

# 《计算机模拟》

## 第14讲 – 复杂网络模型

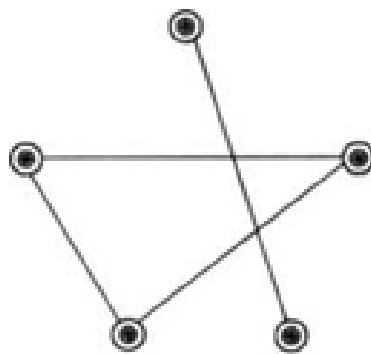
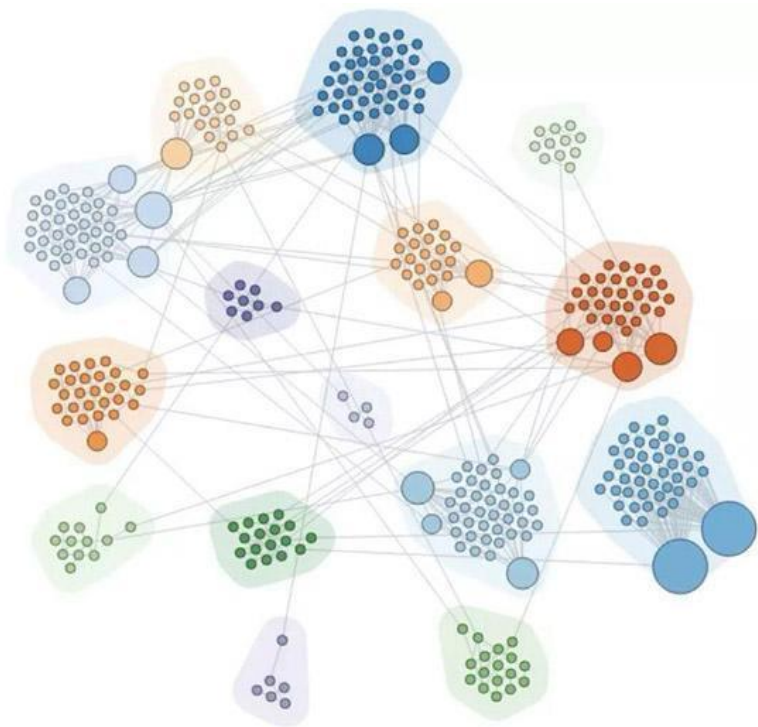
胡贤良

浙江大学数学科学学院

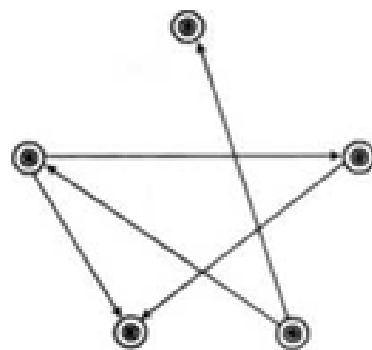
# 1. 复杂网络简介

# 网络的基本概念

- ✓ 网络是由一组节点和一些连接节点的边所构成的图
- ✓ 网络的图应该是连通的，即不存在相互孤立的部分（子图）
- ✓ 如果网络的边具有方向性，则称该网络为**有向网络**；否则，该网络称为**无向网络**
- ✓ 简单图：任意一对节点至多只有一条连接边，且不存在一个节点又自己连接自己的边(圈)



(a) 无向图



(b) 有向图

- **随机图** (random graph):  
边按照完全随机的方式连接节点
- **复杂网络** (complex network):  
边按照某种概率规则连接节点
- **演化网络** (evolving network):  
网络的节点和边随着时间不断地增长

# 复杂网络的基本特征

- **平均路径长度  $L$** : 记  $l_{ij}$  是从节点  $i$  到节点  $j$  所要途经的边的最少数目, 即最短路径长度, 则网络的平均路径长度  $L$  为网络中所有节点对之间距离的平均值, 即

$$\bar{L} = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N l_{ij}$$

- **网络直径  $D$** : 任意两个节点之间距离的最大值:  $D = \max_{i,j} \{l_{ij}\}$ . 网络的平均路径长度  $\bar{L}$  和直径  $D$  越小, 则表明网络中任意节点的距离越近, 这就是所谓“**小世界性**”。
- **度分布  $P(k)$** : 定义节点  $i$  的度  $k_i$  定义为与其相连接的边数, 网络中节点度的分布采用一个概率分布函数  $P(k)$  来描述: 任取一节点的度恰好为  $k$  的概率 (即该网络的度分布)

$$P(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(k - k_i)$$

如果度分布具有某种程度的厚尾性, 则称其为**无标度性**(scale-free)。这时网络中的关键节点并不是极其少数, 这样的网络往往更具稳健性。

# 复杂网络的基本特征 – 聚集系数 C

记 $k_i$ 是节点 $i$ 的度， $n_i$ 是其邻居之间连接的实际边数，那么节点的聚集系数

$$C_i = \frac{2n_i}{k_i(k_i - 1)}$$

$k_i$  个邻居之间最多可能边数  
 $k_i(k_i - 1)/2$

体现了局部处连边的密度情况。**网络的聚类系数**为网络中所有节点的聚集系数的平均值

$$C = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i$$

- 显然， $0 \leq C \leq 1$ 。当 $C = 0$ 时，说明网络中所有节点均为孤立节点，即没有任何连边；当 $C = 1$ 时，说明网络中任意两个节点都直接相连，即网络是一个完全连接图。
- 人们对不同领域内的大量实际网络进行研究后发现：真实网络往往表现出**小世界性**、**无标度性**和**高聚集性**。为了解释这些现象，人们构造了**各种类型**的网络模型，以便从理论上揭示网络行为与网络结构之间的关系，也有助于人们改善网络的特性。

# 案例1：随机图

- 随机图模型是由著名的匈牙利数学家 Paul Erdős 和 Alfred Renyi 在 1959 年提出的，所以常被人们称为**ER 随机图**。
- 构造随机图的两种常用方法(当 $L \approx pN(N - 1)/2$  时等价):

**方法一：** 给定  $N$  个节点， 并且指定图的边数为  $L$ ， 这些边采取从所有可能的  $N(N - 1) / 2$  条边中随机地选出  $L$  条；

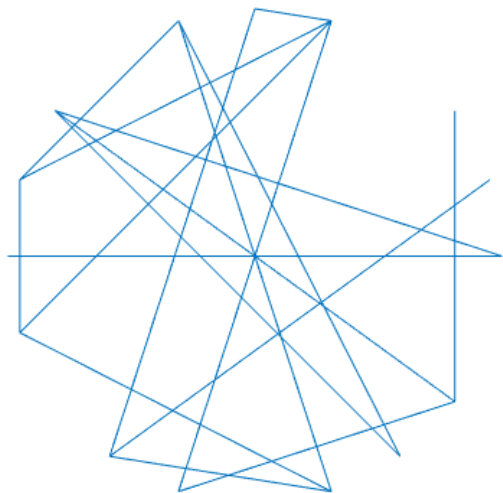
**方法二：** 给定  $N$  个节点， 以一定的连接概率  $p$  去连接所有可能的每对节点。

