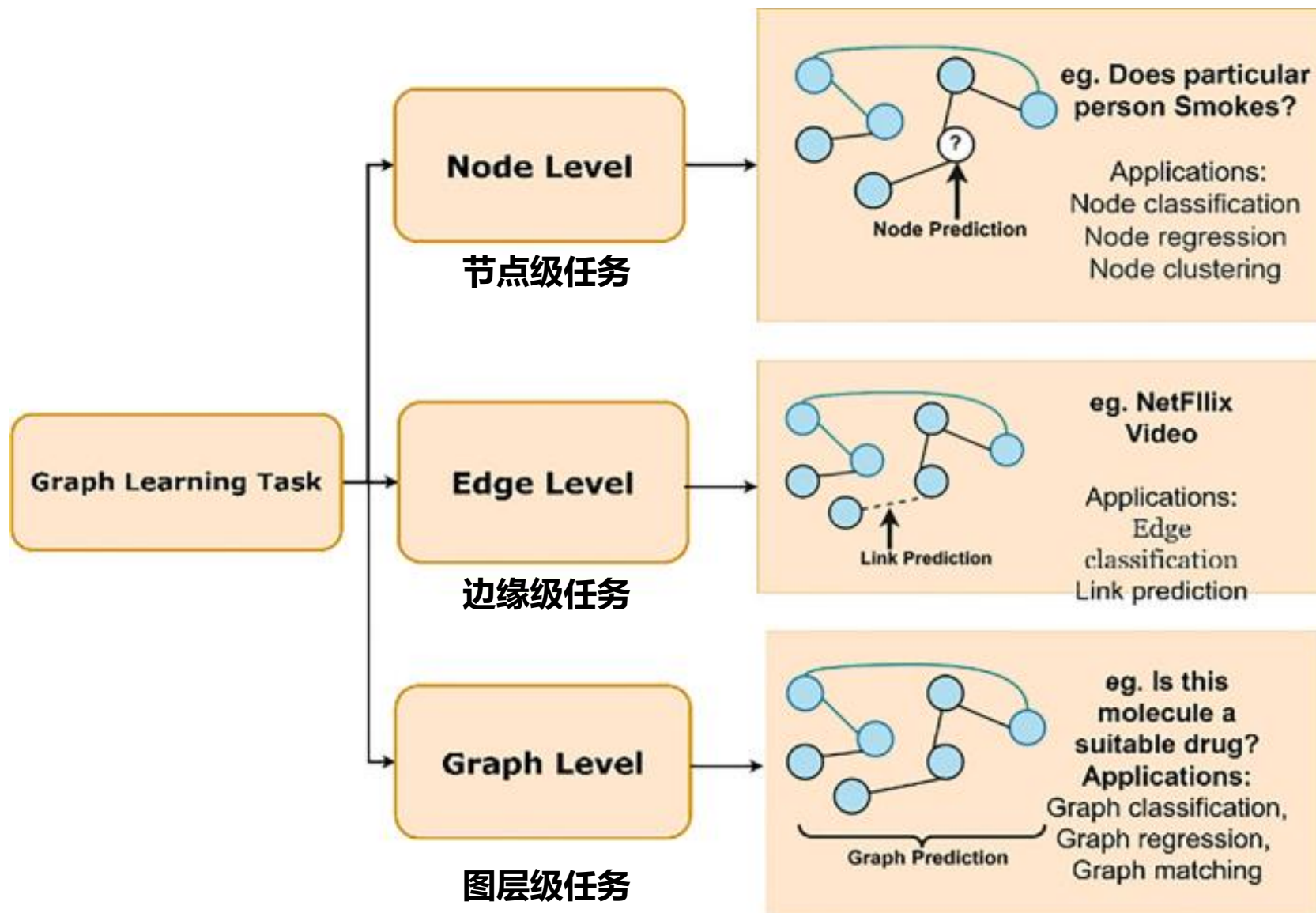


静态图



动态图

图任务



图特征

图特征是传统图机器学习/图数据挖掘的输入，通常依赖人类的先验知识。

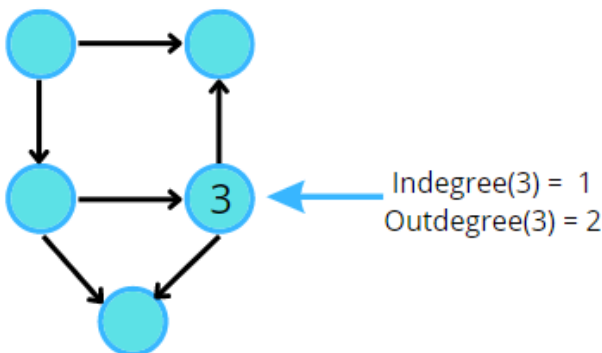
中心度 (Node Centrality)

节点的度是指连接到节点的边的个数：

$$d_u = \sum_{v \in V} A_{u,v}$$

在有向图中，节点的度又分为：

- 入度 (In-degree)
- 出度 (Out-Degree)



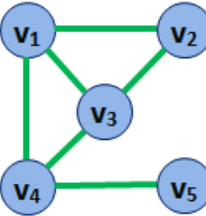
特征向量度 (Eigenvector Centrality)

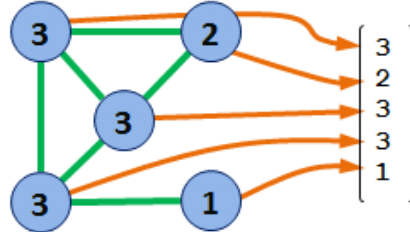
节点的度仅能度量节点邻居的个数，节点的特征向量度则在度的基础上进一步考虑节点邻居的重要性：

$$x_u = \frac{1}{\lambda} \sum_{v \in V} A_{u,v} x_v$$

等价于：

$$\lambda x = Ax$$



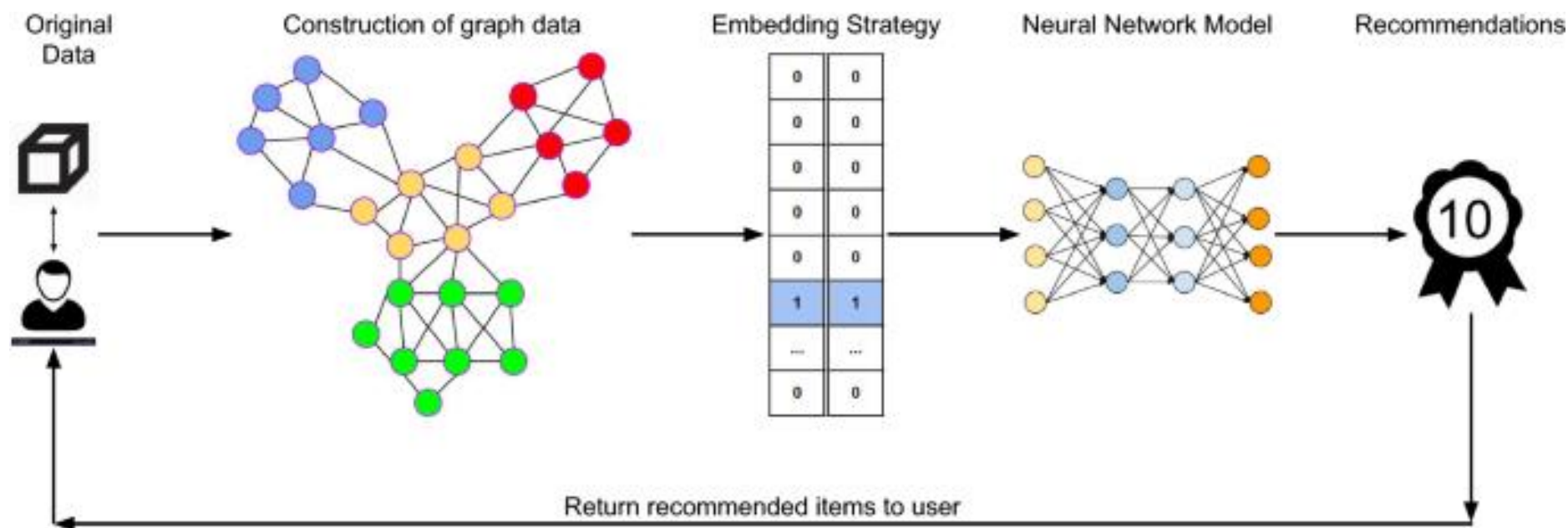
$$A = \begin{bmatrix} - & 1 & 1 & 1 & 0 \\ - & 1 & 0 & 0 & \\ - & 1 & 0 & & \\ - & 1 & & & \\ - & & & & \end{bmatrix}$$


$$A \times x = \begin{bmatrix} - & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & - & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & - & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & - & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0x3 + 1x2 + 1x3 + 1x3 + 0x1 \\ 1x3 + 0x2 + 1x3 + 0x3 + 0x1 \\ 1x3 + 1x2 + 0x3 + 1x3 + 0x1 \\ 1x3 + 0x2 + 1x3 + 0x3 + 1x1 \\ 0x3 + 0x2 + 0x3 + 1x3 + 0x1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 6 \\ 8 \\ 7 \\ 3 \end{bmatrix}$$

应用领域 - 推荐系统

在推荐系统中使用GCNs的一般步骤如下：

1. 构建用户-物品交互图：将用户和物品表示为图中的节点，将用户-物品交互关系表示为图中的边，构建一个二部图。
2. 学习节点表示：通过多层的图卷积层，学习节点的表示，将用户和物品的特征信息与图结构相结合。
3. 推荐生成：通过学习到的节点表示，可以进行推荐生成，找到用户可能感兴趣的物品。

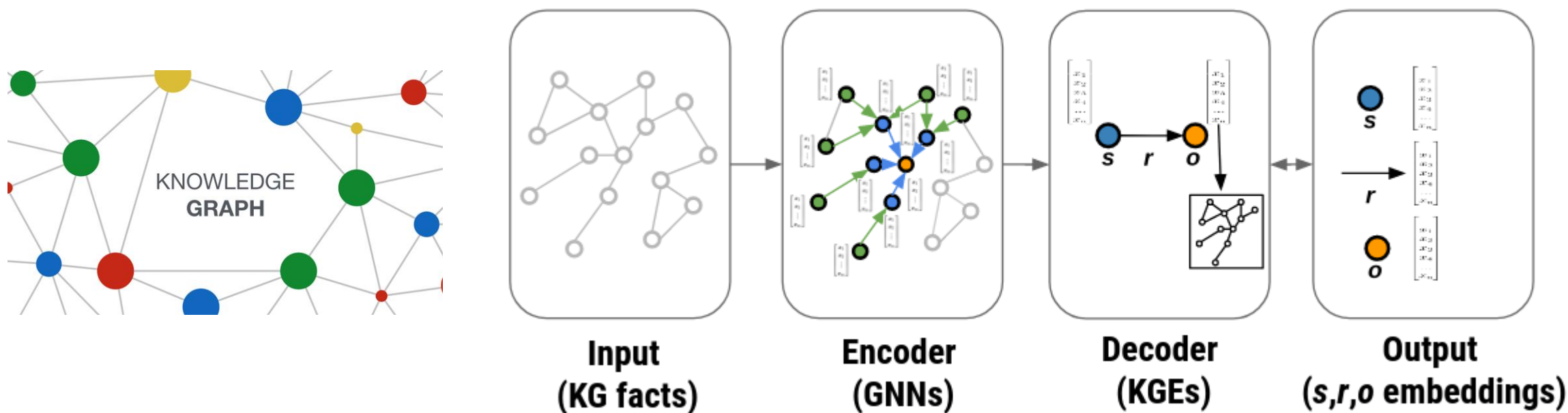


应用领域 - 知识图谱

在知识图谱中，图神经网络被广泛应用于节点分类、链接预测、图分类等任务。知识图谱是一种用于表示实体之间关系的图结构数据，其中节点代表实体（如人物、地点、概念等），边代表实体之间的关系。

在知识图谱中，图神经网络可以用于以下任务：

- 1.节点分类 (Node Classification)**：给定图中的节点，预测节点所属的类别。
- 2.链接预测 (Link Prediction)**：预测图中可能存在但尚未观察到的边。
- 3.图分类 (Graph Classification)**：对整个图进行分类，例如将一个知识图谱分类为不同的领域。
- 4.图生成 (Graph Generation)**：生成符合特定规则或约束的新图。

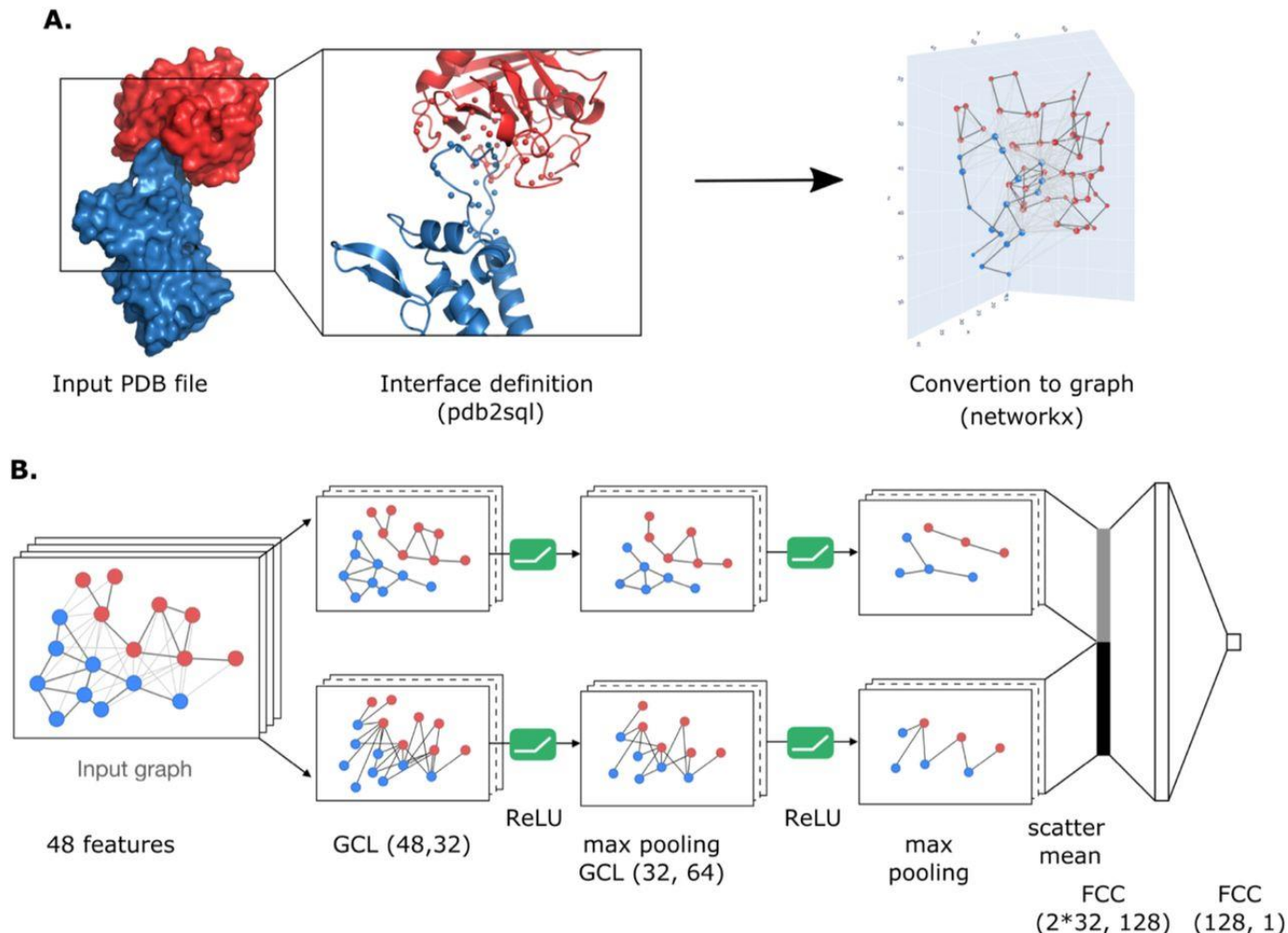


应用领域 - 蛋白质预测

在蛋白质预测中，蛋白质结构可以被视为一个图，其中节点代表氨基酸残基，边代表它们之间的相互作用。利用图神经网络来处理这种图结构数据，可以帮助预测蛋白质的结构和性质。

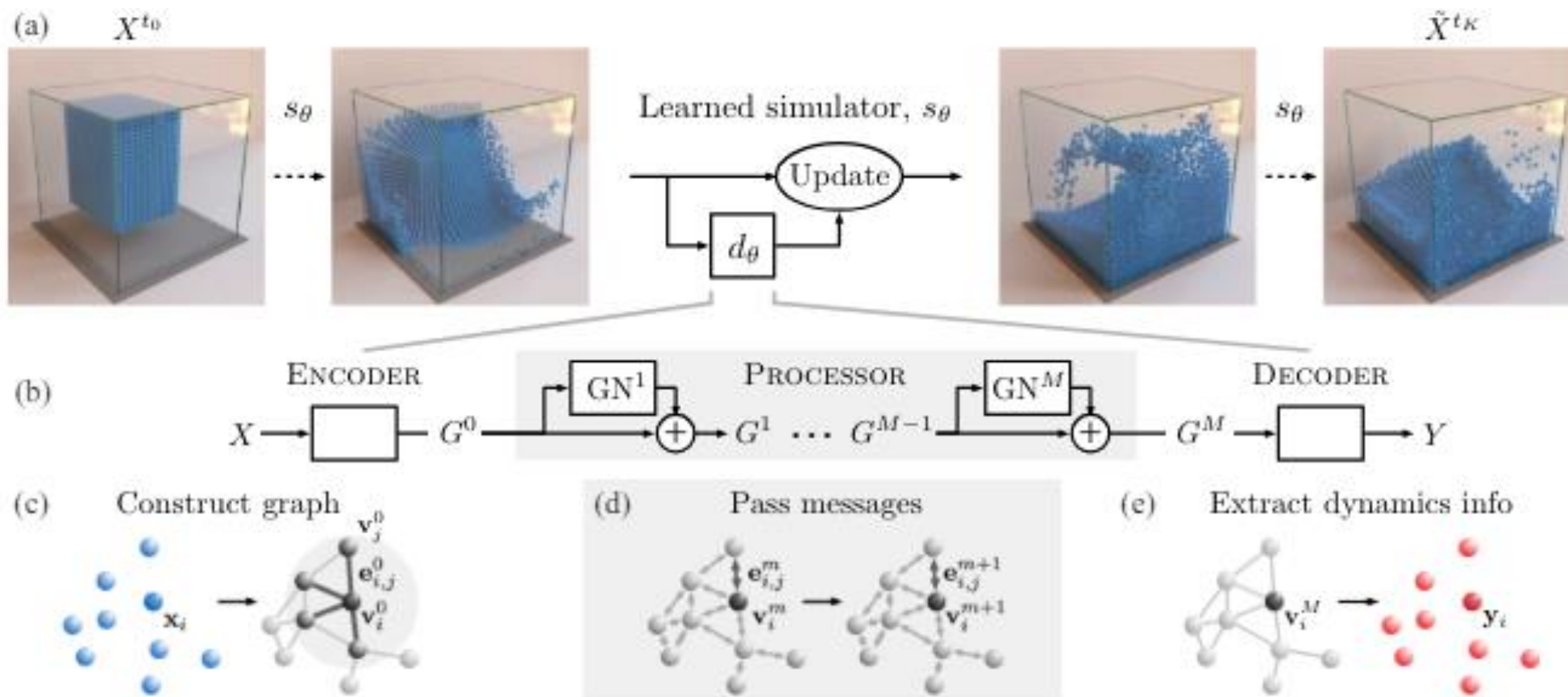
在蛋白质预测中，GNN可以用于以下几个方面：

- 蛋白质结构预测
- 蛋白质功能预测
- 蛋白质相互作用预测
- 药物设计



应用领域 - 物理模型

GNN可以学习模拟涉及流体、刚性固体和可变形材料相互作用的各种具有挑战性的物理领域。用粒子表示物理系统的状态，这些粒子被表达为图中的节点，并通过学习的消息传递计算动态。





Thank

You