# 摘要

大是大非

# 绪论

## 图神经网络概况

在过去几年中，神经网络的兴起和应用成功推动了模式识别和数据挖掘的研究。目标检测、[机器翻译](https://mp.weixin.qq.com/cgi-bin/appmsg?t=media/appmsg_edit&action=edit&type=10&appmsgid=503271542&isMul=1&token=398966350&lang=zh_CN)、语音识别等许多机器学习任务曾高度依赖手工特征工程来提取信息特征集合，但多种端到端深度学习方式改变了这种状况。深度学习在多个领域的成功主要归功于计算资源的快速发展、大量训练数据的收集，还有深度学习从欧几里得数据中提取潜在表征的有效性。例如 CNN 可以利用平移不变性、局部连通性和图像数据语意合成性，从而提取出与整个数据集共享的局部有意义的特征，用于各种图像分析任务。

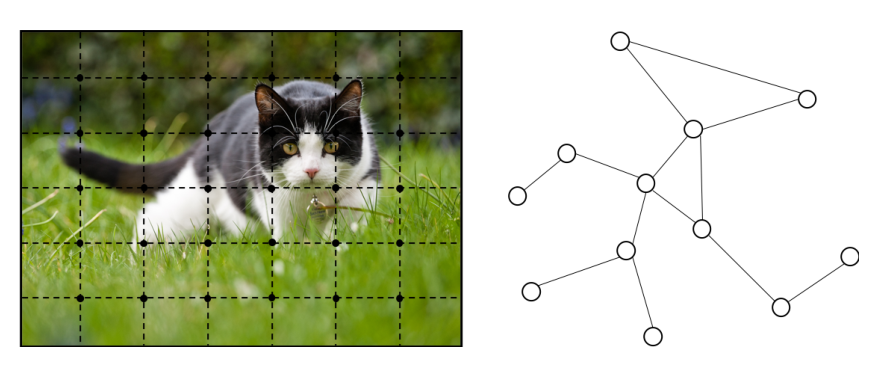
THE SURVEY OF GRAPH NEURAL NETWORK

随着计算机的出现和机器计算时代的到来和发展，图作为一种能够有效且抽象地表达信息和数据中的实体以及实体之间关系的重要数据结构被广泛应用，图数据库有效解决了传统的关系型数据结构面对大量复杂的数据所暴露出的建模缺陷多、计算速度慢等问题，图数据库也成为了非常热门的研究领域。图结构（Graph-structured Data）[3]可以将结构化数据点通过边的形式，依照数据间的关系将不同类型和结构的数据节点连接起来，因而被广泛地应用在数据的存储、检索以及计算应用中。基于图结构数据，知识图谱[4-7]可以通过点和边的语义关系，来实现精确地描述现实世界中实体之间的关联关系，作为人工智能非常重要的研究领域，知识图谱的研究方向包括知识抽取、知识推理、知识图谱可视化等。图计算（Graph Computing）具有数据规模量大、局部性低、计算性能高等特性，实现了在关系复杂型的大规模数据上高时效性和准确度的表现，在社交网络、团体反欺诈和用户推荐等领域有着重要的应用。

尽管深度学习已经取得了很大的成功，但是传统的神经网络只能处理欧几里得数据，然而从非欧几里得域生成的数据：图数据，已经取得更广泛的应用，它们需要有效分析。如图1所示，左图中猫的图像，就是规则的欧几里得数据，右图是图结构，图是由多个节点以及连接节点的边构成的。例如，在电子商务领域，一个基于图的学习系统能够利用用户和产品之间的交互以实现高度精准的推荐。在化学领域，分子被建模为图，新药研发需要测定其生物活性。在论文引用网络中，论文之间通过引用关系互相连接，需要将它们分成不同的类别。

图是一种数据结构，它模拟一组对象(节点)及其关系(边)。近年来，利用机器学习分析图的研究由于图的强大表达能力而受到越来越多的关注，即图可以用作跨越各种领域的大量系统的表示，包括社会科学(社会网络)[1]，[2]，自然科学(物理系统[3]，[4]和蛋白质-蛋白质相互作用网络[5])，知识图[6]和许多其他研究领域[7]。**作为一种用于机器学习的独特的非欧几里德数据结构，图分析侧重于节点分类、链接预测和聚类。**图形神经网络(GNNs)是基于深度学习的方法，在图形域上运行。由于其令人信服的性能和较高的可解释性，GNN近年来已成为一种广泛应用的图形分析方法。