- 随机图具有（类似于渗流模型的）相变特性。

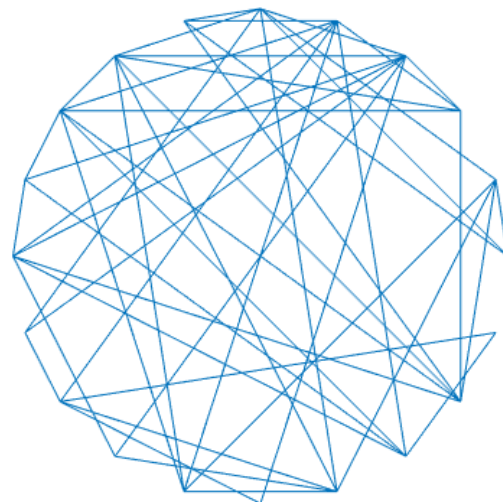


Paul Erdős

# 随机图 (random\_network)实例展示



$$N = 20, p = 0.1$$



$$N = 20, p = 0.25$$

随机图的数学理论非常优美，但应用随机图来建模实际网络会有一些困难：

1. 连接方式的无目的性或者无倾向性
2. 聚集系数过小（因为往往 $N$ 较大而平均度  $\bar{k}$  相对固定）
3. 产生的实际图往往会是不连通的

# 随机图模型

给定连接概率为  $p$  的随机图，若节点数  $N$  充分大，则该图的度分布近似于泊松分布，即为

$$P(k) = C_{N-1}^k p^k (1-p)^{N-1-k} \approx \frac{\bar{k}^k}{k!} e^{-\bar{k}}$$

其中  $\bar{k} = p(N-1) \approx pN$  是随机图的平均度。

➤ 图的平均路径长度为

$$\bar{L} = \frac{\ln N}{\ln(pN)} \approx \frac{\ln N}{\ln \langle k \rangle}$$

由于  $\ln N$  的值随  $N$  增长得较慢，所以规模很大的随机图具有很小的平均路径长度。

➤ 在随机图中，由于任何两个节点之间的连接概率  $p$  都相等，所以其**聚类系数**为

$$C = p = \frac{\bar{k}}{N}$$

➤ 当网络规模  $N$  固定时，聚集系数随着网络节点平均度  $\bar{k}$  的增加而增加。

➤ 当网络节点平均度  $\bar{k}$  固定时，簇系数随着网络规模  $N$  的增加而下降。



## 案例2：小世界网络



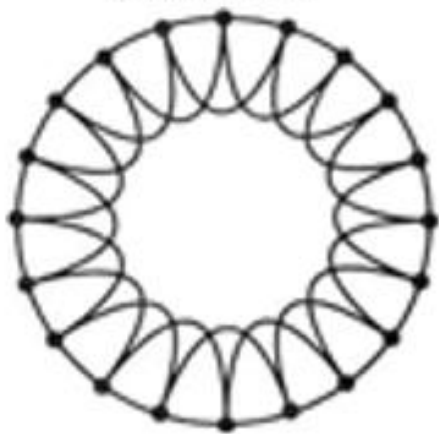
Steven Henry Strogatz

美国康奈尔大学理论和应用力学系的 Duncan James Watts 与 **Steven** Henry Strogatz 于 1998 年 6 月在 Nature 上发表的题为“‘小世界’网络的集体动力学”的文章，建立了一个具有小的平均路径长度和大的聚类系数的网络模型。它被称为**小世界网络模型**。

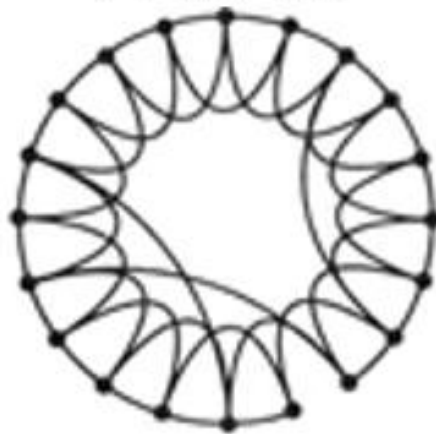
# 小世界网络模型

1. **构造一个规则网络。** 建立一个有  $N$  个节点的近邻相连接的网络，它们围成一个环，其中每一个节点都与它左右相邻的各  $m/2$  个节点相连，其中  $m$  为偶数。
2. **随机重连接。** 以重连接概率  $p$  随机地重新连接网络中的每一条边，即把一条边的一端断开，将它与随机选择的其他一个节点相连接。这里规定：任意一对节点之间至多只能有一条边，并且每个节点不能有与自身相连圈，即不出现自环。

规则网络



小世界网络



https://www.researchgate.net/publication/342646348\_Competing\_local\_and\_global\_interactions\_in\_social\_dynamics

20 Questions Jobs Search for researchers, publications, and more

Article Full-text available

Competing local and global interactions in social dynamics: How important is the friendship network?

July 2020 · Chaos 30(7):073105 · Follow journal  
DOI: 10.1063/5.0004797

Arkadiusz Jędrzejewski · Bartłomiej Nowak · Angelika Abramiuk · Katarzyna Sznajd-Weron

