



中国科学院  
CHINESE ACADEMY OF SCIENCES



# 图卷积的应用

---

报告人：张 奇  
中科院自动化研究所

# 简介

## ➤ 规则数据

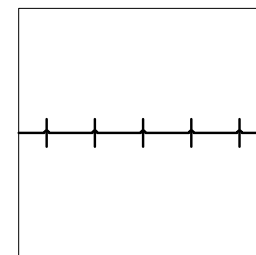
- 经典CNN一般应用在规则数据上。就是嵌入在 栅格上的数据。
- 这些数据可以被张量tensor表示。

➤ 语音: 1 d-tensor或向量 相关的任务有 机器翻译, 语音处理。

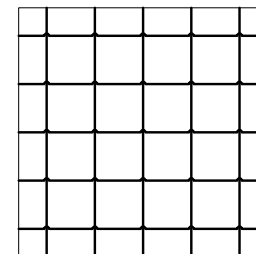
➤ 图像: 2 d-tensor或矩阵 目标检测, 目标分割

➤ 视频: 3 d-tensor 视频理解, 目标检测

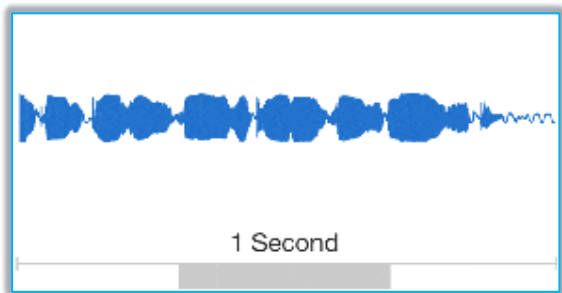
- 经典CNN在每个像素的共享卷积核参数



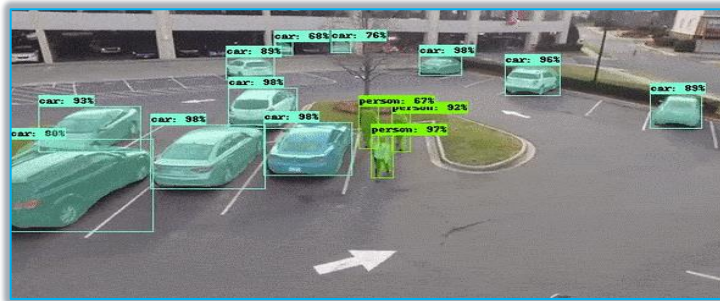
1D



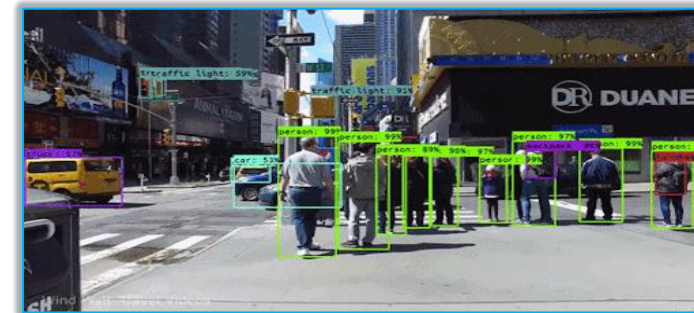
2D



speech



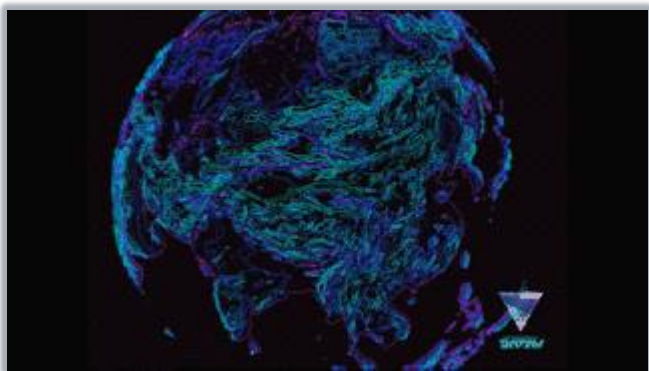
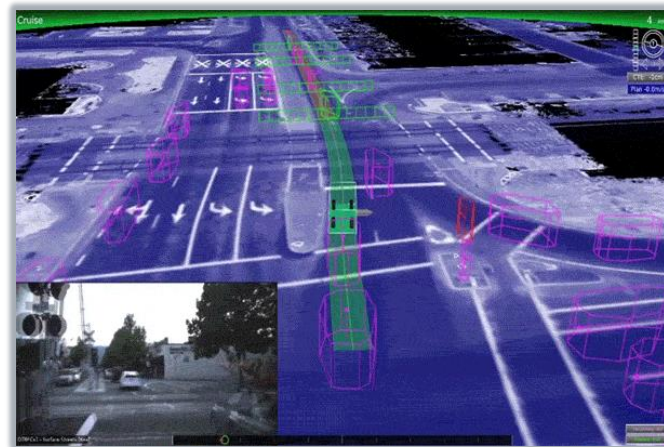
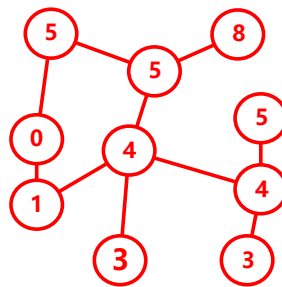
image



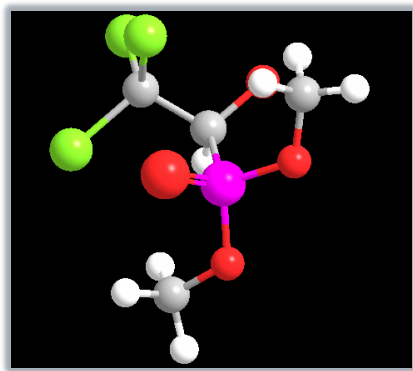
video

# 简介

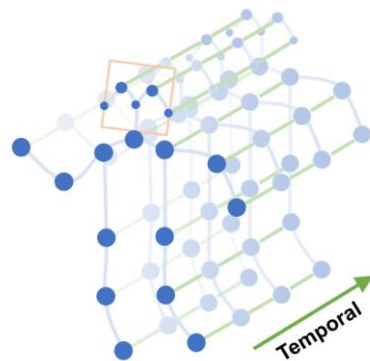
- 图结构数据
  - 数据嵌入在不规则网格（或者graph）上。
    - 交通数据：每个路口（或者每条道路）为节点。
    - 人体骨架数据：每个关节作为节点。
    - 天气数据：每个气象监测站作为节点。
- 图卷积在图中每个节点的共享卷积核参数



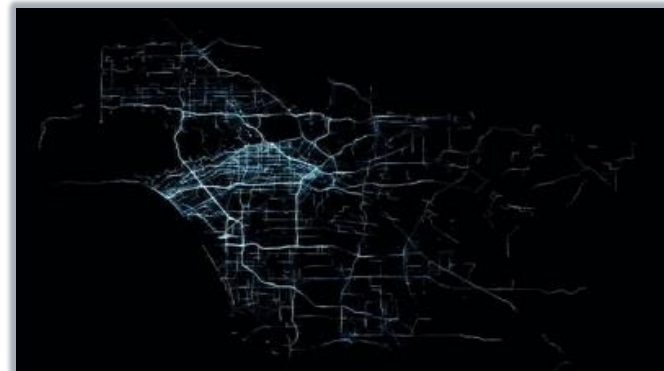
3D data



molecules



Skeleton structure



transportation network

# 简介

---

## ➤ 图卷积神经网络的应用

- 交通预测。 流量预测、速度预测、需求预测等。地铁、出租车、公交、自行车。。。
- 气象分析。 降雨预测、风速预测、温度预测等。
- 网络分析。 文章引用网络的节点分类、用户影响力预测等。
- 生物化学。 分子活性预测。副作用预测。分子分类等。
- 计算机视觉。 骨架视频处理。3D点云处理。少样本学习。场景图分析等。
- 自然语言处理。 文本分类。 句法分析。 机器翻译等。
- 推荐系统。 商品推荐等。
- 物理学。 物理系统的推断和预测等。
- 其他。 组合优化。。。

图卷积神经网络综述。计 算 机 学 报。中科院计算所。徐冰冰等。  
Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications。清华大学。

# 目录

---

- 简介
- 图卷积在交通预测上的应用 (**详讲**)
- 其他方面
  - 文本分类
  - 天气预测
  - 骨架视频
  - . . .

# 目录

---

- 图卷积在交通预测上的应用
  - 1 交通预测任务介绍
  - 2 方法的演变
    - 2.1 忽视空间信息
    - 2.2 构建spatio-temporal matrix
    - 2.3 栅格模型
    - 2.4 图模型
  - 3 图的构建

# 1.交通预测任务介绍

---

- 交通预测的目的是根据历史交通数据和交通网络的拓扑结构来预测未来的交通状况，如速度、流量和拥堵程度。
- 良好的预测结果可以帮助旅行者选择合适的出行路线，为城市管理者提供决策支持，缓解交通拥堵，减少资源浪费。
- 交通流量预测也是很多交通任务（比如 路径规划、旅行时间预测）的基础。

# 1.交通任务介绍

## ➤ 交通数据格式

➤ 交通数据和时间相关，具有时序性。

➤  $t$ 时刻的交通数据可以记为：

$$\mathcal{V}_t \in \mathbb{R}^{n \times c}$$

➤ 其中 $n$ 是节点数， $c$ 是通道数。

## ➤ 交通预测任务建模

➤ 根据历史流量和图结构，预测未来流量。

$$[\mathcal{V}_{t-T'+1}, \mathcal{V}_{t-T'+2}, \dots, \mathcal{V}_t; \mathcal{G}] \xrightarrow{h(\cdot)} [\mathcal{V}_{t+1}]$$

➤ 其中左边是输入，右边是输出， $h(\cdot)$ 是待学习的模型

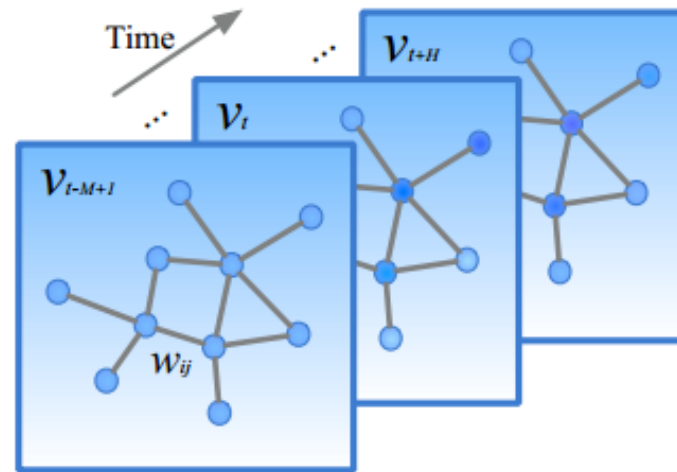


Figure 1: Graph-structured traffic data. Each  $v_t$  indicates a frame of current traffic status at time step  $t$ , which is recorded in a graph-structured data matrix.