GNNs的第一个动机源于卷积神经网络(CNNs) [8]。神经网络具有提取多尺度局部空间特征并将其组合以构建高表达性表征的能力，这导致了几乎所有机器学习领域的突破，开启了深度学习的新时代。然而，神经网络只能对像图像(2D网格)和文本(1D序列)这样的常规欧几里德数据进行操作，而这些数据结构可以被视为图形的实例。随着我们对CNNs和图形的深入研究，我们发现了CNNs的关键:本地连接、共享权重和多层的使用[9]。这些在解决图域问题中也很重要，因为1)图是最典型的局部连通结构。2)与传统的谱图理论相比，共享权重降低了计算成本[10]。3)多层结构是处理分层模式的关键，它捕捉了各种大小的特征。因此，很容易想到找到CNNs对图形的推广。但如1所示，局部化卷积滤波器和池算子难以定义，阻碍了CNN从欧氏域向非欧氏域的转化。



（Graph neural networks: A review of methods and applications）

另一个动机来自图嵌入，它学习用低维向量表示图的节点、边或子图。在图形分析领域，传统的机器学习方法通常依赖于手工设计的特征，并且受限于其不灵活性和高成本。遵循表象学习和arXiv的思想:1812.08434v2 [cs。LG]2 2019年1月2单词嵌入的成功[11]，DeepWalk [12]，被认为是第一个基于表示学习的图形嵌入方法，将SkipGram模型[11]应用于生成的随机行走。类似的方法如node2vec [13]、LINE [14]和TADW [15]也取得了突破。然而，这些方法有两个严重的缺点[16]。首先，编码器中的节点之间没有共享参数，这导致计算效率低下，因为这意味着参数的数量随着节点的数量线性增长。第二，直接嵌入方法缺乏泛化能力，这意味着它们不能处理动态图或推广到新的图。基于神经网络和图嵌入，提出了图神经网络来集中聚集来自图结构的信息。因此，他们可以对由元素及其依赖性组成的输入和/或输出进行建模。此外，图形神经网络可以同时用RNN核对图形上的扩散过程进行建模。

图数据的复杂性对现有机器学习算法提出了重大挑战，因为图数据是不规则的，并且不具有平移不变性。每张图大小不同、节点无序，一张图中的每个节点都有不同数目的邻近节点，使得一些在图像中容易计算的重要运算（如卷积）不能再直接应用于图。此外，现有机器学习算法的核心假设是实例相互独立。然而，图数据中的每个实例都与周围的其它实例相关，含有一些复杂的连接信息，用于捕获数据之间的依赖关系，包括引用、社交网络中的朋友关系和相互作用。这些特性使得现有的机器学习算法无法适用于图数据结构。

1. <图卷积神经网络综述\_徐冰冰.pdf>.

图卷积神经网络的构建所面临的挑战主要来源于以下几个方面：

（１） 图数据是非欧空间数据

图数据作为非欧空间数据， 不满足平移不变性，即每个节点具有各异的局部结构． 而传统卷积神经网络中的基本算子： 卷积和池化， 依赖于数据的平移不变性． 此时如何在图数据上定义卷积和池化算子成为一个有挑战的工作．

（２） 图数据具有多样的特性

实际生活中的多种应用都可以用图数据自然的表示， 这使得图数据具有多样的特性， 如社交网络中用户的有向连接， 引文网络中作者和引文的异质连接， 政治关系网络中的正负倾向带符号连接等． 多样的图特性给图卷积神经网络的构建带来更多信息，但是多种特性的建模也要求图卷积神经网络的设计更加复杂精细， 给图卷积神经网络带来新的挑战．

（３） 图数据的规模很大

在大数据时代， 实际应用中的图可能规模极大，含有百万甚至千万级别的节点， 如推荐系统中的用户商品网络， 社交网络中的用户网络． 如何在时间和空间可接受范围内在大规模图上构建图卷积神经网络也是非常大的挑战