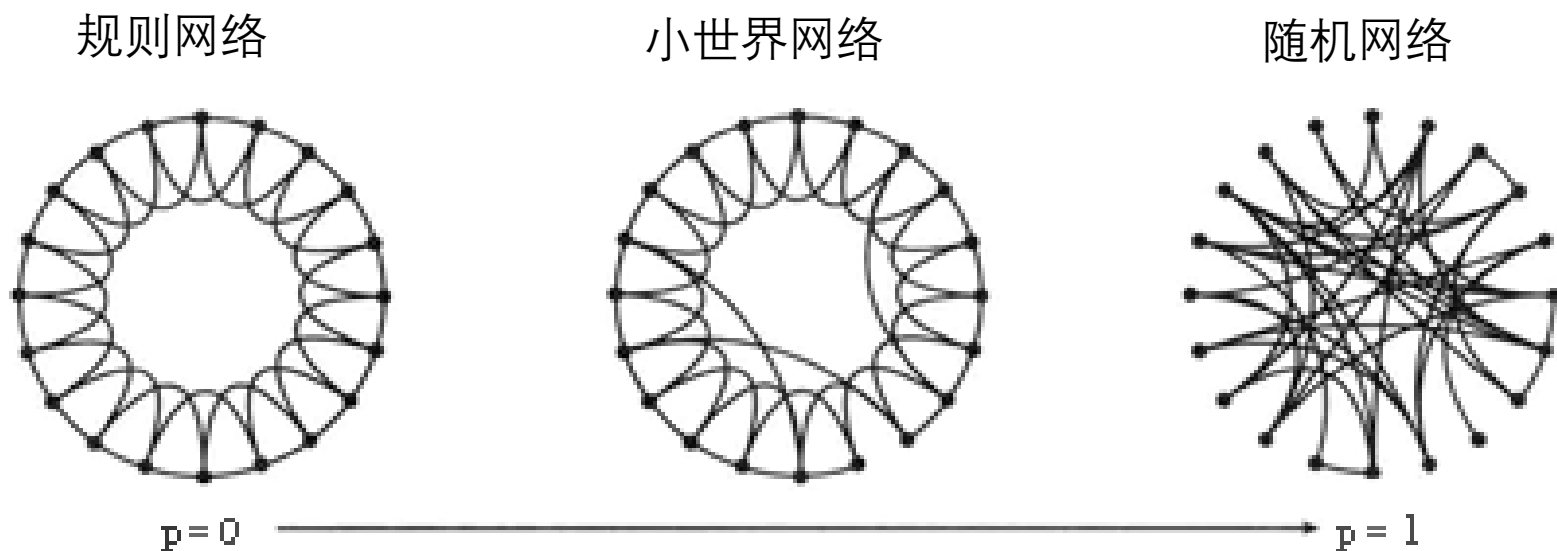
**Katarzyna Sznajd-Weron**  
Wrocław University of Science and Technology  
Department of Theoretical Physics  
Research information  
85 Publications · 2494 Citations

Following Message

Citations References (44) Related research

identifies a correlation between particular social nges, we study the q-voter model with various

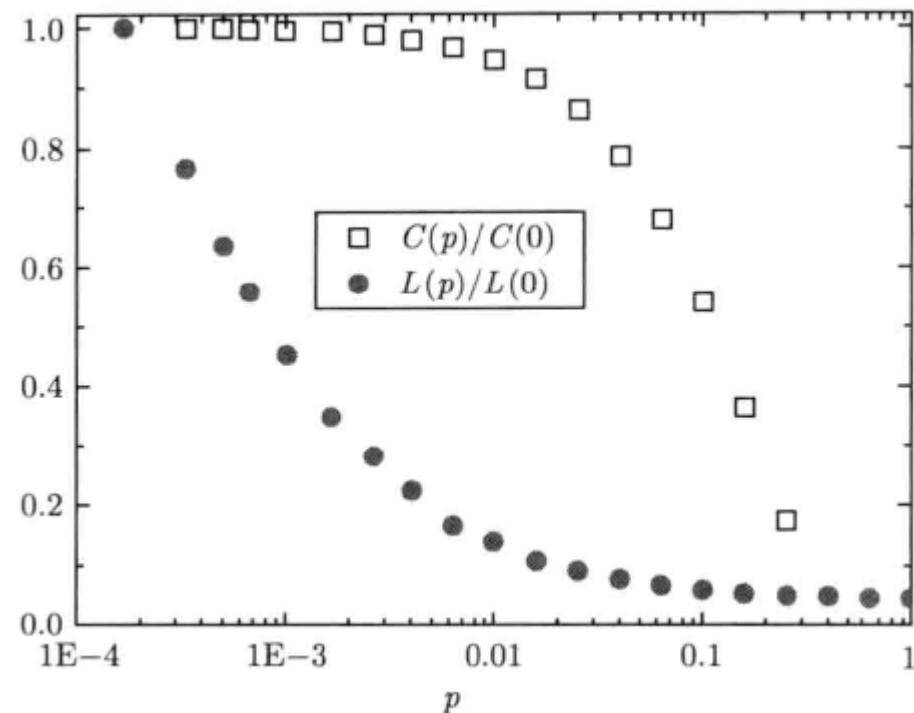
# 小世界网络模型的稀疏性



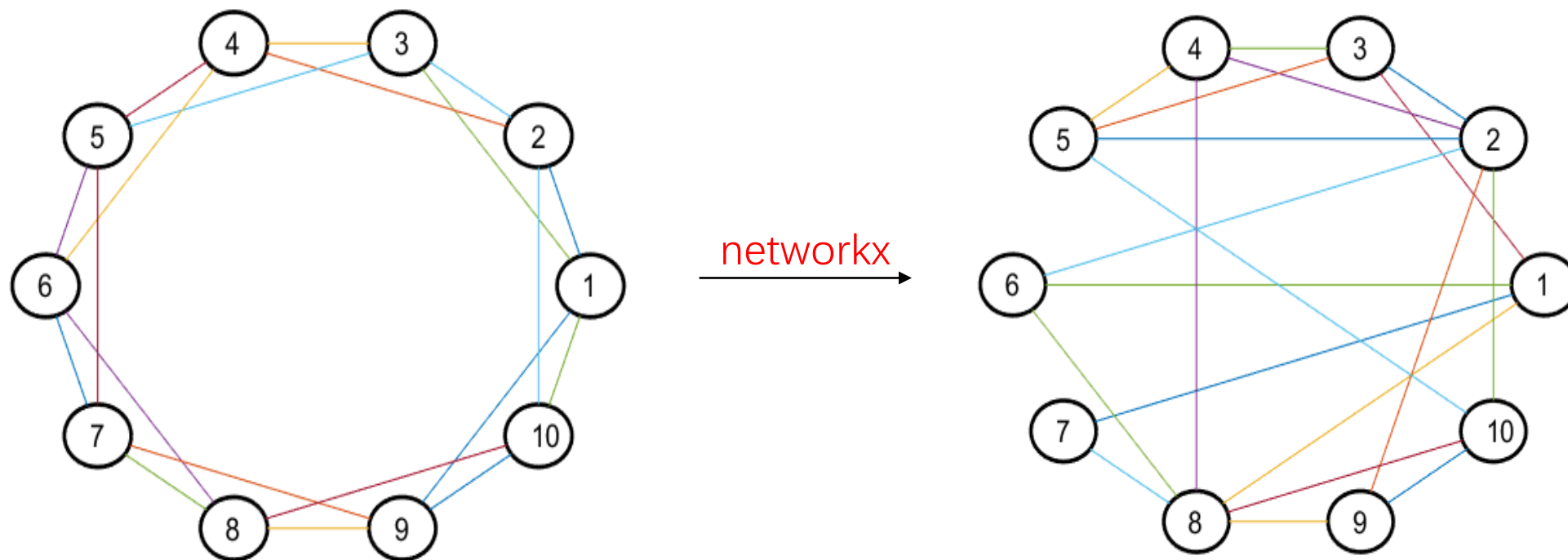
- 为了保证网络具有稀疏性，要求  $N \gg m$ ，这样构造出来的网络模型具有较高聚类系数。
- 网络形成中的随机重新连接过程大大减小了网络的平均路径长度，使网络模型具有小世界特性。
- 当  $p = 0$  时，模型就退化为规则网络，而当  $p = 1$  时，模型则退化为随机网络。