# 1.交通任务介绍

## ➤ 交通数据格式

➤ 交通数据和时间相关，具有时序性。

➤  $t$ 时刻的交通数据可以记为：

$$\mathcal{V}_t \in \mathbb{R}^{n \times c}$$

➤ 其中 $n$ 是节点数， $c$ 是通道数。

## ➤ 交通预测任务建模

➤ 根据历史流量和图结构，预测未来流量。

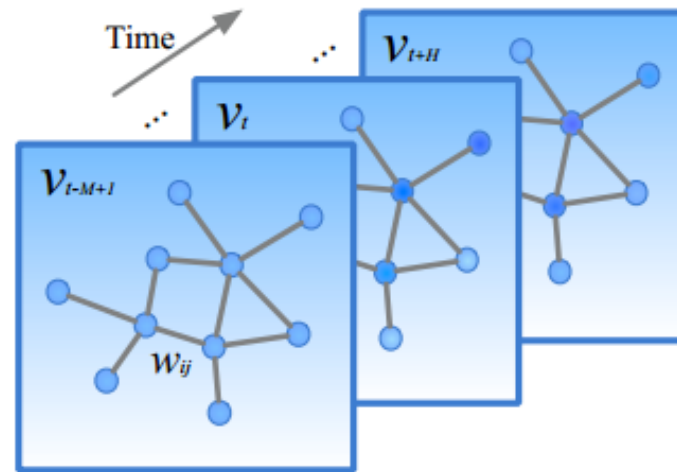


Figure 1: Graph-structured traffic data. Each  $v_t$  indicates a frame of current traffic status at time step  $t$ , which is recorded in a graph-structured data matrix.

$$[\mathcal{V}_{t-T'+1}, \mathcal{V}_{t-T'+2}, \dots, \mathcal{V}_t; \mathcal{G}] \xrightarrow{h(\cdot)} [\mathcal{V}_{t+1}, \mathcal{V}_{t+2}, \dots, \mathcal{V}_{t+T}]$$

➤ 其中左边是输入，右边是输出， $h(\cdot)$ 是待学习的模型。

## 2.1 忽视空间信息

---

### ➤ (1) 只考虑单个节点

➤ ARIMA 和他的变种都是比较老的一种方法了。最早应用在金融方面。

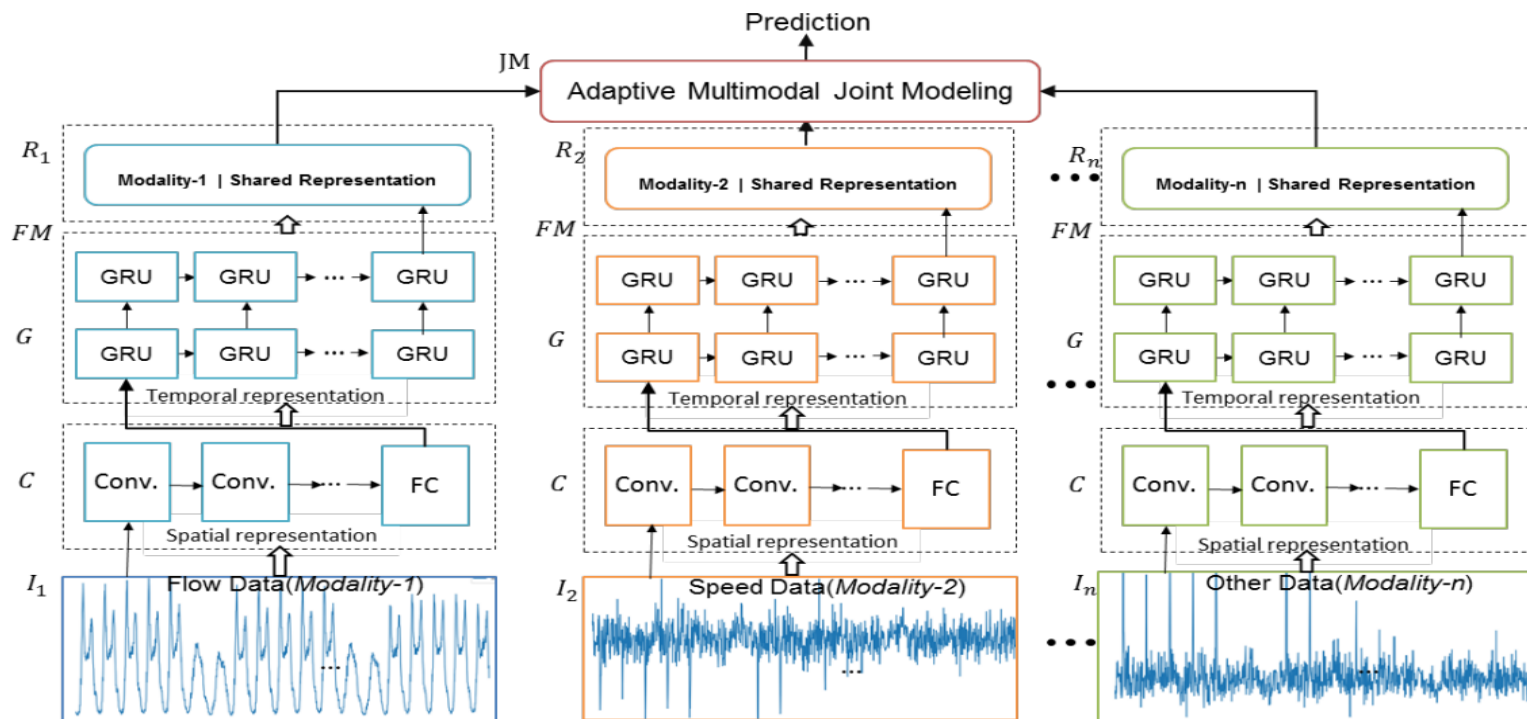
➤ 如：ARIMA, KohonenARIMA (KARIMA), subset ARIMA , ARIMAX , , space-time ARIMA and seasonal ARIMA (SARIMA) 。

➤ 近年来也有一些神经网络的方法是只考虑单个节点的， 主要是由于数据只有一个节点。处理的任务就是单点的预测。

## 2.1 忽视空间信息

➤ (1) 只考虑单个节点

➤ 比如这篇文章的工作，输入是一个一维的数据，只有时间纬度。



A Hybrid Method for Traffic Flow Forecasting Using Multimodal Deep Learning arxiv 2018

## 2.1 忽视空间信息

- (2)将所有节点排成一排向量，然后用全连接层处理。

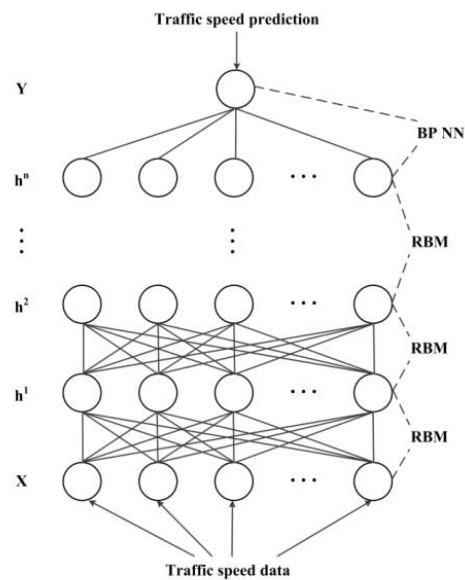
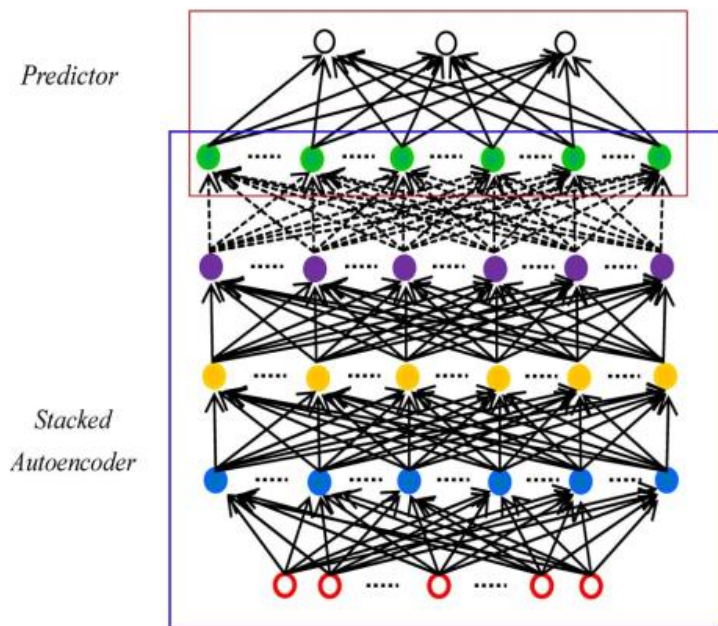


Figure 1. Structure of the DBN model.

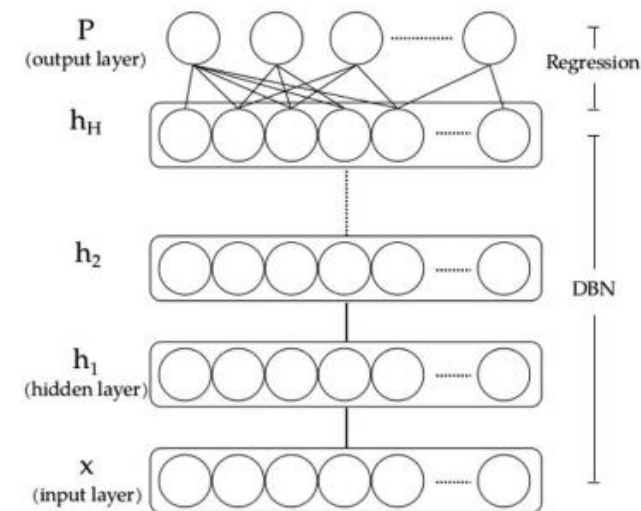


Fig. 2. DBN architecture for a multitask regression.

Traffic Flow Prediction With Big Data: A Deep Learning Approach IEEE TRANSACTIONS ON INTELLIGENT TRANSPORTATION SYSTEMS, VOL. 16, NO. 2, APRIL 2015

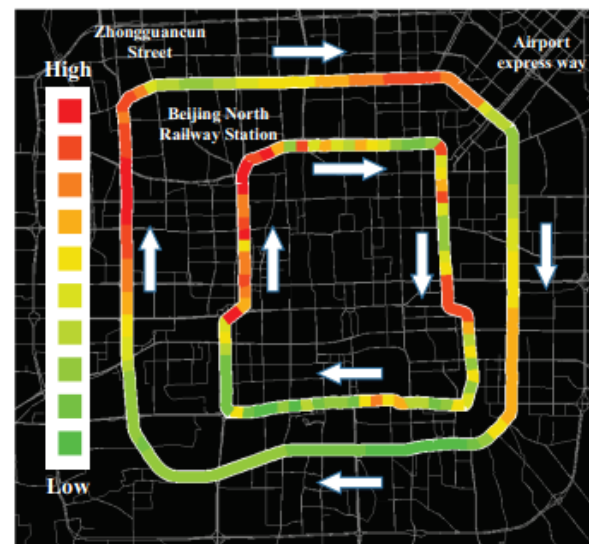
Traffic speed prediction using deep learning method. ITSC 2016

Improving Traffic Flow Prediction With Weather Information in Connected Cars: A Deep Learning Approach. ITSC 2016

## 2.2 构建spatio-temporal matrix

- 16-17年有人有一些方法提出所谓的 spatio-temporal matrix。主要做法是将数据构建成一个  $N \times Q$  的矩阵。  $Q$  是有多少个时间段，  $N$  是 站点个数。
- 然后把这个当成一幅图片。然后用CNN 在上面做卷积。

$$M = \begin{bmatrix} m_{11}, m_{12}, \dots, m_{1N} \\ m_{21}, m_{22}, \dots, m_{2N} \\ \vdots \quad \vdots \quad \dots \quad \vdots \\ m_{Q1}, m_{Q2}, \dots, m_{QN} \end{bmatrix}$$