图数据建模所针对的应用场景非常广泛， 这也

使得图数据建模所处理的任务多样． 我们将下游任

务分为节点级别的任务和图级别的任务， 节点级别

的任务包括节点分类， 链接预测等， 如引文网络中的

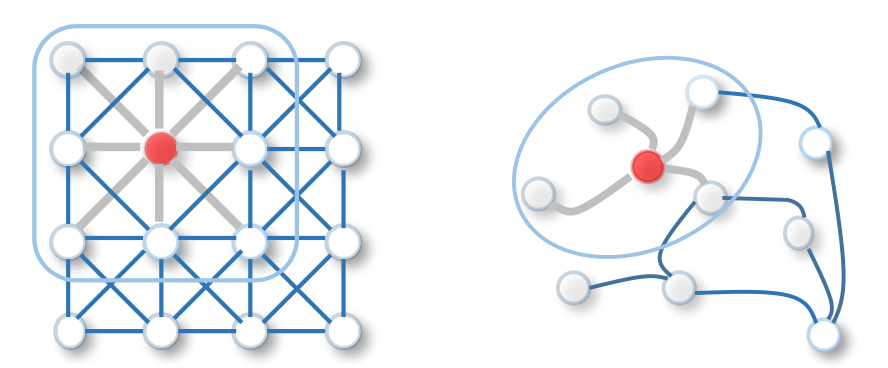
文章分类， 推荐系统中用户对商品的偏好推断． 图级

别的任务包括图生成， 图分类等， 如药物网络生成，

蛋白质网络中的蛋白质分类．

A Comprehensive Survey on Graph NeuralNetworks

最近，越来越多的研究开始将深度学习方法应用到图数据领域。受到深度学习领域进展的驱动，研究人员在设计图神经网络的架构时借鉴了卷积网络、循环网络和深度自编码器的思想。为了应对图数据的复杂性，重要运算的泛化和定义在过去几年中迅速发展。例如，图 1 展示了受标准 2D 卷积启发得到的图卷积。一幅图像可以被认为是一种特殊的图数据，其中像素由相邻的像素连接。类似于2D卷积，可以通过获取节点邻域信息的加权平均值来执行图形卷积。



**局限性**虽然实验结果表明GNN是一个强大的结构数据建模架构，但仍有一些原始GNN的局限性。首先，针对固定点迭代更新节点的隐藏状态是低效的。如果放松不动点的假设，我们可以设计一个多层GNN来获得节点及其邻域的稳定表示。其次，GNN在迭代中使用相同的参数，而大多数流行的神经网络在不同的层中使用不同的参数，这是一种分层的特征提取方法。此外，节点隐藏状态的更新是一个连续的过程，它可以像GRU和LSTM一样受益于RNN核。第三，在边缘上也有一些信息特征不能在原始GNN中有效地建模。例如，知识图中的边具有关系的类型，通过不同边的消息传播应该根据它们的类型而不同。此外，如何学习边缘的隐藏状态也是一个重要的问题。最后，如果我们关注节点的表示而不是图，则不适合使用不动点，因为不动点中的表示的分布将在值上更加平滑，并且用于区分每个节点的信息较少

https://zhuanlan.zhihu.com/p/113235806

纵观GNN的各类应用，GNN表现出了如下三点优势：

**1. GNN具有强大的图数据拟合能力**。作为一种建立在图上的端对端学习框架，GNN展示出了强大的图数据拟合能力。图数据是科学与工程学领域中一种十分常见的数据研究对象，因此，GNN也被应用到了很多相关场景下，并且都取得了不错的效果。通常这些应用均会利用GNN去拟合研究对象的一些理化性质，从而指导或加速相应的科研与开发工作。比如利用GNN去拟合两图中节点对的组合性质，从而提升蛋白质相互作用点预测的精度，而蛋白质相互作用点预测是药物分子发现与设计工作的重要构成部分；将高频电路抽象成图数据，利用GNN去拟合其电磁学性质，相较于严格的电磁学仿真计算，该方法能极大的加速高频电路（比如5G 芯片）的设计工作。