# 小世界网络模型的图特征

- 平均路径长度 $L(p)$ 和聚类系数 $C(p)$ 的值介于规则图与随机图的相应值之间（右图所示）：
- 当 $p$ 在一定范围内，小世界网络可以得到既有较短的平均路径长度（小世界性），又有较高聚类系数的网络。
- 许多社会网络模型就是以小世界网络为基础的。
- 在度分布方面它却与随机图类似，小世界网络的度分布可近似用泊松分布来表示。
  - 由于泊松分布的特性，随机图和小世界网络的节点度主要集中在其平均值 $\bar{k}$ 附近。当 $k$ 增大时将按指数函数快速衰减。故这类网络被称为**均匀网络或指数网络**。



## 小世界 (small\_world) 网络案例



左图:初始的规则网络; 右图: 生成的小世界网络

$$N = 10; m = 2; p = 0.3$$

# 案例3：无标度网络

大量的实际研究表明：许多大规模真实网络，如因特网、万维网、人际关系网、新陈代谢网络等复杂网络的**度分布**都呈现**幂律分布**形式：

$$P(k) \propto k^{-\gamma}, \text{ 其中 } \gamma \text{ 是幂指数, (通常 } 1 \leq \gamma \leq 4 \text{)}$$

这类网络中，大部分节点的度都很小，但也有一小部分节点具有很大的度，意味着节点的度**缺乏**一个特征标度，故称为**无标度网络**。

美国圣母大学物理系的 Albert-Laszlo Barabasi 教授于 1999 年 10 月在 Science 上发表题为“**随机网络中标度的涌现**”的文章。在文章中他们提出了一个能够生成具有无标度特性的复杂网络模型，称为**BA网络模型**，它很好地诠释了复杂网络无标度特性的产生机理。

《爆发》是一本超越《黑天鹅》的惊世之作。如果说塔勒布认为人类行为是随机的，都是小概率事件，是不可以预测的；那么全球复杂网络权威巴拉巴西则认为，人类行为93%是可以预测的。



人类行为93%是可以预测的，揭开人类行为背后隐藏的模式  
The Hidden Pattern behind  
Everything We Do



全球复杂网络研究权威  
Albert-László Barabási  
《黑天鹅》作者塔勒布、巴拉巴西的合著，与塔勒布  
《黑天鹅》作者塔勒布、巴拉巴西的合著，与塔勒布

# BA网络模型的构造

## ➤ 现实网络的两个内在机制：

- A. **增长性**：大多数真实网络是一个开放系统，随着时间的推移，网络规模将不断增大，即网络中的节点数和连边数是不断增加的。
- B. **择优连接**：新增加的节更倾向于与那些具有较高度的节点相连。

## ➤ 基于上述特性,给出BA网络模型的如下构造方法：

- a) **增长性**：设置初始时刻的网络有 $m_0$ 个节点；每一个时间步增加一个度为 $m$ 的节点( $m < m_0$ )，即要新添 $m$ 条与它相连接的边；转下一步骤去挑选出 $m$ 个节点并与之连接。
- b) **择优连接**：**以概率方式来挑选节点**，从已有网络中选择节点 $i$ 的概率 $\pi_i$  **正比于**该节点的度 $k_i$ ，即

$$\pi_i = \frac{k_i}{\sum_j k_i}.$$

- ✓ 独立地进行  $m$  次选择，每次选出一个节点并添加与新的节点的连接边,但不能与前面的重复。
- 经过  $t$  时间步后， 算法产生一个含有  $N = m_0 + t$  个节点和  $mt$  条边的网络。

# BA网络模型的基本特征(结论)

① BA 网络模型的**平均路径长度**:

$$L \propto \frac{\log N}{\log \log N},$$

这表明 BA 无标度网络也具有小世界性。

② BA 网络的**度分布**:

$$P(k) = \frac{2m(m+1)}{k(k+1)(k+2)} \propto 2m^2 k^{-3},$$

这表明 BA 网络的度分布可以由幂指数为 3 的幂律函数来近似描述, 它确实具有无标度性。

③ 网络的**聚集系数**:

$$C = \frac{m^2(m+1)^2}{4(m-1)} \left[ \ln \left( \frac{m+1}{m} \right) - \frac{1}{m+1} \right] \frac{[\ln(t)]^2}{t},$$

这与随机网络类似, 当网络规模充分大时( $t \rightarrow \infty$ ), BA 网络的聚集系数很小。

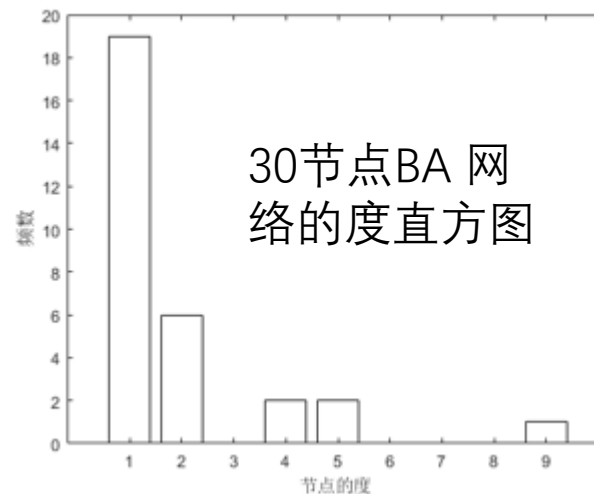
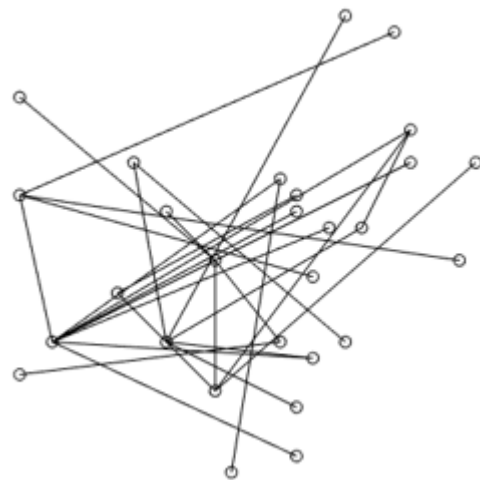


