1 递归神经网络

主要参考【1】

1.1 Recurrent graph networks (RecGNNs) 递归图神经网络

**递归神经网络与RecGNN**

从数据形式上来说，递归神经网络通常被分为 结构递归神经网络与时间递归神经网络 两类；其中，结构递归神经网络 即是通常习惯中所称的递归神经网络，而时间递归神经网络更多时候被称为循环神经网络。从逻辑上来说，循环神经网络 递归神经网络。

因此，作为图神经网络最先开始的研究方向之一，RecGNN虽也属于递归神经网络，但其与通常的在时间上展开的RNN不一样，属于一种在空间（图结构）上展开递归神经网络。

RecRNN的基本原理即 在图中的节点上反复应用**相同的参数集**以**提取高级节点表示**。

1.2 Example

**GNN - 1st Generation**

基于信息扩散机制，GNN（Scarselli等人所提出【2】） 通过反复交换邻域信息来更新节点的状态，直到达到稳定的平衡，节点的隐藏状态通过以下方式递归更新：

这里的是一个参数函数， 随机初始化。为了保证收敛，递归函数必须是一个压缩映射。

**Def 1.** 压缩映射（泛函分析）

设为非空的完备度量空间，若为X上的一个压缩映射，当且仅当存在一个非负的实数，使得对于所有中的有:

压缩映射本质上可以看作一个满足Lipschitz条件的映射，同时可以证明满足L条件的函数必然连续。通常来说，经过压缩映射后的空间会变小；同时由定义可推得存在一个经映射后保持不动的点（即不动点），即若不断对空间进行压缩映射，该空间最终会收敛到同一个点。

**引理 1.** 压缩映射原理 1922

设是完备的距离空间。是一个上的压缩映射。则T在X中恰有唯一的不动点。设不动点为，则对任意初始点，逐次迭代，于是有不等式

**引理2.** 压缩映射的充要条件

一元实函数为压缩映射当且仅当在任意点的梯度（导函数）的绝对值小于1。由压缩压缩的定义

将以上形式化推导推广到多元函数上，即有：**函数f是压缩映射当且仅当其雅克比矩阵的范数小于1。(待补1.1：缺乏验证)**

该引理提供了一种规范函数形式的充分条件，即满足该引理条件的函数必然能保证GCN的特征表示在重复递归中收敛。

**GGNN门控图神经网络**

GGNN采用门控循环单元（GRU）作为递归函数，节点隐藏状态更新方式为：

GRU模块中的并非意味式 (1.5) 是在一维时序上递归，而是对节点表示的反复迭代递归，此过程中所有节点不断整合邻居节点与本节点的信息，最终在一定次数递归后获得所需的高级节点表示 。另外值得注意的是，GGNN中GRU模块的使用避免了式 (1.1) 中参数函数的选择，但这并不一定保证重复调用GRU最终能够使得节点表示收敛**（待补1.2：缺乏验证）**。最后，GGNN采用BPTT算法学习模型参数，因此GGNN在处理大型图可能存在问题，因为GGNN需要在所有节点上多次运行递归函数，需要将所有节点的中间状态储存在内存中。

**Stochastic steady-state Embedding（SSE）随机稳态嵌入**

随机稳态嵌入提出了一种学习算法，该算法对于大型图更具有可扩展性。SSE以随机和异步的方式反复更新节点隐藏状态。它交替地对一批节点进行状态更新，对另一批节点进行梯度计算。为了保持稳定性，SSE的循环函数被定义为历史状态和新状态的加权平均

其中是一个超参数，随机初始化。虽具有**SSE并没有在理论上证明节点状态会通过重复迭代而逐渐收敛。**