**2. GNN 具有强大的推理能力**。计算机要完成推理任务、离不开对语义实体的识别以及实体之间关系的抽取，很自然地，GNN被应用到了很多推理任务的场景中去。相较于之前大多基于关系三元组的建模方式，GNN能够对表征语义关系的网络进行整体性地建模，习得更加复杂与丰富的语义信息，这对提升推理任务的效果大有裨益。深度学习经过近几年的长足发展，在许多识别相关的任务上都取得了前所未有的成果，基于此，需要更深程度理解数据的推理任务被提出来，比如计算机视觉中的视觉问答（Visual Question Answering）、视觉推理（Visual Reasoning），自然语言处理中的多跳推理（Multi-hop Reasoning）等。随着GNN的流行，很多工作也尝试将GNN以一种端对端地形式嵌入到学习系统中去，提升相关任务的效果。我们举两个例子说明：第一个是在基于事实的视觉问答（Fact-based Visual Question Answering）中，问题不再直接包含答案内容，需要学习系统经过推理将问题中的事实关系正确映射到答案中的实体上。通过引入GCN同时建模多条事实来提升对答案推理的正确性，这一方法在相关数据集上取得了极大的效果提升。第二个是多跳推理，相比于之前的阅读理解任务，多跳推理需要跨越多个段落甚至多个文档来寻找实体之间的多跳关系，这是一个更加开放更加复杂的推理任务。通过嵌入GNN，构造了一个抽取加推理的双线学习框架，使得学习系统在可解释性提升的同时也在相关数据集上获得了极大的效果提升。

**3. GNN与知识图谱结合**，可以将先验知识以端对端的形式高效地嵌入到学习系统中去。人类在学习后习得的知识，会被大脑神经系统进行系统地加工并存储起来，作为之后相关活动发生时的一种先验知识高效提升人类的应对表现，并且往往知识之间会产生各种关联，形成“知识地图”。这种机制对应着数据科学领域中一些技术如知识图谱的广泛应用。从数据建模的层面说，这些知识（或者规则、经验、常识、事实等）为模型提供了额外的相关信息，可以有效提升学习系统的效果。作为一种端对端的图数据学习模型，GNN结合知识图谱，可以将先验知识高效地嵌入到任意一种学习系统中去，提升任务效果。如在零样本学习任务中利用GCN对词汇网络（WordNet）进行建模，实现了类别之间的语义关系到其视觉表示上的迁移，从而大大提升视觉模型在一些完全不提供训练样本的类别上的分类准确率。通过补充额外的知识图谱信息，将知识图谱与用户-商品二部图构成一种合成的图结构，然后利用GNN进行推荐任务建模，同时增强了推荐系统的准确率、多样性与可解释性。

总的来说，正是由于**GNN强大而灵活的特性，使得其不管在图数据本身的学习任务上，还是在被以端对端的形式融合到其他的学习任务中，都能表现出自己的独特优势**。当然，上面一以概之的优势需要与实际场景进行深度耦合，在具体地应用中寻找精确的定位，只有这样，才能在相关场景中获得优秀的效果

## 国内外研究现状

A Comprehensive Survey on Graph Neural

Networks

图神经网络的概念首先由 Gori 等人（2005）[ 提出，并由 Scarselli 等人（2009）[17] 进一步阐明。这些早期的研究以迭代的方式通过循环神经架构传播邻近信息来学习目标节点的表示，直到达到稳定的固定点。该过程所需计算量庞大，而近来也有许多研究致力于解决这个难题。

受到卷积网络在计算机视觉领域所获巨大成功的激励，近来出现了很多为图数据重新定义卷积概念的方法。这些方法属于图卷积网络（GCN）的范畴。Bruna 等人（2013）提出了关于图卷积网络的第一项重要研究，他们基于谱图论（spectral graph theory）开发了一种图卷积的变体。自此，基于谱的图卷积网络不断改进、拓展、进阶。由于谱方法通常同时处理整个图，并且难以并行或扩展到大图上，基于空间的图卷积网络开始快速发展。这些方法通过聚集近邻节点的信息，直接在图结构上执行卷积。结合采样策略，计算可以在一个批量的节点而不是整个图中执行，这种做法有望提高效率。