# 无标度网络实例展示 (demo\_complex-network)

对 $m_0 = 1, m = 1$ 的情况模拟:

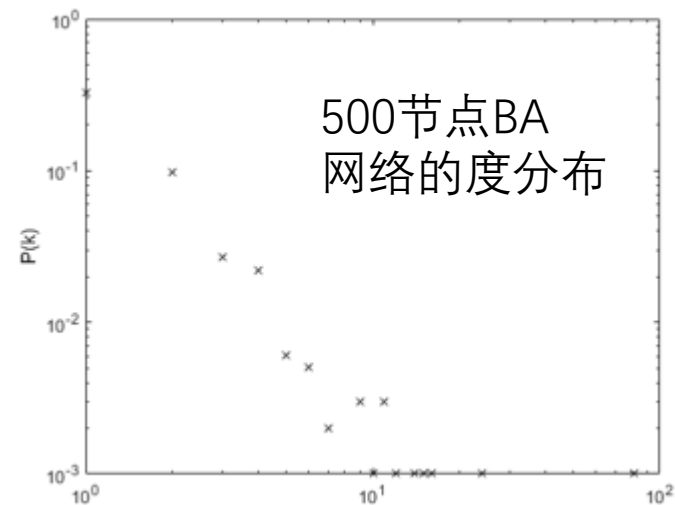
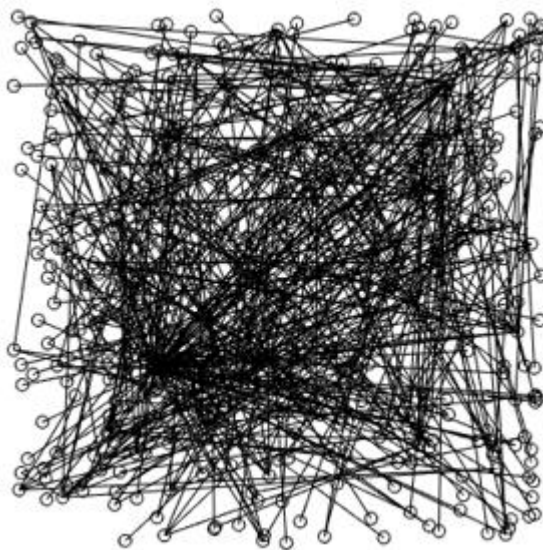
1.  $N = 30$ , 边数=29, 平均度=1.933

模拟生成的30  
节点BA 网络



2.  $N = 500$ , 边数499, 平均度1.966

模拟生成的 500  
节点BA 网络



## 2. 图卷积神经网络简介

# 二维卷积

## ➤ 卷积定义

$$z(u, v) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \sum_{j=-\infty}^{\infty} x_{i,j} \cdot k_{u-i,v-j}$$

➤ 设 $X$ 是 $m \times m$ 阶矩阵,  $K$ 是 $n \times n$ 阶矩阵,  $K_{rot}$ 是由 $K$ 旋转 $180^\circ$ 得到。等价定义

$$z(u, v) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_{u+i,v+j} \cdot k_{rot\ i,j}$$

$a, b$ 的下标相加都为1, 1

$$f = \begin{bmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & a_{0,2} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,0} & a_{2,1} & a_{2,2} \end{bmatrix} \quad g = \begin{bmatrix} b_{-1,-1} & b_{-1,0} & b_{-1,1} \\ b_{0,-1} & b_{0,0} & b_{0,1} \\ b_{1,-1} & b_{1,0} & b_{1,1} \end{bmatrix}$$

$$c_{1,1} = a_{0,0}b_{1,1}$$

1 <sub>x1</sub>	1 <sub>x0</sub>	1 <sub>x1</sub>	0	0
0 <sub>x0</sub>	1 <sub>x1</sub>	1 <sub>x0</sub>	1	0
0 <sub>x1</sub>	0 <sub>x0</sub>	1 <sub>x1</sub>	1	1
0	0	1	1	0
0	1	1	0	0

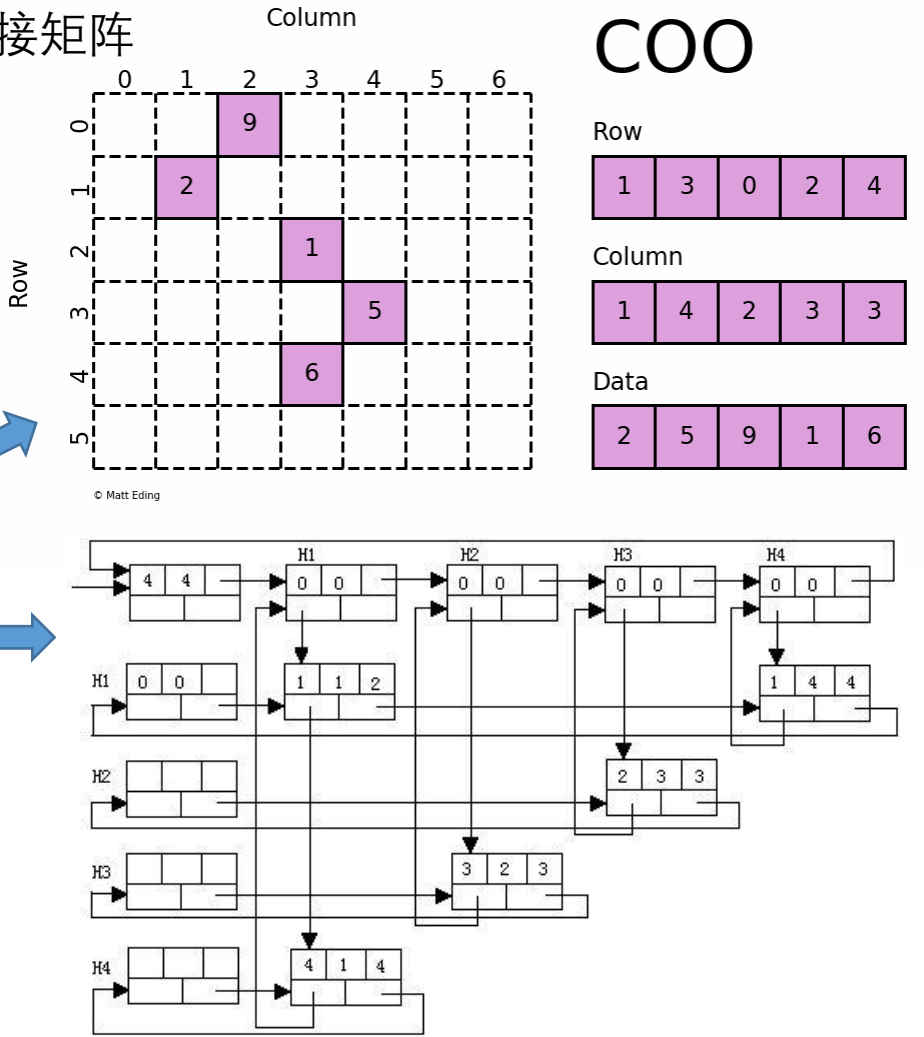
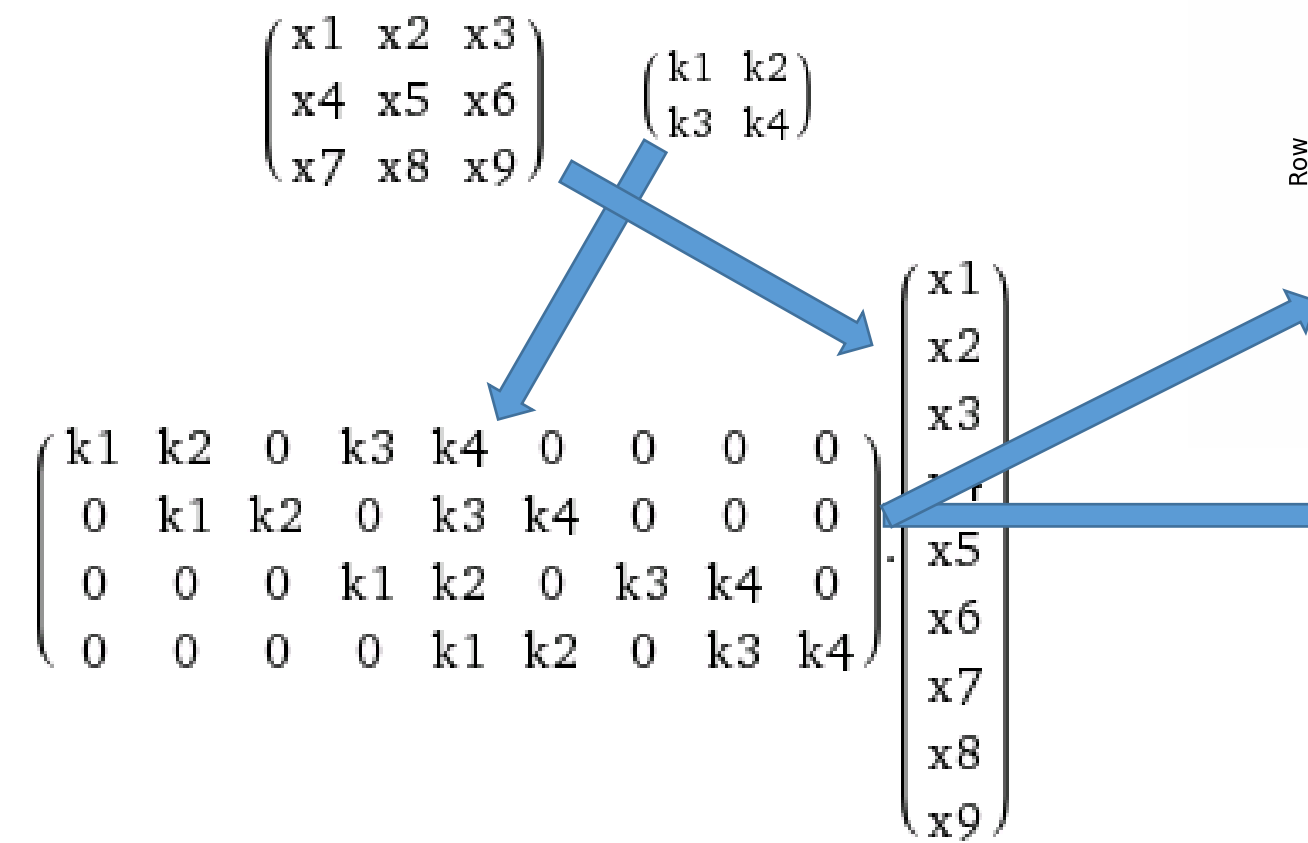
Image

4		

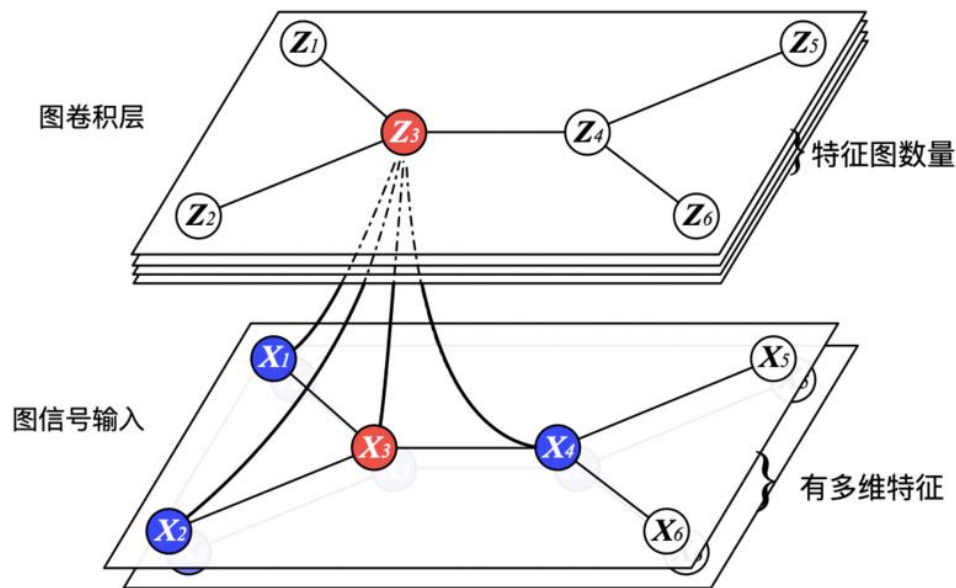
Convolved  
Feature

# 实用技术：卷积运算的稀疏矩阵乘法方案

将卷积运算转化为矩阵乘法，卷积核转化得到的矩阵形式类似邻接矩阵



# 图与卷积



➤ 图的定义:  $M = (V, W)$ ,  $V \in \mathbb{R}^{N \times 3}$ ,  $W \in \{0,1\}^{N \times N}$

进一步地, 定义 Normalized Laplacian matrix:

$$L = I - D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}$$

其中,

$$D_{i,i} = \sum_j W_{i,j}$$

➤ 图卷积的定义方式:

① spectral-based:

- a) Spectral Convolutional Neural Network
- b) Chebyshev Spectral CNN (ChebNet)
- c) Graph Convolutional Network (GCN)

② spatial-based:

- a) Neural Network for Graphs (NN4G)
- b) Diffusion Convolutional Neural Network
- c) Message Passing Neural Network (MPNN)

# ① Spectral-based methods

归一化的 Laplacian 矩阵是对称半正定矩阵，可被分解为：

$$L = U \Lambda U^T, \quad \text{其中 } U^T U = I$$

对于一个图信号  $x \in R^N$ ，它的图傅里叶变换(Spectral domain)

为  $F(x) = U^T x$ ，对应的逆傅里叶变换为:  $F^{-1}(\hat{x}) = U \hat{x}$

图信号  $x$  和滤波器  $g \in R^N$  的卷积定义为：

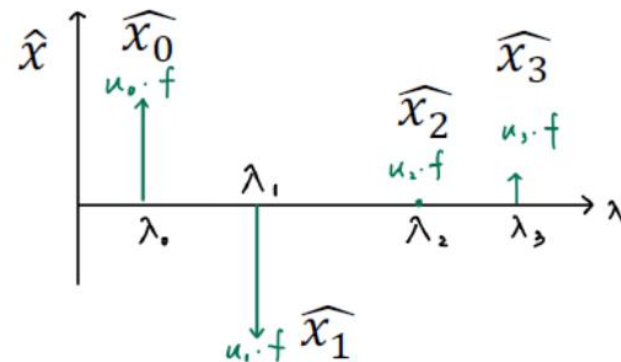
$$x * G_g = F^{-1}(F(x) \odot F(g)) = U(U^T x \odot U^T g)$$

令  $g_\theta = \text{diag}(U^T g)$ ，可化简为：

$$x * G_{g_\theta} = U g_\theta U^T x$$

选取不同的  $g_\theta$  可获得不同的图卷积

$$x = U \hat{x}$$



**Spectral CNN:** 将滤波器设为可学习参数的对角矩阵

$$g_{\theta} = \Theta_{i,j}^k$$

得到:

$$H_{:,j}^{(k)} = \sigma \left( \sum_{i=1}^{f_{k-1}} U \Theta_{i,j}^{(k)} U^T H_{:,j}^{(k-1)} \right) \quad (j = 1, 2, \dots, f_k)$$

其中,  $H^{(k-1)} \in R^{n \times f_{k-1}}$ ,

$f_{k-1}$  为输入通道数,  $f_k$  为输出通道数

- 论文: [Spectral networks and locally connected networks on graphs](#)

**ChebNet:** 将  $g_{\theta}$  定义为特征值对角矩阵的切比雪夫多项式, 即  $g_{\theta} = \sum_{i=1}^K \theta_i T_i(\tilde{\Lambda})$ , 其中  $\tilde{\Lambda} = \frac{2\Lambda}{\lambda_{max}} - I_N$ . 即有:

$$x * G_{g_{\theta}} = U \left( \sum_{i=1}^K \theta_i T_i(\tilde{\Lambda}) \right) U^T x$$

令  $\tilde{L} = \frac{2L}{\lambda_{max}} - I_N$ , 由于  $U T_k(\tilde{\Lambda}) U^T = T_k(\tilde{L})$ , 于是图卷积:

$$x * G_{g_{\theta}} = \sum_{i=1}^K \theta_i T_i(\tilde{L}) x$$

论文: [Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering](#)

**GCN:** 定义一个ChebNet的一阶近似。令  $K = 1, \lambda_{max} = 2$ , 则卷积简化为

$$x * G_{g_{\theta}} = \theta_0 x - \theta_1 D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}} x$$

为减少参数数量防止过拟合, 令  $\theta = \theta_0 = -\theta_1$ , 于是有:

$$x * G_{g_{\theta}} = \theta (I_N + D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}) x$$

组合多维输入信号:

$$X^{k+1} = \tilde{W} X^k \Theta,$$

$$\tilde{W} = I_N + D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}$$

- 论文 [Semi-supervised classification with graph convolutional networks](#)

## ② spatial-based

- Neural Network for Graphs (NN4G) 做法是直接将相邻顶点相加:

$$h_v^{(k)} = f(W^{(k)T} x_v + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{u \in N(v)} \Theta^{(k)T} h_u^{(i-1)})$$

- Diffusion Convolutional Neural Network (DCNN)将图卷积看作扩散的过程, 可在几次迭代中达到平衡

$$H^{(k)} = f(W^{(k)} \odot P^k X)$$

其中,  $P \in R^{N \times N}$  为概率转移矩阵,  $P = D^{-1}W$ . 最终将  $H^{(1)}, H^{(2)}, \dots, H^{(K)}$  拼接起来作为输出。

- Message Passing Neural Network (MPNN)将图卷积看作信息传递的过程, 即信息可以从一个点通过边直接传递到相邻点上

$$h_v^{(k)} = U_k(h_v^{(k-1)}, \sum_{u \in N(v)} M_k(h_v^{(k-1)}, h_u^{(k-1)}, x_{vu}^c))$$