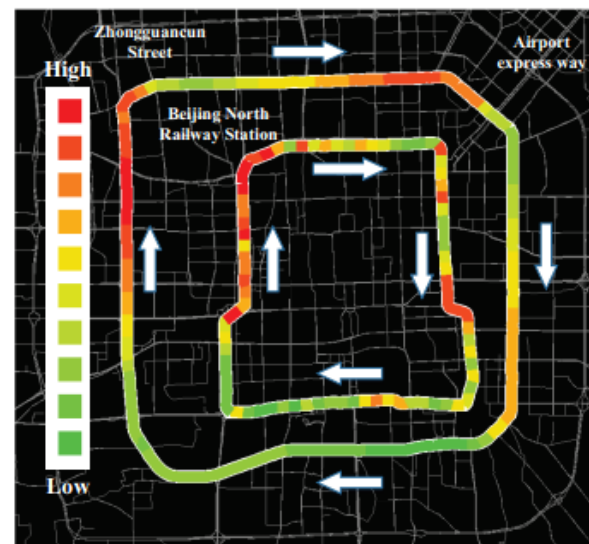
Traffic Speed Prediction and Congestion Source Exploration: A Deep Learning Method. ICDM 2016

Learning Traffic as Images: A Deep Convolutional Neural Network for LargeScale Transportation Network Speed Prediction. Sensors · 2017

## 2.2 构建spatio-temporal matrix

- 这个本质上是一个 C3D 的网络。 因为其在在时间纬度上也进行卷积。也是有步长的。同时空间上，由于进行了卷积。所以说在一定程度上利用了空间关系。
- 这种做法和前面一样，也需要将所有站点排成一行，所以对节点排列的顺序要求很高

$$M = \begin{bmatrix} m_{11}, m_{12}, \dots, m_{1N} \\ m_{21}, m_{22}, \dots, m_{2N} \\ \vdots \quad \vdots \quad \dots \quad \vdots \\ m_{Q1}, m_{Q2}, \dots, m_{QN} \end{bmatrix}$$

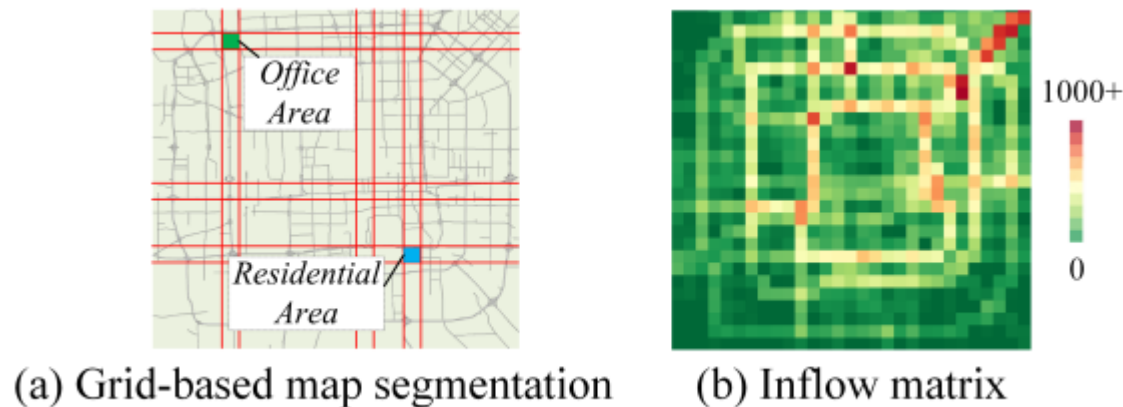


Traffic Speed Prediction and Congestion Source Exploration: A Deep Learning Method. ICDM 2016

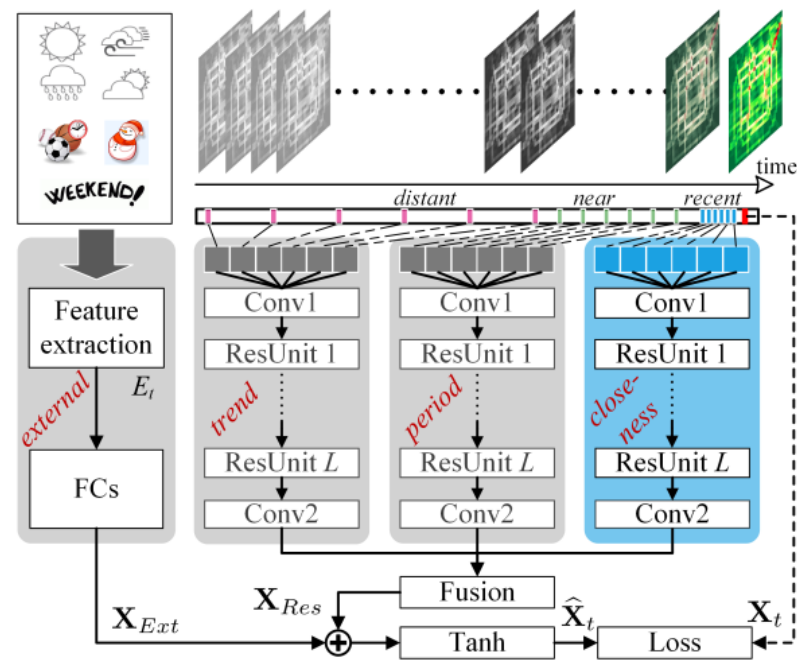
Learning Traffic as Images: A Deep Convolutional Neural Network for LargeScale Transportation Network Speed Prediction. Sensors · 2017

## 2.3 栅格模型

- 2017 年 aaai , 当时在微软亚研院郑宇博士 一种栅格数据处理办法。将城市划分成一个个的小块。将轨迹数据处理成了热力图数据数据。
- 图片的每一个像素点为当前时刻区域的流量。这样就把轨迹数据转换成了类似视频格式的数据。预测未来的流量的问题转换成了类似预测下一帧图像的问题



Deep Spatio-Temporal Residual Networks for Citywide Crowd Flows Prediction AAAI 2017



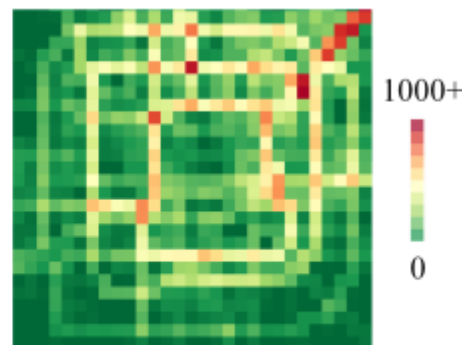


## 2.3 栅格模型

- 这种栅格模型提供了一个较为通用的交通数据处理办法。在这个栅格图上进行卷积操作，由于局部感受野的存在，每一个高层的节点都与底层的一片区域相关，那么就利用了空间信息。
- 很多GPS数据可以转换成这样的方式进行使用，而且变成类似图像的数据后，很多神经网络里以前的方法就可以被使用了。
- 按照作者本人的说法：“这篇论文可以认为是（在国际知名学术会议上）真正把深度学习有效用在时空数据上的第一个研究成果，有重大的历史意义。”