除了图卷积网络，近几年还开发出了很多替代的图神经网络。这些方法包括图注意力网络（GAT）、图自编码器、图生成网络以及图时空网络

图数据建模的历史由来已久． 起初， 研究人员关注统计分析的方法， 这个时期没有机器学习模型的参与， 如网页排序的常用算法ＰａｇｅＲａｎｋ、ＨＩＴＳ等． 此外， 研究人员也借用图谱理论的知识， 如用拉普拉斯矩阵的特征值和特征向量做社区分析或者人群聚类等． 随着深度学习的崛起， 研究人员开始考虑把深度学习的模型引入到图数据中， 代表性的研究工作是网络嵌入（Ｎｅｔｗｏｒｋ Ｅｍｂｅｄｄｉｎｇ， 即通过约束节点的邻近性为每个节点学习固定长度的表达， 如ＤｅｅｐＷａｌｋ、ＬＩＮＥ、ｎｏｄｅ２ｖeｃ等．这一时期， 在解决具体的应用问题时， 研究人员通常将其建模为两阶段问题， 以节点分类为例， 第一阶段为每个节点学习统一长度的表达， 第二阶段将节点表达作为输入， 训练分类模型． 近年来， 研究人员对图数据建模的关注逐渐转移到如何将深度学习的模型迁移到图数据上， 进行端到端的建模，各种图神经网络层出不穷。例如，讲卷积神经网络扩展到图结构，把图的拉普拉斯矩阵进行谱分解，并利用特征值和特征向量在谱空间定义了卷积操作。用一节切比雪夫展开近似计算卷积核，产生了我们熟知的图卷积网络；将图神经网络从直推式学习的模式扩展到归纳式学习的设定，并通过邻居采样的方式加速图神经网络在大规模图数据上的学习，产生了GraghSAGE；利用注意力机制来定义图卷积，得到了图注意力网络。

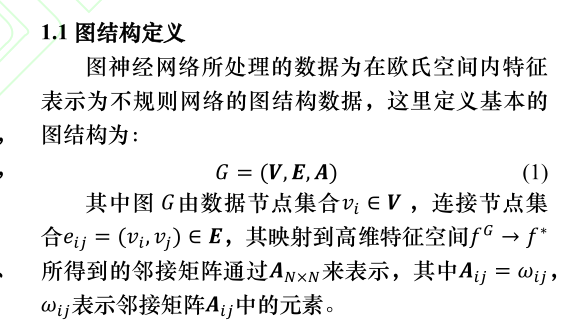
除了不断提出更多方式的图神经网络，研究者也开始研究关于图学习的更多方面。GNN大多需要任务相关的标签来学习丰富的表示，然而使用领域知识在程序上表示图需要很高的成本。目前，自监督方法已经在视觉领域取得了不错的成果，它可以利用数据本身学习表示而不需要额外的标签。将自监督方法引入图结构中解决了图标签贫乏的问题。自监督学习中的对比方法，更是在表示学习中取得了很大的突破。通过将图的局部表示与全局表示对比，并使用判别器为他们之间的相似度进行打分，使学习到的图表示中的结构信息和特征信息更加丰富。

