2.1. 基于谱的卷积图神经网络。

图上拉普拉斯算子与 Fourier 变换

多元函数的拉普拉斯算子如下

$$\Delta f = \nabla^2 f = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}, \tag{2.1}$$

若从差分角度考虑如下近似

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &\approx \frac{f'(x) - f'(x-1)}{1} \\ &\approx f(x+1) + f(x-1) - 2f(x), \end{aligned} \tag{2.2}$$

则可以从**形式上**定义**离散状态下拉普拉斯算子**

$$\begin{aligned} \Delta f &= \sum_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_i^2} \\ &= \sum_i f(x_i+1;x) + f(x_i-1;x) - 2nf(x) \\ &= \sum_i f(x_i+1;x) - f(x) + f(x_i-1;x) - f(x), \end{aligned} \tag{2.3}$$

若从图的角度来说，f被视为一个图信号，假设一个图网络有n个节点。//*例如一个社交网络，每个节点是一个人，而每个人就有如年龄、性别等属性，这样所有节点的年龄就可以作为一个图信号。//* 于是从图的角度来说，将函数$f(x_i+1;x)$，$f(x_i-1;x)$各项视为可达的邻居节点的对应信号，则可以定义**图节点的拉普拉斯算子**

$$\begin{aligned} \Delta f_i &= \sum_{j=1}^{n} w_{ij}\left(f_i - f_j\right) \\ &= d_i f_i - \sum_{j=1}^{n} w_{ij} f_j, \end{aligned} \tag{2.4}$$

这里的权重意味着可达性，不可达即为 0，可达即为 1。进一步考虑**图的拉普拉斯算子**，则有如下矩阵形式的表达

$$\Delta f = \begin{pmatrix} \Delta f_1 \\ \dots \\ \Delta f_n \end{pmatrix} = (D - W)f = Lf, \tag{2.5}$$

//*注意，从无向图角度来说，此处定义的权值矩阵有* $W = A$，*于是* $L = D - W = D - A$，*即*

为拉普拉斯矩阵的一种定义，该定义被称为 Combinatorial Laplacian，不同形式的 Laplacian 将在后续内容中介绍。//

这意味着对图来说，拉普拉斯算子与拉普拉斯矩阵有相同的作用；进一步的地，考虑傅里叶变换公式（非周期函数的 Fourier Transform, FT）**（待补 2.1：理论待细化）**

$$F(w)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}f(t)e^{-iwt}dt \tag{2.6}$$

这里，Fourier Transform 可被视为 $f(t)$ 向基函数 e^{-iwt} 投影的过程，$F(w)$表示w对应基上坐标**（待补 2.2： 理论待细化）**。同时，基 e^{-iwt}恰是拉普拉斯算子的特征向量，这里考虑将该算子作用在函数e^{-iwt}上，可以得到

$$\Delta e^{-iwt}=\frac{\partial^2 e^{-iwt}}{\partial t^2}=-w^2e^{-iwt}, \tag{2.7}$$

由广义特征值的定义，这里的e^{-iwt}可以被看作拉普拉斯算子的特征向量。

// 补 2.2：初略思路

通俗的说，函数 e^{-iwt} 可以被视为自变量 w 在实数域 R 上取值一组向量，该向量函数实际上定义了一个无限维的函数空间，而该空间（实际为希尔伯特空间）以该函数作为基（Basis Function）。

在数学里，希尔伯特空间（Hilbert Space）是有限维欧几里得空间的一个推广，是一个完备的内积空间，其定义了一个带有内积的完备向量空间。在希尔伯空间中，一个抽象元素通常被称为向量，它可以是一个复数或者函数。傅立叶分析的一个重要目的是将一个给定的函数表示成一族给定的基底函数的和，而希尔伯特空间为傅立叶分析提供了一种有效的表述方式。

以下将简要叙述该函数空间。

考虑所有的实变量函数组成一个**函数集合** $S=\{x(t)\}$。在该集合上定义如下**内积**

$$\langle x(t),y(t)\rangle=\int_R x(t)y(t)dt \tag{$*1$}$$

如此变得到一个赋范空间 $X=(S,\langle .,.\rangle)$。进一步的，在该空间中定义如下一组**基**

$$E=\{e(t;w)|w\in R\} \tag{$*2$}$$

该集合 E 实际定义了一组无限维基，其中以参数 w 为自变量的函数被称为该空间的基函数。这里的基的存在实际上表明了赋范空间 X 是一个 Hilbert 空间。

回到 FT，令这里的基 $e(t;w)=\exp(-iwt)$。（这里将自然底数的幂次写为 exp (·) 是为了避免与表示基的符号 e 混淆）。 定义函数 $x(t)$ 在该空间中的**坐标**，即函数在基上投影

$$Coordinate(w)=\int_R x(t)\exp(-iwt)\,dt \tag{$*3$}$$

注意，这里是一个无限维空间的坐标。在考虑 Fourier Transform 的定义

$$F(w)=\mathcal{F}\big(f(t)\big)=\int_R f(t)e^{-iwt}dt \tag{$*4$}$$

比较式（*3）与（*4），可以看到 FT 实际上是上述 Hilbert Space 的一个坐标表示，也可被看作函数 $x(t)$ 向基函数 e^{iwt} 的投影。而类比传统三角函数分解，FT 也可以被看作非周期函数与基 $\{e^{iwt}\}$ 上的一个分解。

//

图 Fourier 变换

定义归一化的拉普拉斯矩阵（Symmetric Normalized Laplacian）

$$L=I_n-D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}, \tag{2.8}$$

这里$D^{-\frac{1}{2}}$是节点的度构成的对角矩阵，A是无向图的邻接矩阵。根据式（2.7）的形式，归一化的图拉普拉斯矩阵具有**实对称**半正定性质，于是有分解

$$L=U\Lambda U^T, \tag{2.9}$$

其中是 λ 的特征值对角矩阵，$U=[u_1,\dots,u_n]$对应特征向量，且$U^TU=I$。进一步考虑

$$U^TL=\Lambda U^T, \tag{2.10}$$

与式 (2.7) 类似的，从**形式上**来说，这里 U^T也可以被看作图拉普拉斯算子（即图拉普拉斯矩阵） 的广义的特征向量。于是将**矩阵乘积视为该图空间的内积**，从拉普拉斯矩阵（算子）的角度定义**图的 Fourier 变换**为

$$\hat{f}=U^Tf, \tag{2.11}$$

其逆变换为

$$f = I_n f = UU^T f = U\hat{f}, \tag{2.12}$$

实际上，如果将图信号视为函数，则f应当与各个节点i相关联，即应写为$f(i)$；而频域$\hat{f}$应写为$\hat{f}(\lambda_k)$。