(a) Grid-based map segmentation

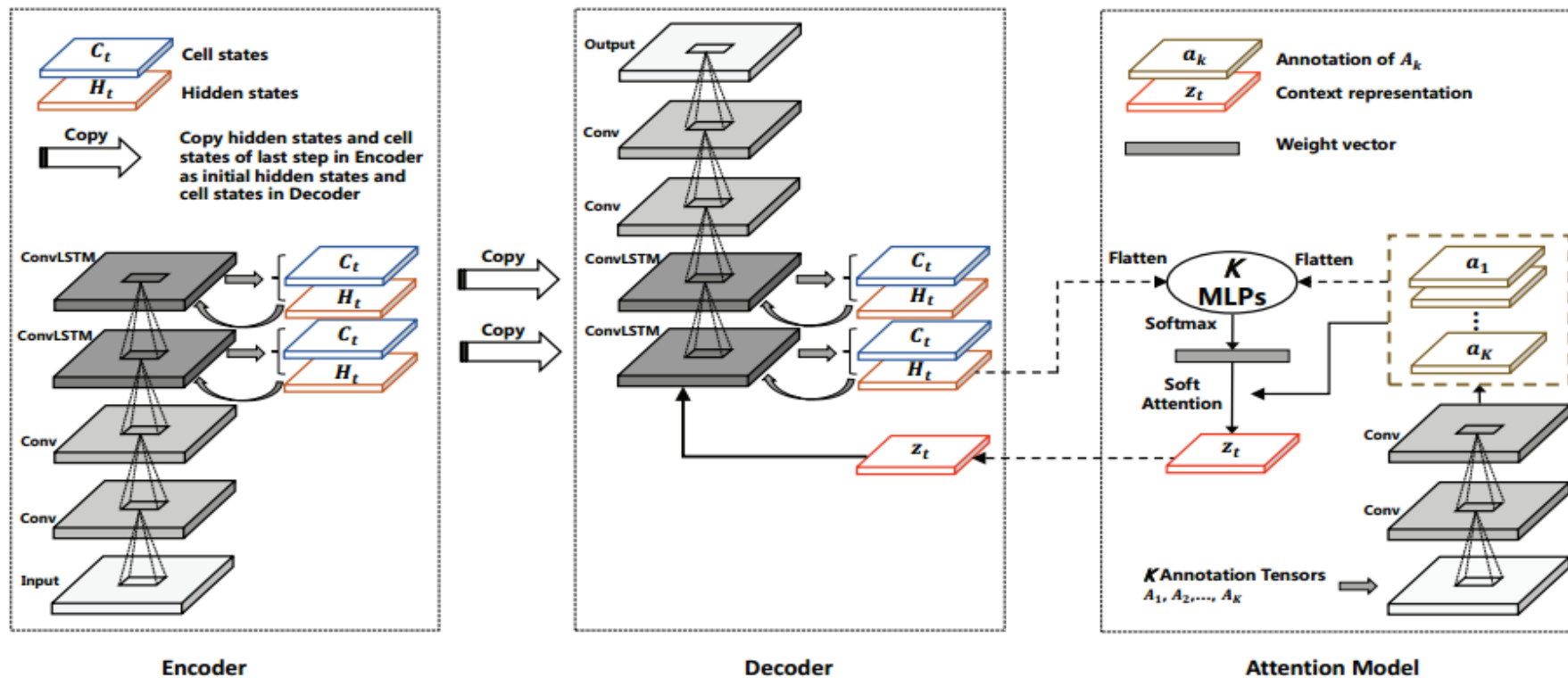


(b) Inflow matrix



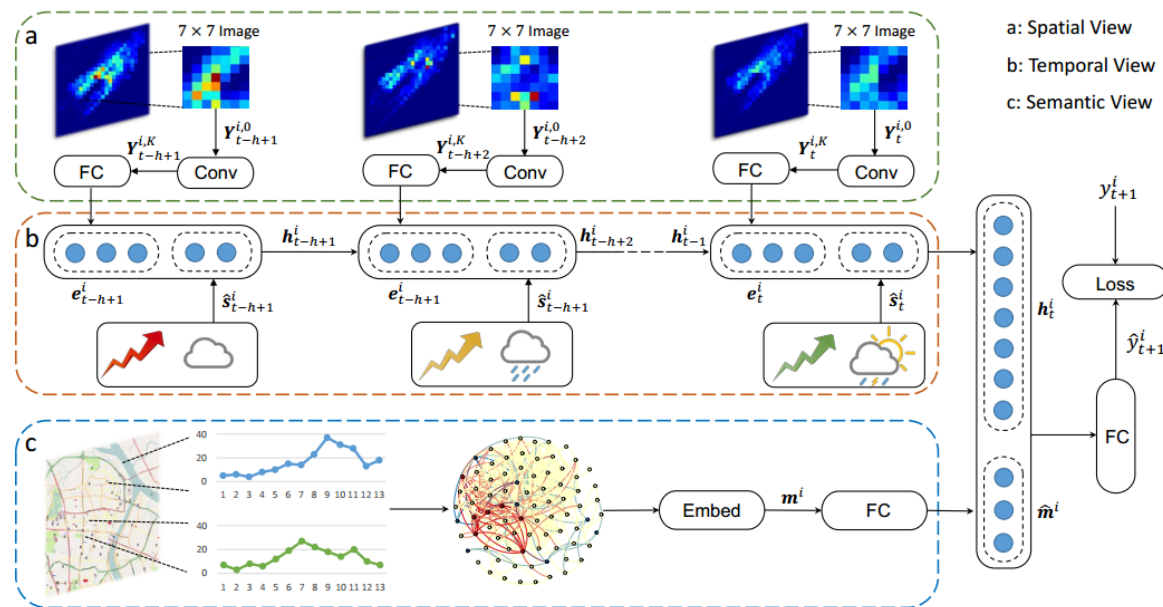
## 2.3 栅格模型

- 有些人就follow这种思想，提出自己的网络结构。
- 郑宇的模型是全卷积的。这篇文章采用所谓的 encode-decode 模型。



## 2.3 栅格模型

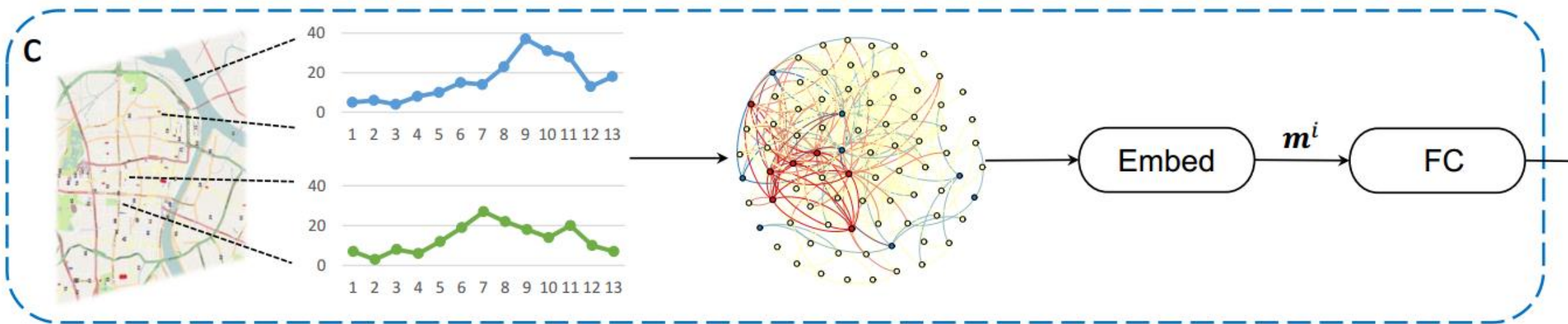
- 在 aaai 2018 上也有人沿着栅格模型这个思路继续前进。
- 和郑宇的方法不同，他虽然是在栅格数据上进行操作，但是使用了所谓的 Local CNN，每次只输入一个站点和其周边信息。然后通过CNN层提取特征，经过全连接层变成向量。结合其他因素，然后输入到RNN网络中。



Deep Multi-View Spatial-Temporal Network for Taxi Demand Prediction. AAAI 2018

## 2.3 栅格模型

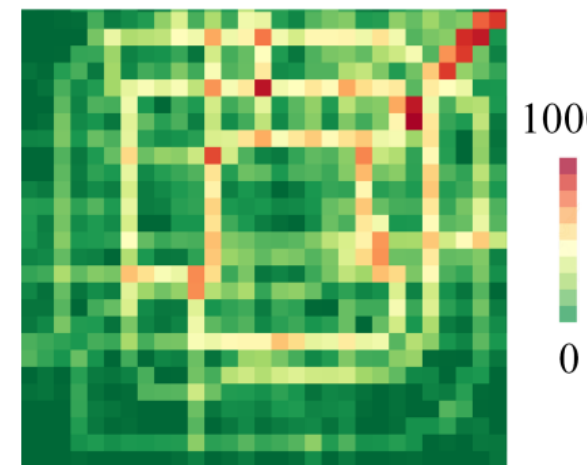
- 下面一部分是所谓的, Structural Embedding, 作者使用了 node embedding (即 node to vector ) 的方法, 称为 “LINE” 。将每一个站点视为一个节点构建图。
- LINE 是一传统的node embedding 的方法, 与图卷积无关。 虽然现在图卷积也可以做node embedding。



## 2.3 栅格模型

### ➤ 栅格模型的缺点

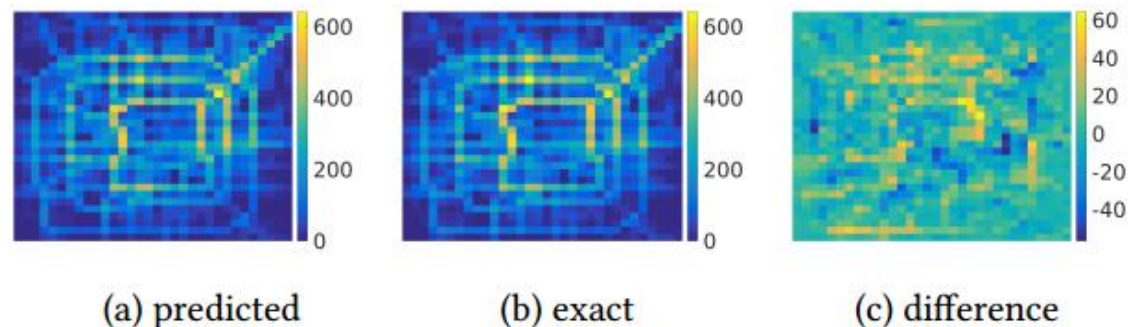
- 不管神经网络结构如何变化， 栅格化处理 交通数据是不太合适的， 因为我们的道路并不是像棋盘一样的水平或者垂直的。
- 在 KDD 2018 一篇文章中就指出了栅格化处理交通数据的问题。
  - First, the geometry of a city is usually highly irregular.
  - Second, the spatial sparsity can be exacerbated by the spatial grid structure. Directly applying a CNN to fit the extreme sparse data will lead to all zero weights due to the weight sharing of CNNs



## 2.3 栅格模型

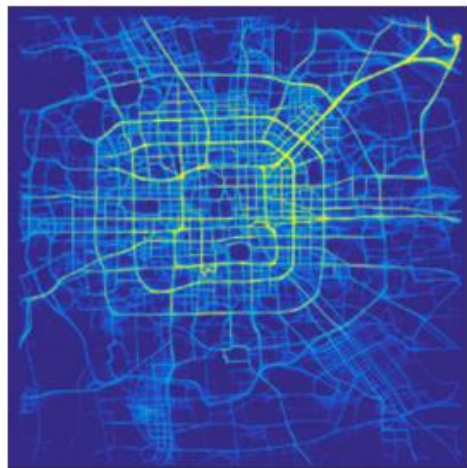
### ➤ 栅格模型的缺点

- The lattice based data representation omits geographical information and spatial correlation within the data itself.
- To cast the problem into the graph representation framework used in this paper, we consider each pixel in the spatial grid as a graph node, and connect each node with its four immediate neighbors.



## 2.4 图模型

- 其实，完全使用graph 来表示交通数据，2018年时已经有人做了。
- 每一个节点代表道路，或者一个一个十字路口。来构建图网络。
- 这样前面说的两个问题，就解决了。比如数据稀疏的问题，因为只有在道路或者十字路口上建立节点，在建筑物车辆开不到的地方不建立节点，所以每个节点上都有充足的数据。另外图可以表示 irregular 的道路关系。



Spatio-Temporal Graph Convolutional Networks: A Deep Learning Framework for Traffic Forecasting . IJCAI 2018

Diffusion Convolutional Recurrent Neural Network: Data-Driven Traffic Forecasting. ICLR 2018



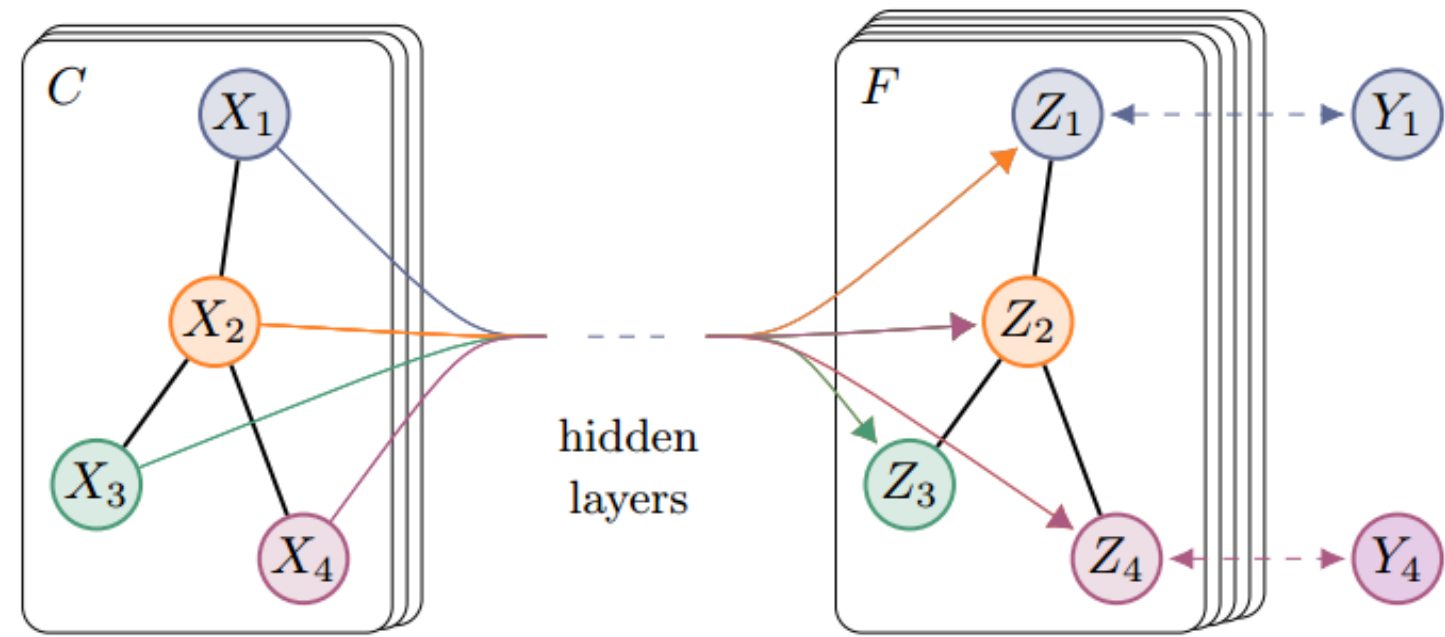
# 2.4 图模型

➤ 卷积网络中不同层的特征图：

$$X \in \mathbb{R}^{n \times C}$$

$$Z \in \mathbb{R}^{n \times F}$$

$$x_{image} \in \mathbb{R}^{h \times w \times C}$$



$h$

1	2	2	5	76	3	8	4	2	9
5	3	36	4	4	23	2	2	66	2
5	1	4	12	42	4	0	1	1	2
6	7	8	3	9	0	1	6	35	1
1	24	5	5	3	23	23	25	20	68
3	12	39	5	32	7	53	9	3	7
1	2	29	3	2	4	23	5	12	6
4	31	7	7	32	3	12	78	88	12
78	68	2	68	8	25	86	12	78	77
35	65	78	12	78	32	57	24	45	14

$w$

$$X_1 \in \mathbb{R}^{1 \times C}$$

$$Z_1 \in \mathbb{R}^{1 \times F}$$

## 2.4 图模型

---

- 用graph 模型来建模交通数据，相比栅格模型更加符合实际情况。
- 使用图卷积网络来处理交通数据是不是就一劳永逸了，所有问题都解决了呢？
  - 显然不是。使用图卷积是为了更好的利用空间信息，但是图卷积的引入会带来新的问题， 图如何去构建？



# 3 图的构建

## ➤ 3.1 高斯核构建邻接矩阵

### ➤ 核心思想

- 利用欧式距离，再经过一个高斯核函数。同时设置一个阈值。代表太远的节点之间的关系是0.