## 课题研究目的及意义

## 研究任务及主要工作

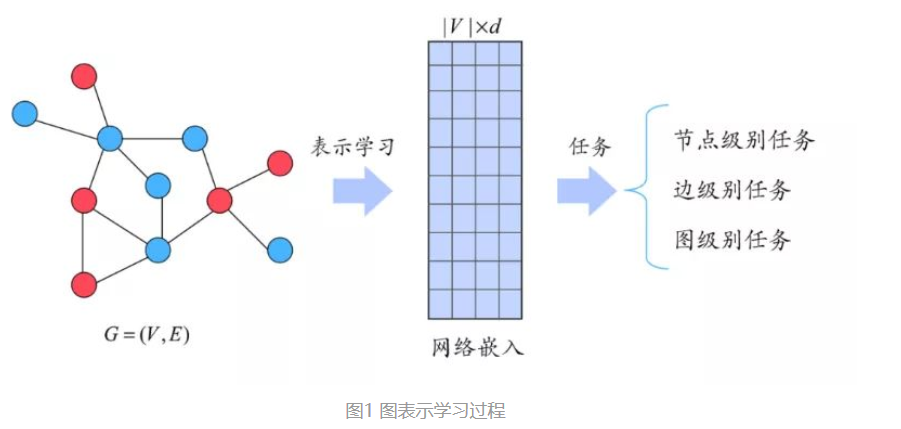
# 多视角对比图表示学习模型

## 图表示学习



https://zhuanlan.zhihu.com/p/113235806

我们通常用邻接矩阵 [](http://attachbak.dataguru.cn/attachments/portal/202001/17/135232fit2p2i5barp2ebo.png)表示图的结构信息，一般来说，A 是一个高维且稀疏的矩阵，如果我们直接用 A 去表示图数据，那么构筑于之上的[机器学习](http://www.dataguru.cn/article-4063-1.html?union_site=innerlink" \t "_blank)模型将难以适应，相关的任务学习难以高效。因此，我们需要实现一种对图数据的更加高效的表示方式。而图表示学习的主要目标，正是将图数据转化成低维稠密的向量化表示方式，同时确保图数据的某些性质在向量空间中也能够得到对应。这里图数据的表示，可以是节点级别的，也可以是图级别的，但是作为图数据的基本构成元素，节点表示学习一直是图表示学习的主要对象。一种图数据的表示如果能够包含丰富的语义信息，那么下游的相关任务如点分类、边预测、图分类等，就都能得到相当优秀的输入特征，通常在这样的情况下，我们直接选用线性分类器对任务进行学习。图 1 展示了图表示学习的过程



同表示学习一样，图表示学习的核心也是研究数据的表示。特殊的是，图表示学习的研究对象是图数据。我们知道图数据中蕴涵着丰富的结构信息，这本质上对应着图数据因内在关联而产生的一种非线性结构。这种非线性结构在补充刻画数据的同时，也给数据的学习带来了极大的挑战。因此在这样的背景下，图表示学习就显得格外重要，它具有以下两个重要作用：

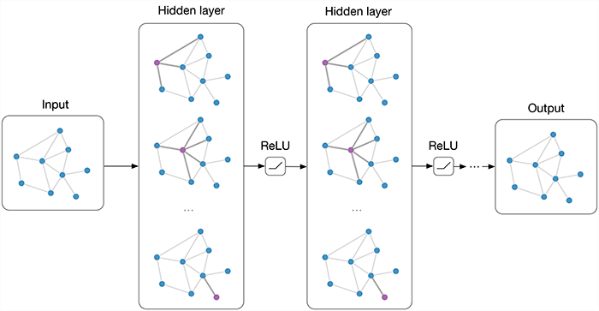
1. 将图数据表示成线性空间中的向量。从工程上而言，这种向量化的表示为擅长处理线性结构数据的计算机体系提供了极大的便利。

2. 为之后的学习任务奠定基础。图数据的学习任务种类繁多，有节点层面的，边层面的，还有全图层面的，一个好的图表示学习方法可以统一高效地辅助这些任务的相关设计与学习。

图表示学习从方法上来说，可以分为基于分解的方法，基于随机游走的方法，以及基于深度学习的方法，而基于深度学习的方法的典型代表就是 GNN 相关的方法。

### 图卷积神经网络

https://tkipf.github.io/graph-convolutional-networks/



## 对比自监督学习

<https://ankeshanand.com/blog/2020/01/26/contrative-self-supervised-learning.html>

<https://blog.csdn.net/weixin_41803874/article/details/107692319?utm_medium=distribute.pc_relevant.none-task-blog-2%7Edefault%7EBlogCommendFromBaidu%7Edefault-4.control&dist_request_id=&depth_1-utm_source=distribute.pc_relevant.none-task-blog-2%7Edefault%7EBlogCommendFromBaidu%7Edefault-4.control>

