# A New Model for Learning in Graph Domains

## 简介

首次提出了图神经网络的构想，参考了循环神经网络。

## 图的定义与表示

一个图由三部分构成：节点集合N，边集合E，节点的label或者说是属性向量集合L。

## 训练数据格式

格式：

一条训练数据也由三部分构成，图G，图中某个节点，该节点对应的target，也就是这条数据的标签。

target根据具体的问题拥有不同的格式，比如分类问题可能就是0/1，或者独热码；回归问题可能就是一个数值。

## 模型的计算

模型的最终目的就是根据，计算出一个，使得尽量的接近真实的标签。

具体的计算过程又分为两部分，一部分可以理解为特征提取，计算出一个特征向量；另外一部分就是比较常见的分类和回归模型，通过特征向量计算得到。

分解后的计算公式如下：

## 特征向量计算

i节点的特征向量两种计算方式：

其中：

是节点i的属性向量

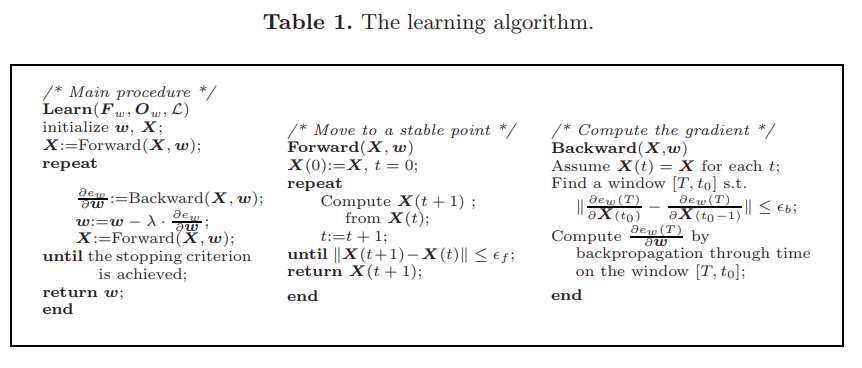
是i的邻居节点的特征向量

是i的邻居节点的属性向量。

这种方式单独计算了节点i与每个邻居节点之间的信息，然后综合起来。

## 优化学习方式

通过多次的迭代学习之后，趋近于，也就是说特征向量的计算趋于平稳。



流程：

初始化参数w和状态变量X

前向迭代计算至X趋于稳定

重复：

反向传播，计算梯度

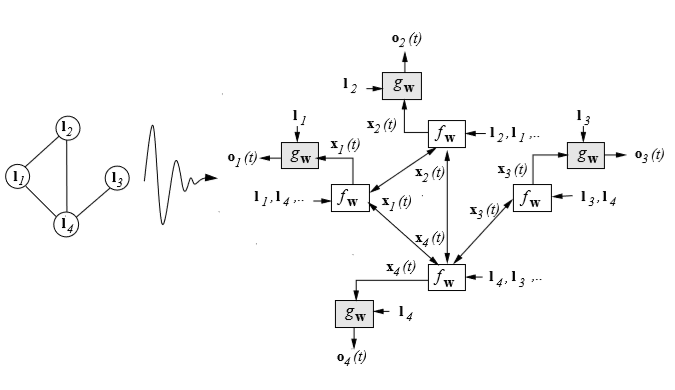
更新参数w

重新进行前向迭代计算，至X趋于稳定

直到：达到停止条件

与传统的神经网络的学习算法只差在 前向迭代计算使X趋于稳定 这一步。

如下图，每个节点的特征向量x的计算都需要依赖于其所有连接节点的特征向量。



## 学习算法

# Graph Neural Networks for Ranking Web Pages

## 简介

将图神经网络应用于网页排名问题，网页代表节点，网页间的引用代表边。

## 扩展

提出一种具体的计算公式：

是前向传播网络，输入是s+n维数据，输出是s维