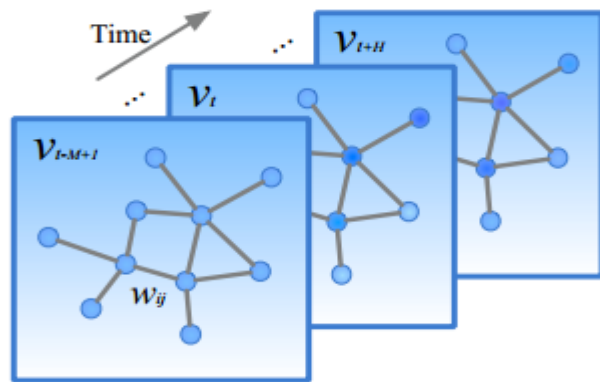


Figure 1: Graph-structured traffic data. Each  $v_t$  indicates a frame of current traffic status at time step  $t$ , which is recorded in a graph-structured data matrix.

$$w_{ij} = \begin{cases} \exp(-\frac{d_{ij}^2}{\sigma^2}), & i \neq j \text{ and } \exp(-\frac{d_{ij}^2}{\sigma^2}) \geq \epsilon \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Spatio-Temporal Graph Convolutional Networks: A Deep Learning Framework for Traffic Forecasting . IJCAI 2018

Diffusion Convolutional Recurrent Neural Network: Data-Driven Traffic Forecasting. ICLR 2018

# 3 图的构建

## ➤ 3.1 高斯距离邻接矩阵

### ➤ 缺点

- 这当然是一个很粗糙的计算方法。
- 节点之间的关系不一定是越近越相关。
- 即使是越近越相关，也不一定是符合这个核函数的公式。
- 由于阈值的情况，距离比较远的节点就没有关系了。这不一定与现实情况相符合。

$$w_{ij} = \begin{cases} \exp(-\frac{d_{ij}^2}{\sigma^2}), & i \neq j \text{ and } \exp(-\frac{d_{ij}^2}{\sigma^2}) \geq \epsilon \\ 0 & , \text{ otherwise.} \end{cases}$$

# 3 图的构建

---

## ➤ 3.2 多图表示法

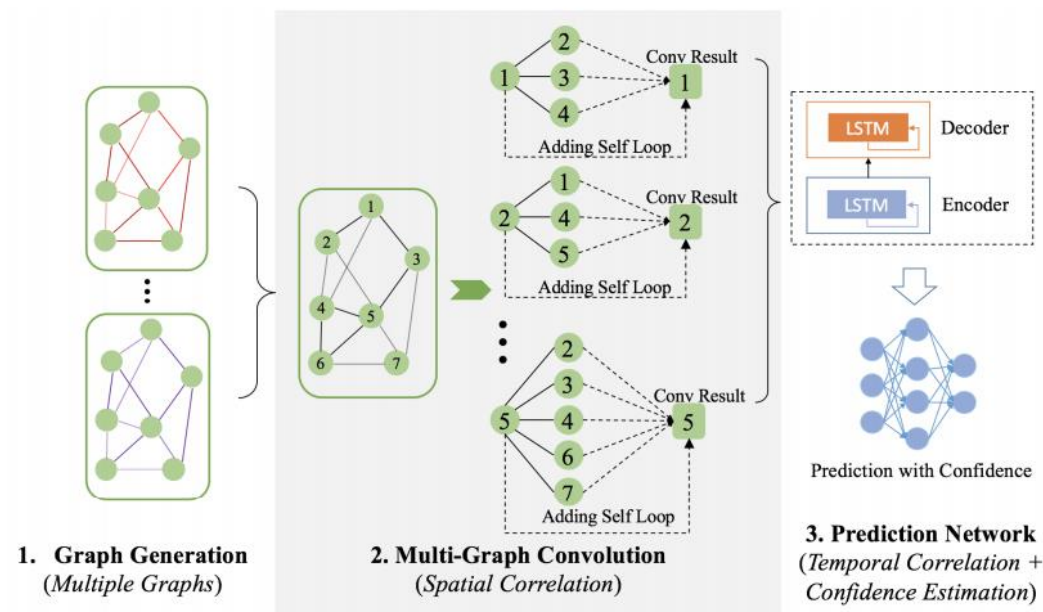
- 根据这种情况，有人提出所谓的 multi-graph convolutional networks, 多图卷积网络。
- 核心思想：
  - 意思是设计多种规则来构建图结构，不一定按照 高斯核的公式来生成图结构。
  - 这篇文章的作者认为 **图的生成是图卷积模型成功的关键**，如果所构建的图不能对站点间的有效关系进行编码，不仅不利于网络参数的学习，还会降低预测性能。

[Bike flow prediction with multi-graph convolutional networks\[C\]. advances in geographic information systems, 2018: 397-400.](#)

# 3 图的构建

## ➤ 3.2 多图表示法

- 一般来说，我们希望为具有相似动态流模式的站点之间的边缘分配较大的权重。具体的，作者提出了建立站间图的三种方法:距离图、交互图和相关图。
- 据我们所知，这是首次利用多图卷积神经网络来进行站点级别的共享自行车系统中流量预测。To the best of our knowledge, this is the first work of leveraging multi-graph convolutional neural networks in to predict station-level bike flow in a bike sharing system.



Bike flow prediction with multi-graph convolutional networks[C]. advances in geographic information systems, 2018: 397-400.

# 3 图的构建

## ➤ 3.2 多图表示法

### ➤ 具体设置

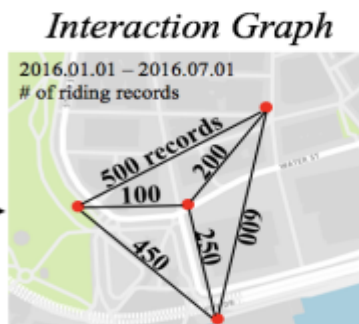
➤ 图1：距离图，即用欧式距离的倒数表示站间权重。 类似于前面的高斯核函数。



$$A = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{150} & \frac{1}{300} & \frac{1}{260} \\ \frac{1}{150} & 0 & \frac{1}{170} & \frac{1}{180} \\ \frac{1}{300} & \frac{1}{170} & 0 & \frac{1}{330} \\ \frac{1}{260} & \frac{1}{180} & \frac{1}{330} & 0 \end{bmatrix}$$

$$G_d(V, E) \quad \text{weight} = \text{distance}^{-1}$$

➤ 图2：交互图，即用历史数据中两个车站之间的行车记录数表示站间权重。



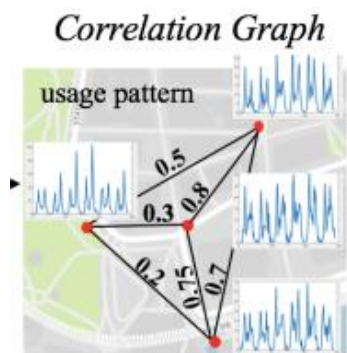
$$A = \begin{bmatrix} 0 & 100 & 500 & 450 \\ 100 & 0 & 200 & 250 \\ 500 & 200 & 0 & 600 \\ 450 & 250 & 600 & 0 \end{bmatrix}$$

$$G_i(V, E) \quad \text{weight} = \# \text{RidingRecordNumber}$$

# 3 图的构建

## ➤ 3.2 多图表示法

- 图3：相关图，计算每个站在每个时间间隔(如1小时)内的历史使用情况(流入或流出)，然后计算每两个站之间的相关性作为图中站间权重。



$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0.3 & 0.5 & 0.2 \\ 0.3 & 0 & 0.8 & 0.75 \\ 0.5 & 0.8 & 0 & 0.7 \\ 0.2 & 0.75 & 0.7 & 0 \end{bmatrix}$$

$$G_c(V, E) \quad \text{weight} = \text{Correlation}$$

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}}$$

- 图融合即将上面的三个图权重矩阵融合为一个图权重。

$$A'_i = D_i^{-1} A_i + I \quad (1 \leq i \leq N)$$

$$F = \sum_{i=1}^N W'_i \circ A'_i$$

Bike flow prediction with multi-graph convolutional networks[C]. advances in geographic information systems, 2018: 397-400.

# 3 图的构建

## ➤ 3.2 多图表示法

### ➤ 部分实验结果

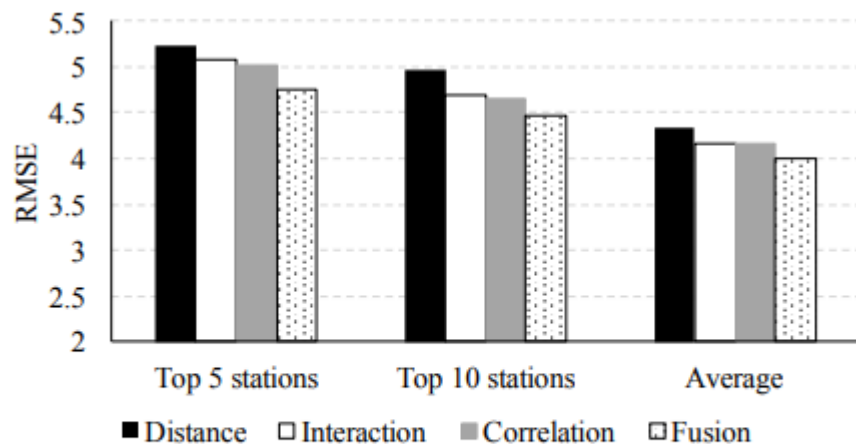


Figure 5: Comparison of multi-graph and single-graph convolutional models (New York City).

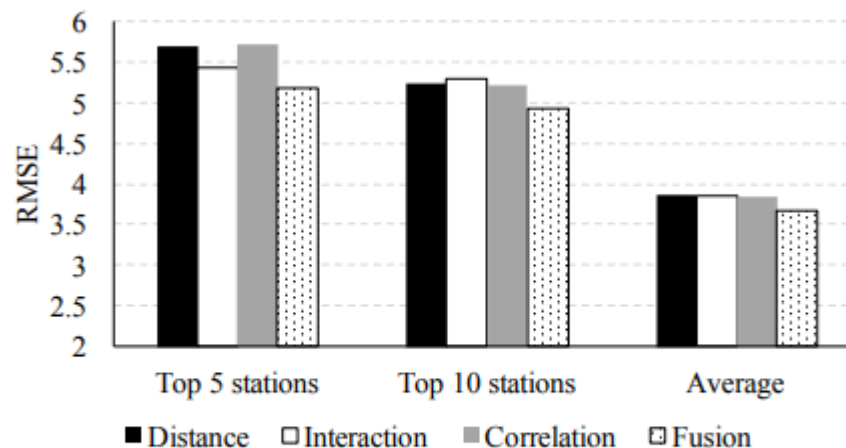


Figure 6: Comparison of multi-graph and single-graph convolutional models (Chicago).

Bike flow prediction with multi-graph convolutional networks[C]. advances in geographic information systems, 2018: 397-400.