### 自监督学习

Self-Supervised Learning of Graph Neural

Networks: A Unified Review

深度模型将一些数据作为其输入，并训练以输出期望的预测。训练深度模型的一种常见方法是使用监督模式，在这种模式下，会给出足够数量的输入数据和标签对。然而，由于需要大量的标签，监督训练在许多现实世界场景中变得不适用，在这些场景中，标签是昂贵的、有限的，甚至是不可用的。

https://ankeshanand.com/blog/2020/01/26/contrative-self-supervised-learning.html

当代机器学习方法大多依赖于人工提供的标签，这是训练过程中使用的唯一学习信号。这种监督学习对标签的过度依赖存在很多问题：

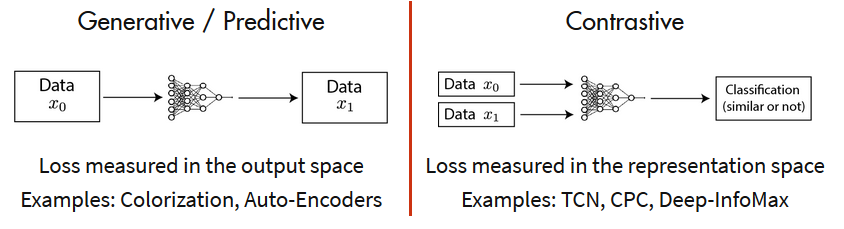
- 数据的内部结构远比标签提供的信息要丰富，因此，纯监督学习算法往往需要大量的样本来学习，但得到的模型也很不稳定。

- 在高维分类问题中，我们不能直接依赖监督信息；；同时，在增强等问题中，获取标签的成本非常高。

- 标签信息通常适用于解决特定的任务，而不是作为知识可以重新利用。

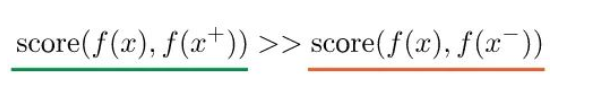
自监督学习提供了一种有前景的替代方法，它不需要人工标注的类别标签信息，直接利用数据本身作为监督信息，学习样本数据的特征表达，应用于下游的任务。自监督学习(SSL)能够在未标记的数据上训练深度模型，消除了对过多标注标签的需要。当没有标记数据可用时，SSL作为一种从未标记数据本身学习表示的方法。当有限数量的标记数据可用时，来自未标记数据的SSL可以被用作预训练过程，之后标记数据被用于为下游任务微调预训练的深度模型，或者作为有助于执行主要任务的辅助训练任务。

自监督方法在深度学习中将取代当前占主导地位监督方法的预言已经存在了很长时间。 如今，自监督方法在Pascal VOC检测方面已经超过了监督方法，并且在许多其他任务上也显示出了出色的结果。自监督方法大致可以分为两类，如图所示，分别是生成方法和对比方法。



### 对比学习

顾名思义，对比学习方法就是通过对比正反样本的例子来学习表征，虽然这不是一个新的范式，但他在无监督对比训练的计算机视觉任务中取得了巨大的成功。对于任何数据点x，对比方法的目的是学习一个特征编码器f。给定一个x，将他分别与正样本和负样本对比来学习表征。



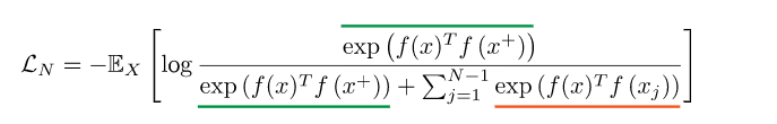
- 这里x+是与x相似或相等的数据点，称为正样本。

- x−是与x不同的数据点，称为负样本。

- score函数是一个度量两个特征之间相似性的指标。

x通常被称为“锚”数据点。为了优化这一特性，我们可以构造一个softmax分类器来正确地分类正样本和负样本。这个分类器鼓励score函数给正例样本赋于大值，给负样本赋于小值：

分母项由一个正样本和N - 1个负样本组成。



### 最大化互信息

## 模型搭建

## 本章小结

# 实现及测试

## 结构搭建

## 方案设计与实现

## 训练及预测结果

## 模型评估

## 本章小结

# 总结与展望

## 课题总结

## 研究展望

# 致谢

# 参考文献

(1)

1. <图卷积神经网络综述\_徐冰冰.pdf>.

2.Graph Neural Networks:A Review of Methods and Applications

3. A Framework For Contrastive Self-Supervised Learning And Designing A New Approach

4. A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks