

图卷积与图滤波器:

类比实函数的卷积与 Fourier 变换的关系, 即 Fourier 变换的时域卷积定理

$$\begin{aligned} f_1(t) * f_2(t) \\ = \mathcal{F}^{-1}(F_1(w) \cdot F_2(w)), \end{aligned} \quad (2.13)$$

定义如下形式的图卷积

$$(f * g)_G = U(U^T f \odot U^T g), \quad (2.14)$$

注意, 图傅里叶变换不是由函数的傅里叶变换严格推导而来, 亦不再有时域、频域的卷积性质。此外, 通常所说的神经网络中的卷积操作 (例如 CNN 中的卷积操作) 与这里定义的卷积并非完全一致, 神经网络的卷积操作有时也被成为滤波操作。为了进一步得到更加细致的理论支撑, 考虑信号处理中的卷积操作:

$$\begin{aligned} f_{out}(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}_{in}(\xi) \hat{h}(\xi) e^{2\pi i \xi t} d\xi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_{in}(\tau) h(t - \tau) d\tau \\ &= (f_{in} * h)(t), \end{aligned} \quad (2.15)$$

其中, ξ 的单位为 Hz, $\hat{h}(\xi)$ 是频率响应函数。类似的, 定义图上的卷积操作:

$$f_{out}(i) = \sum_{k=1}^n \hat{f}_{in}(\lambda_k) \hat{h}(\lambda_k) u_k(i), \quad (2.16)$$

这里的 $u_k(i)$ 是图拉普拉斯矩阵的特征向量的第 i 个元素, $\hat{h}(\lambda_k)$ 表示图信号的频率响应值, $\hat{f}_{in}(\lambda_k)$ 是图信号在频域 λ_k 上的强度。其矩阵形式为:

$$\begin{aligned} f_{out} \\ &= [u_1, \dots, u_n] \begin{bmatrix} \hat{h}(\lambda_1) \hat{f}_{in}(\lambda_1) \\ \dots \\ \hat{h}(\lambda_n) \hat{f}_{in}(\lambda_n) \end{bmatrix} \\ &= [u_1, \dots, u_n] \text{diag}[\hat{h}(\lambda_1), \dots, \hat{h}(\lambda_n)] \begin{bmatrix} \hat{f}_{in}(\lambda_1) \\ \dots \\ \hat{f}_{in}(\lambda_n) \end{bmatrix} \\ &= [u_1, \dots, u_n] \text{diag}[\hat{h}(\lambda_1), \dots, \hat{h}(\lambda_n)] [U^T f_{in}] \\ &= U \Lambda_{\hat{h}} U^T f_{in} \\ &= H f_{in}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

于此, 定义了图的一个滤波器 $H = U \Lambda_{\hat{h}} U^T \in R^{n \times n}$, 即一个 R^n 空间到 R^n 空间的映射, 这里的 $\Lambda_{\hat{h}}$ 称为图滤波器 H 的频率响应矩阵。

$$\Lambda_{\hat{h}} = \text{diag}[\hat{h}(\lambda_1), \dots, \hat{h}(\lambda_n)] = \begin{bmatrix} \hat{h}(\lambda_1) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \hat{h}(\lambda_n) \end{bmatrix}, \quad (2.18)$$

考虑式 (2.14) 所定义的图卷积操作，多数文章中的 Graph 卷积公式为

$$(f * h)_G = U((U^T h) \odot (U^T f)), \quad (2.19)$$

这里的 h 与上述 $\Lambda_{\hat{h}}$ 形式一致。

如果进一步考虑图拉普拉斯矩阵 $L = U\Lambda_L U^T$ ，这里的图拉普拉斯矩阵实际上也是一个由 Λ_L 为频率响应矩阵的图滤波器。从变换的角度来说，满足上述性质的矩阵 H 实际上描述了一种作用在图节点一阶子图上的变换，这样的变换称为**图 G 的图位移算子**。

综合上述内容，另记一个滤波器符号 \mathcal{G}_θ 来表示图的滤波操作，则有如下形式化的基于谱的图卷积操作：

$$x_{*G} \mathcal{G}_\theta = UH_\theta U^T x \quad (2.20)$$

基于谱的 ConvGNN 的滤波器设计都遵循该卷积形式，关键是 H_θ 的选择。