# 3 图的构建

## ➤ 3.3 自适应的邻接矩阵

### ➤ 核心思想

➤ 采样类似ChebNet的图卷积操作，同时自适应的学习邻接矩阵。

$$\mathbf{Z} = \sum_{k=0}^K \tilde{\mathbf{A}}_{apt}^k \mathbf{X} \mathbf{W}_k$$
$$\tilde{\mathbf{A}}_{apt}^k \in \mathbf{R}^{N \times N}$$
$$\tilde{\mathbf{A}}_{adp} = SoftMax(ReLU(\mathbf{E}_1 \mathbf{E}_2^T)).$$

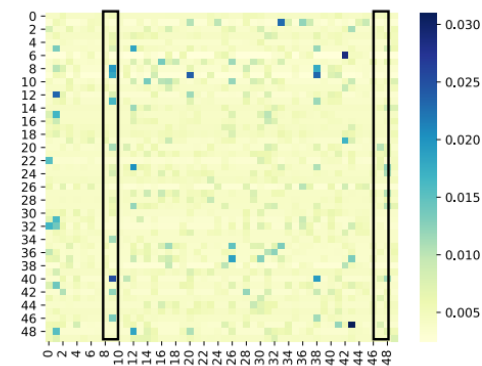


# 3 图的构建

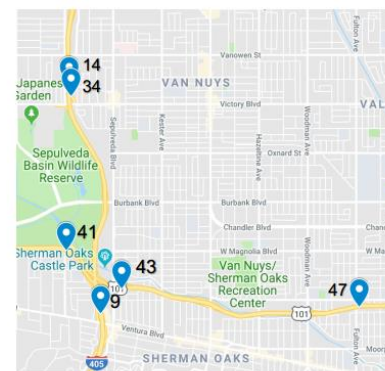
## ➤ 3.3 自适应的邻接矩阵

### ➤ 可视化实验展示

- 右图学习到的邻接矩阵可视化的一个结果。
- 对于9号节点而言，部分节点的关联系数较大。
- 在地图上发现9号节点在两条道路的交汇处，  
然后 41、 43、 47 等其他的节点在这两条道路上。 有比较好的解释性。



(a) The heatmap of the learned self-adaptive adjacency matrix for the first 50 nodes.

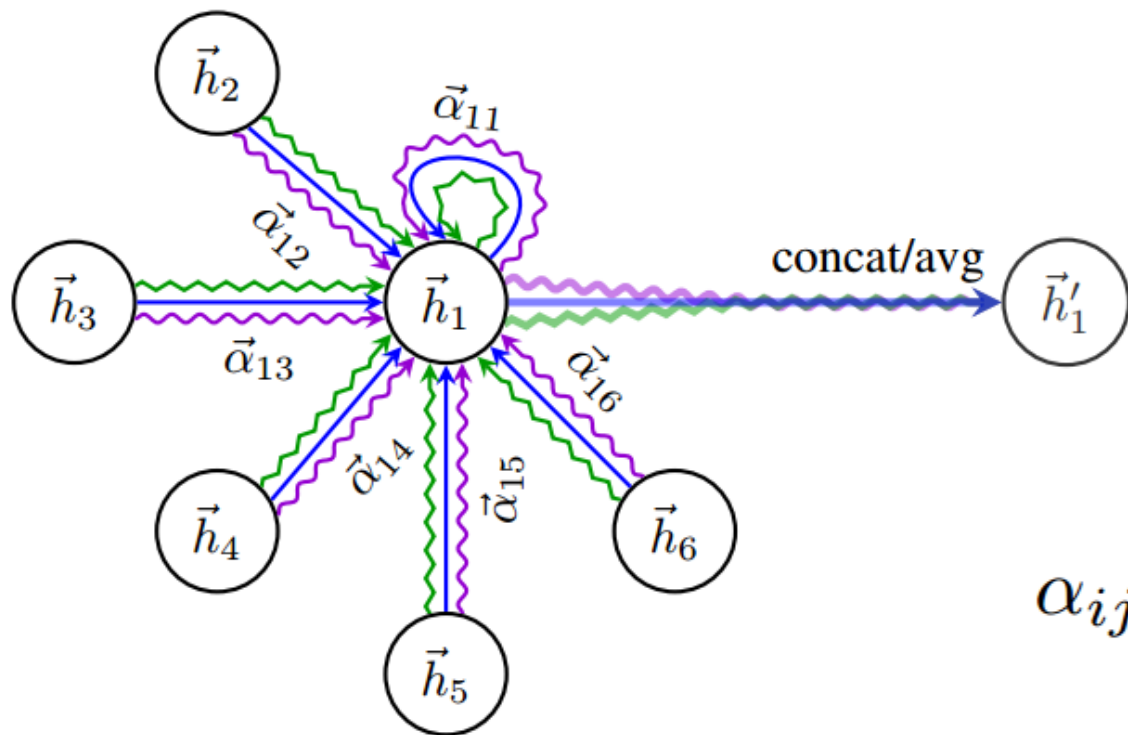


(b) The geographical location of a part of nodes marked on Google Maps.

# 3 图的构建

## ➤ 3.4 attention

➤ Attention机制计算了一个局部图结构。



$$\vec{h}'_i = \sigma \left( \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \alpha_{ij} \mathbf{W} \vec{h}_j \right).$$

$$\vec{h}_i \in \mathbb{R}^F, \vec{h}'_i \in \mathbb{R}^{F'}, \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{F' \times F},$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp \left( \vec{\mathbf{a}}^T [\mathbf{W} \vec{h}_i \| \mathbf{W} \vec{h}_j] \right)}{\sum_{k \in \mathcal{N}_i} \exp \left( \vec{\mathbf{a}}^T [\mathbf{W} \vec{h}_i \| \mathbf{W} \vec{h}_k] \right)}$$

# 小结

---

## ➤ 对于交通数据建模思路的转变小结

### ➤ 1 忽视空间信息

- 仅仅处理单个节点

- 处理多个节点， 使用全连接层

### ➤ 2 构建spatio-temporal matrix

### ➤ 3 构建栅格模型

- 使用经典卷积神经网络

- 在栅格模型上使用图卷积

### ➤ 4 构建图模型

➤ 希望大家能了解这个变化和演变过程， 举一反三， 思考 “处理自己的数据时能不能也使用图卷积网络？” 。

# 小结

---

- 如何构建交通图结构
  - 高斯距离构图
  - 多图表示法
  - 自适应的邻接矩阵
  - Attention
- 主要是传达一点，处理图结构数据，并不是将图卷积模型直接套上去用就完事了。可能在使用图卷积的过程中会遇到其他的问题，比如 图的构建问题、时序信息问题。
- 如何更好的构建图结构仍然是一个待解决的问题。

# 目录

---

- 简介
- 图卷积在交通预测上的应用 (**详讲**)
- 其他方面
  - 天气预测
  - 骨架视频
  - 文本分类
  - ...

# 天气预测

---

## ➤ 任务描述

- 天气预测的目的是根据历史天气数据和气象监测站网络的拓扑结构来预测未来的天气情况状况，如风速、温度以及降水情况。
- 天气预报是一项重要的建模任务，因为它对农业、水资源、交通和我们日常生活的许多其他方面都有重大影响。
- 经典的方法基于物理的模型来生成未来天气状况的预报。近些年，有一些研究者开始使用深度学习的方法来处理天气预测任务。

# 天气预测

## ➤ 数据格式

➤ 天气数据和时间相关，具有时序性。

➤ t时刻的天气数据可以记为：

$$\mathcal{V}_t \in \mathbb{R}^{n \times c}$$

➤ 其中n是节点数，c是通道数。

## ➤ 天气预测任务建模

➤ 在t时刻，根据历史数据和图结构，预测未来数据。



$$[\mathcal{V}_{t-T'+1}, \mathcal{V}_{t-T'+2}, \dots, \mathcal{V}_t; \mathcal{G}] \xrightarrow{h(\cdot)} [\mathcal{V}_{t+1}, \mathcal{V}_{t+2}, \dots, \mathcal{V}_{t+T}]$$

➤ 其中左边是输入，右边是输出， $h(\cdot)$ 是待学习的函数

# 天气预测

## ➤ 数据格式

- IGRA数据集为例子。
- 每个节点包含了 露点 (Dew point)、风速、风向、温度和测量高度五个信息。  $\mathcal{V}_t \in \mathbb{R}^{n \times c}$
- 信息来自于每天两次在特定高度释放的气象气球。
- 预测目标是预测未来12小时的天气变量(温度或风速)之一。。
- 得到的数据集包含了从1996年到2015年的67地点的天气测量数据。

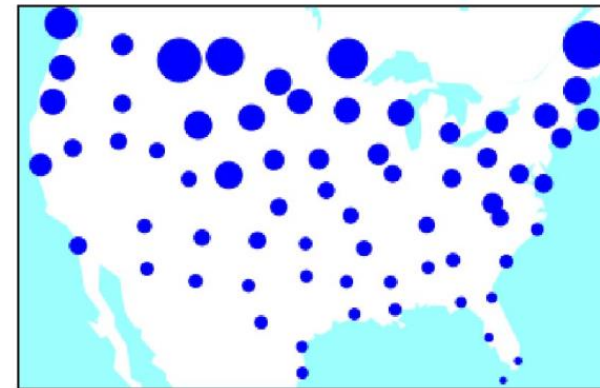


Fig. 4: Plot of IGRA stations with station size scaled to be proportional to the cubic value of MSE for temperature prediction at that station. We see that there are larger errors in the north. Correlation between a station's average error and station temperature standard deviation is 0.82.

TABLE I: Summary of weather datasets.

Dataset	# Locations	Time Period	Training Size
IGRA	67	1996-2015	10,000
GSOD	332	1990-2016	7,800



# 天气预测

## ➤ 所用方法

➤ 文中采用了类似GCN的方法，具体操作为：

$$\begin{aligned}\mathbf{H}^{(l)} &= f^{(l)}(\mathbf{H}^{(l-1)}) \\ &= \sigma(\mathbf{H}^{(l-1)} * \mathbf{W}^{(l)}) \\ &= \sigma(\mathbf{A}\mathbf{H}^{(l-1)}\mathbf{W}^{(l)})\end{aligned}$$

➤ 其中 邻接矩阵  $\mathbf{A}$  和 卷积核参数  $\mathbf{W}$  都是可学习参数。实际上，这篇文章的创新点之一就是设置  $\mathbf{A}$  为可学习参数。

# 天气预测

---

## ➤ 所用方法

- 但是邻接矩阵是一个  $n \times n$  的大矩阵，直接学习这个矩阵参数量太大了，容易过拟合。
- 作者同样采取了矩阵分解的思路：

$$A = U^T V, \quad U, V \in \mathbb{R}^{n \times k}$$

- 一般而言， $k$ 远小于 $n$ 。

# 骨架视频

---

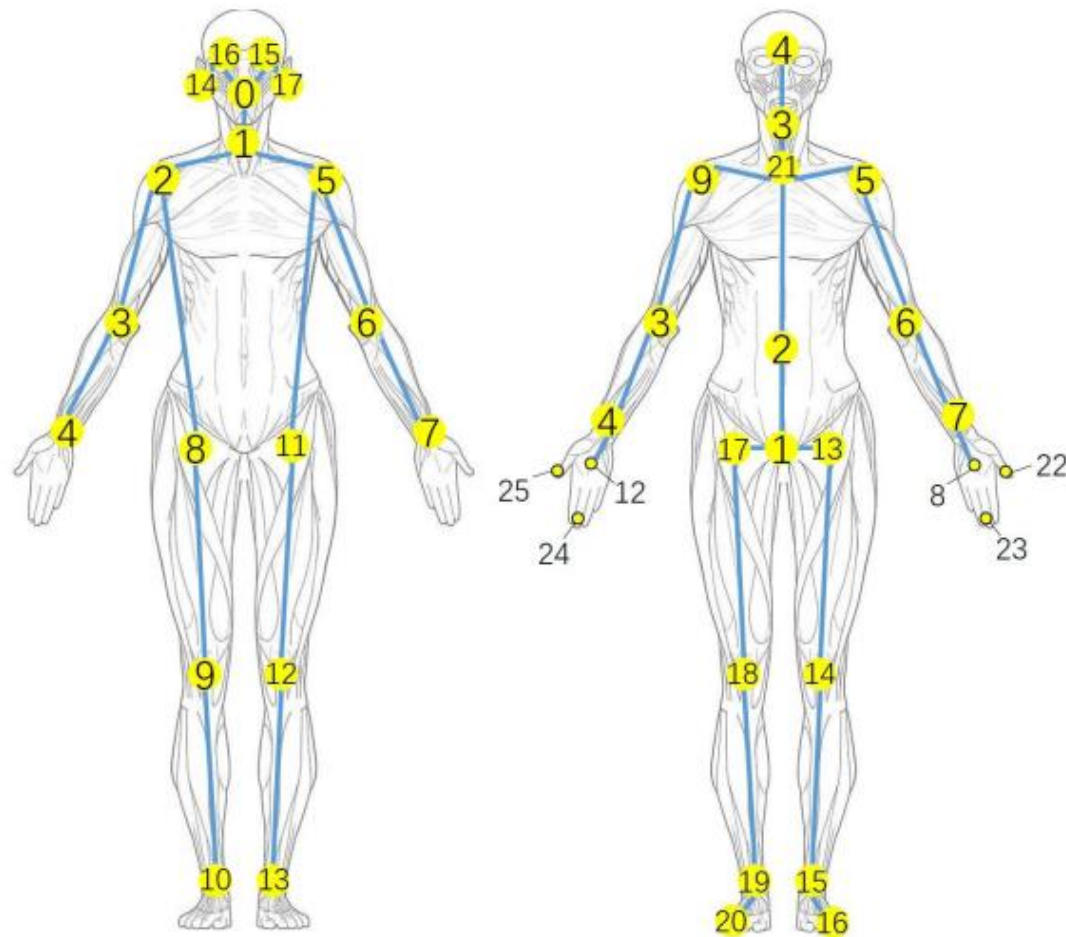
## ➤ 任务描述

- 基于人体骨架的行为识别是一个重要而且具有挑战性的计算机视觉任务。人体图像视频不仅包含了复杂的背景，还有光照变化、人体外貌变化等不确定因素，这使得基于图像视频的行为识别具有一定的局限性。
- 相比图像视频，理论上人体骨架视频可以很好地克服这些不确定因素的影响，所以基于人体骨架的行为识别受到越来越多的关注。
- 骨架动作分类任务为：给定一段骨架视频，识别出这一段视频中的动作。

# 骨架视频

## ➤ 数据格式

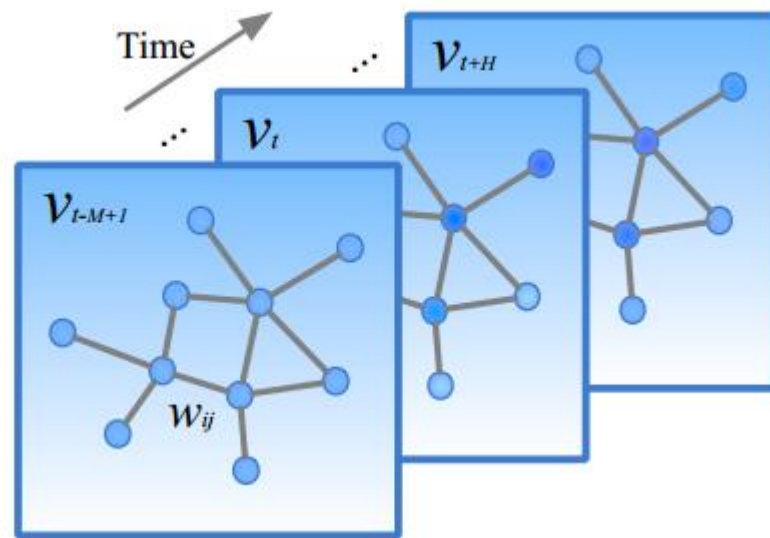
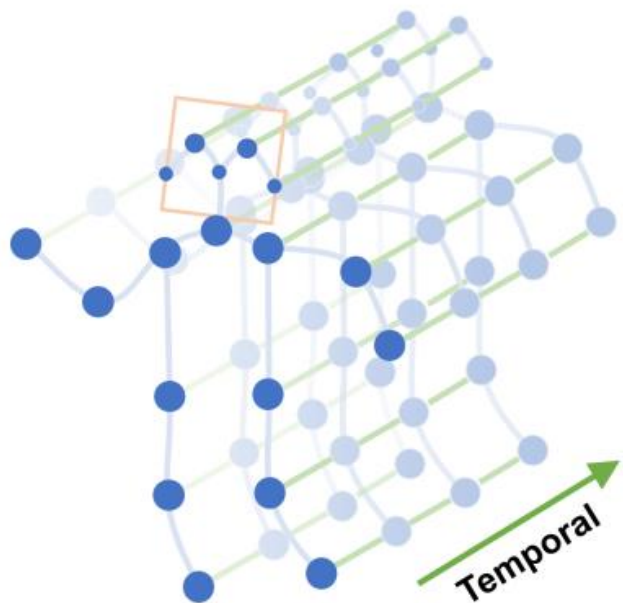
- 骨架视频数据中的节点点对应骨架中的关节点，边对应骨架中的骨骼。
- 不同的数据集对人体的节点设置不同。比如Kinetics 将人体设置为了18个节点，而NTU-RGB+D 有25个节点。



# 骨架视频

## ➤ 数据格式

- 骨架视频也具有时序性。和交通数据、天气数据较为类似。只不过，交通数据上节点的信息是交通数据（流量，车速、拥挤程度等），天气数据上节点的信息是气象数据（温度、风速等），骨架视频上节点的数据是节点坐标数据（在NTU-RGB+D中是  $(x,y,z)$ ，是一个3维向量）。



# 骨架视频

## ➤ 数据格式

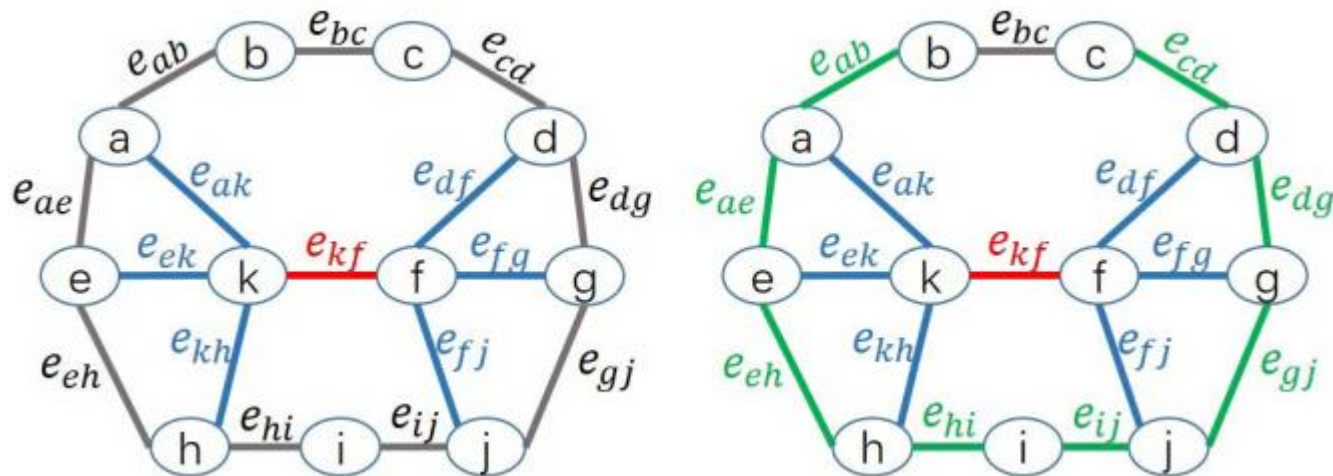
➤ 每一段骨架视频有一个类别，如 喝水、阅读等等。下图展示部分类别。

编号	动作	编号	动作
1	Drink water	2	Reading
3	Take off a hat/cap	4	Pointing to something
5	Eat meal	6	Writing
7	Cheer up	8	Taking selfie
9	Brushing teeth	10	Tear up paper
11	Hand waving	12	Check time (from watch)
13	Brushing hair	14	Wear jacket
15	Kicking something	16	Rub two hands
17	Drop	18	Take off jacket
19	Reach into pocket	20	Nod head/bow

# 骨架视频

## ➤ 所用方法

- 很显然，骨架视频数据作为一种图结构数据，也可以被图卷积网络进行处理。
- 与天气预测任务不同（节点回归任务），骨架视频动作分类是一个图分类任务。
- 在这篇文章中，作者采用了类似PGC的网络来处理骨架视频动作分类任务，同时提出了 图边卷积。 下图是边的一阶邻域和二阶邻域定义。本文的卷积定义在一阶邻域的边上。



# 骨架视频

## ➤ 所用方法

### ➤ 图边卷积的定义为：

$$e_{pq} = \sum_{e_{kl} \in \mathbf{N}(e_{pq})} \frac{1}{Z_{pq}(e_{kl})} e_{kl} \cdot w(l(e_{kl})).$$

- 做法和PGC基本是一样的。也包括取样函数和权重函数。只是对节点上信号的卷积变成了对边上信号的卷积。
- 边上的信号定义为：边中心的位置（3维向量）的坐标和边的方向（3维向量），边上的信号是一个6维向量。
- 有两个网络（节点卷积网络和边卷积网络），最后将两个网络的输出feature融合起来（比如串联）作为最终的输出。有兴趣的同学需要自己去阅读下文。

## PGC

### ➤ 公式

➤ PGC定义在图上的卷积公式最终如下：

$$f_{out}(v_i) = \sum_{v_j \in B(v_i)} \frac{1}{Z_i(v_j)} f_{in}(v_j) \cdot \mathbf{w}(l_i(v_j))$$

取样函数：在一阶邻域内依次取样

归一化系数

权重函数



# 文本分类

---

## ➤ 问题描述

- 文本分类是自然语言处理的一个基本任务，试图推断出给定的文本（句子、文档等）的标签或标签集合。
- 文本分类的应用非常广泛。如：
  - 新闻分类：政治、体育、军事、社会
  - 情感分类：正能量、负能量
  - 垃圾邮件分类：二分类问题，判断邮件是否为垃圾邮件
  - ...

# 文本分类

---

## ➤ 数据格式

- 以20newsgroups为例。20newsgroups数据集是用于文本分类、文本挖掘和信息检索研究的国际标准数据集之一。数据集收集了大约20,000左右的新闻报道，均匀分为20个不同主题的新闻组集合。
- 每一个样本是一篇新闻报道。每篇新闻报道有分类的标签，标志其所属类别，一共有20个，包括体育运动、电脑硬件、政治新闻、科技新闻等等

# 文本分类

---

## ➤ 数据格式

### ➤ ChebNet是如何建模文本数据的：

- 每个样本（新闻报道）是一个图。
  - 图中的节点为整个数据集中的单词。
  - 图中的边为单词之间的关系。
  - 图中节点上的信号是 该样本的词袋数据。
- 假设一个文本数据集内只有两个文本样本。每个样本分别是一句话：
- John likes to watch movies. Mary likes too.
  - John also likes to watch football games.

# 文本分类

---

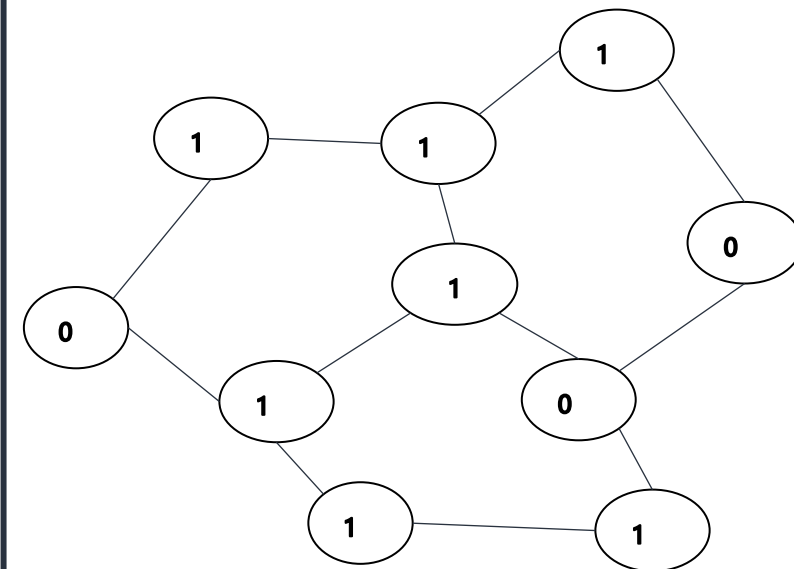
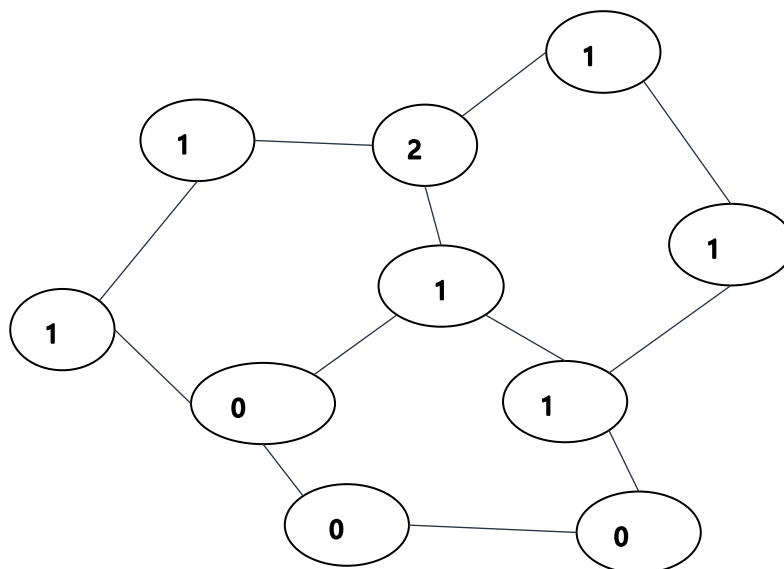
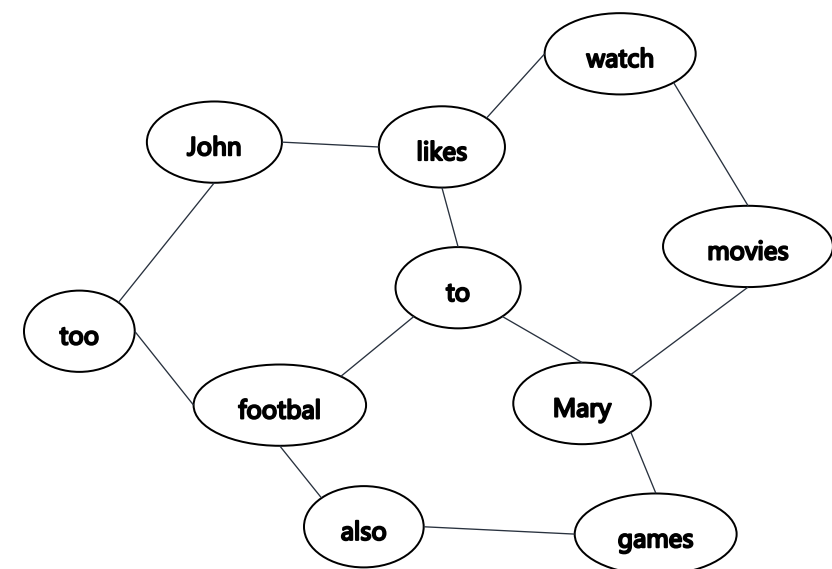
## ➤ 数据格式

- 假设一个文本数据集内只有两个文本样本。每个样本分别是一句话：
  - John likes to watch movies. Mary likes too.
  - John also likes to watch football games.
- 首先可以找出两篇文档中单词的并集，作为dictionary
  - {"John":1, 'likes':2, "to":3, 'watch':4, 'movies':5, 'also':6, 'football':7, 'games':8, 'Mary':9, 'too':10}
- 那么两篇文档统计出来的BoW 向量就是
  - [1,2,1,1,1,0,0,0,1,1]
  - [1,1,1,1,0,1,1,1,0,0]

# 文本分类

## ➤ 数据格式

- 假设一个文本数据集内只有两个文本样本。每个样本分别是一句话：
  - John likes to watch movies. Mary likes too.
  - John also likes to watch football games.



# 文本分类

## ➤ 数据格式

- 在Chebnet 使用 20newsgroups中出现频率最高的10000个单词作为节点。即，节点数是10000.

- 边的关系采用高斯核构建法。Z\_i为第i个单词的词向量：

$$W_{ij} = \exp \left( -\frac{\|z_i - z_j\|_2^2}{\sigma^2} \right)$$

## ➤ 所用方法

- ChebNet

$$x \star_G g_\theta = U g_\theta U^T x = \sum_{k=0}^K \beta_k T_k(\hat{L}) x$$

- 本质上这是一个图分类任务，输入一张图，输入一个类别。
- 前几层是ChebNet的卷积网络层，最后一层是全连接层加softmax做分类任务。

# 小结

---

- 图卷积其他的应用

- 天气预测

- 骨架视频

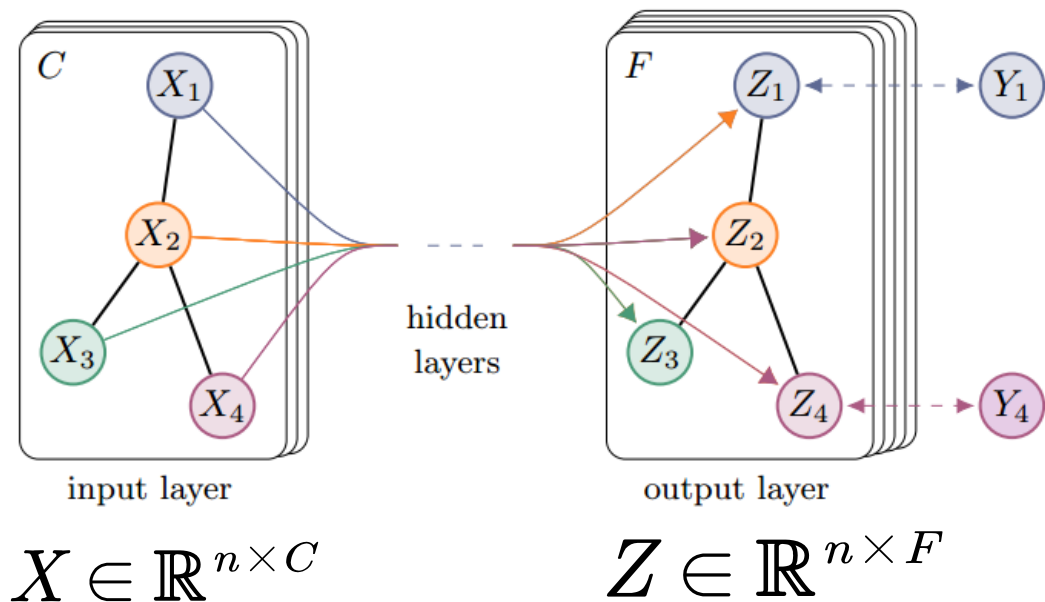
- 文本分类

- ....

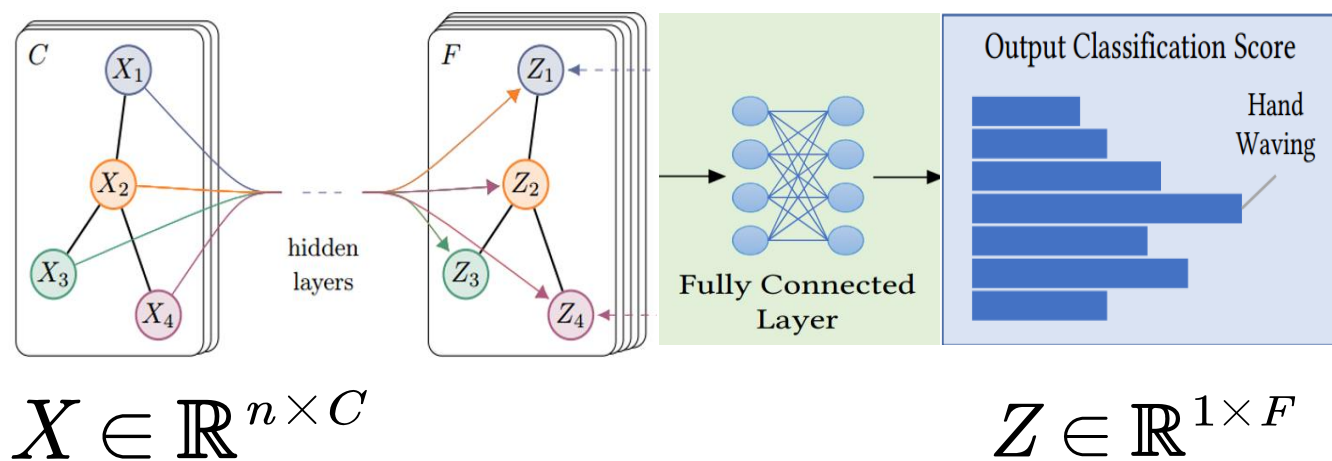
- 介绍了对应数据格式和任务情况。简略的提及了相应的工作。

# 小结

- 交通预测和天气预测可以视为节点回归任务，每个节点输出一个预测值。
- 网络结构上可以不经全连接层，可以是一个全图卷积网络。



- 文本分类和视频骨架分类可以视为图分类任务。整个图只有一个输出值。
- 网络结构上，前几层是图卷积层，一般在最后几层会有全连接层，然后再softmax求得各个类别的概率。





# 小结

---

- 图卷积神经网络的应用
  - 交通预测。 流量预测、速度预测、需求预测等。地铁、出租车、公交、自行车。。。
  - 气象分析。 降雨预测、风速预测、温度预测等。
  - 网络分析。 文章引用网络的节点分类、用户影响力预测等。
  - 生物化学。 分子活性预测。副作用预测。分子分类等。
  - 计算机视觉。 骨架视频处理。3D点云处理。少样本学习。场景图分析等。
  - 自然语言处理。文本分类。句法分析。机器翻译等。
  - 推荐系统。商品推荐等。
  - 物理学。物理系统的推断和预测等。
  - 其他。组合优化。。。。
- 图卷积的应用非常广泛，是一个非常大的概念。
- 如有兴趣了解更多的内容，需要大家课下去花费时间。

## 图卷积神经网络综述

徐冰冰<sup>1),2),3)</sup> 岑科廷<sup>1),2),3)</sup> 黄俊杰<sup>1),2),3)</sup> 沈华伟<sup>1),2)</sup> 程学旗<sup>1),2)</sup>

<sup>1)</sup>(中国科学院网络数据科学与技术重点实验室 北京 100190)

<sup>2)</sup>(中国科学院计算技术研究所 北京 100190)

<sup>3)</sup>(中国科学院大学 北京 100190)

图卷积神经网络综述。计 算 机 学 报。徐冰冰等。



机器之心Pro

3533 文章 | 3697万 总阅读

查看TA的文章>



分享到



## 清华大学图神经网络综述：模型与应用

2018-12-26 12:57

机器之心专栏

作者：PaperWeekly

近年来，图神经网络的研究成为深度学习领域的热点，机器之心曾介绍过清华大学朱文武等人综述的图网络。近日，清华大学孙茂松组在 arXiv 上发布预印版综述文章 Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications。

## Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications

Jie Zhou\*, Ganqu Cui\*, Zhengyan Zhang\*, Cheng Yang, Zhiyuan Liu, Maosong Sun

Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications

谢谢