其中,  $U_k(\cdot), M_k(\cdot)$  为可学习变量的函数。最终  $h_v^{(K)}$  可经过一个输出层来做节点级别的预测任务, 也可通过一个 readout function 来做图级别的预测任务:

$$h_G = R(h_v^{(K)} | v \in G)$$



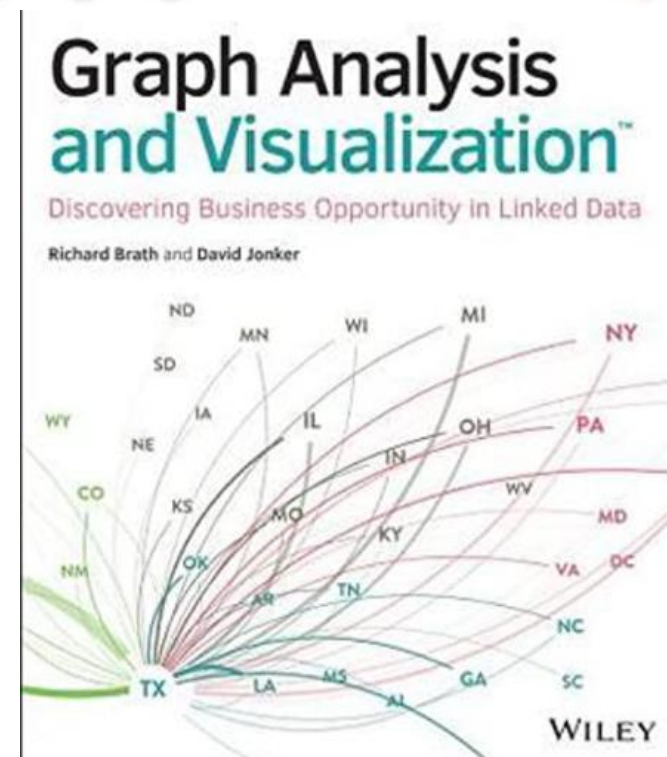
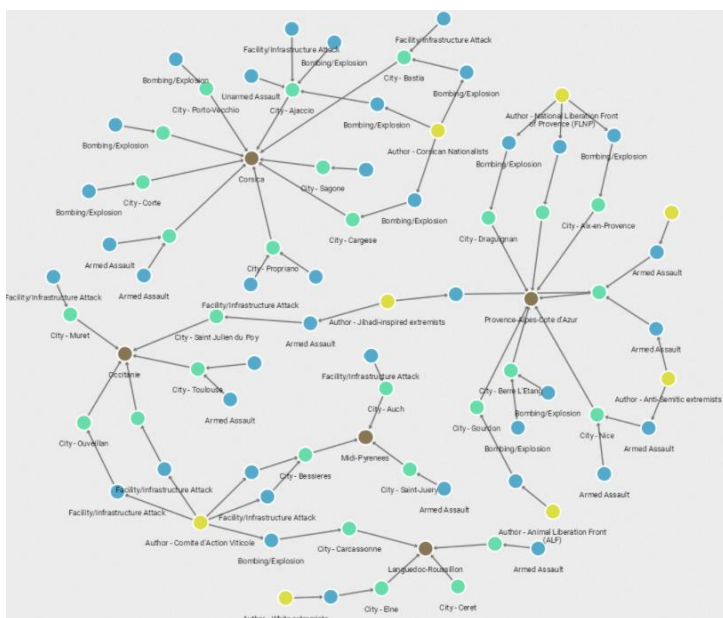
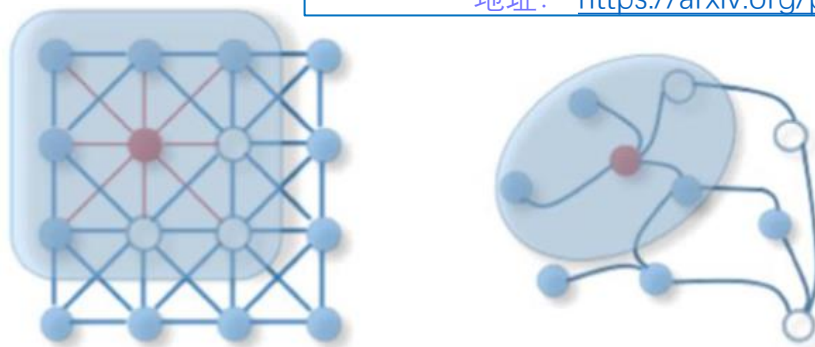
# 图分析 - Graph Analysis

论文: A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks  
地址: <https://arxiv.org/pdf/1901.00596.pdf>

- 基于邻域信息的局部
- 基于图的分析任务

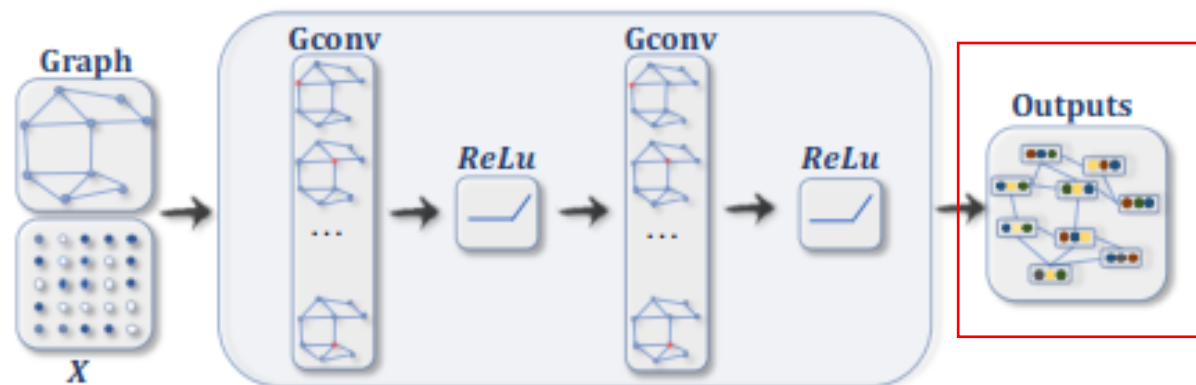
1. Node Level

2. Edge Level



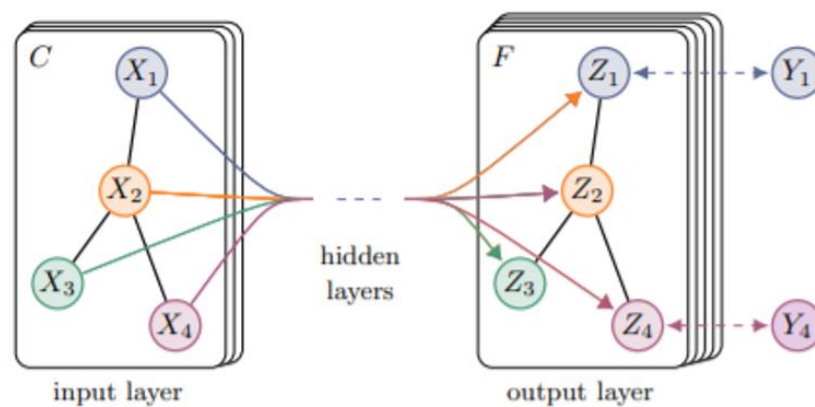
# 1. Node Level

图卷积用于节点预测，通过多个卷积层输出每个节点的预测值或者向量。



案例： Semi-supervised classification with graph convolutional networks

<https://arxiv.org/pdf/1609.02907.pdf>



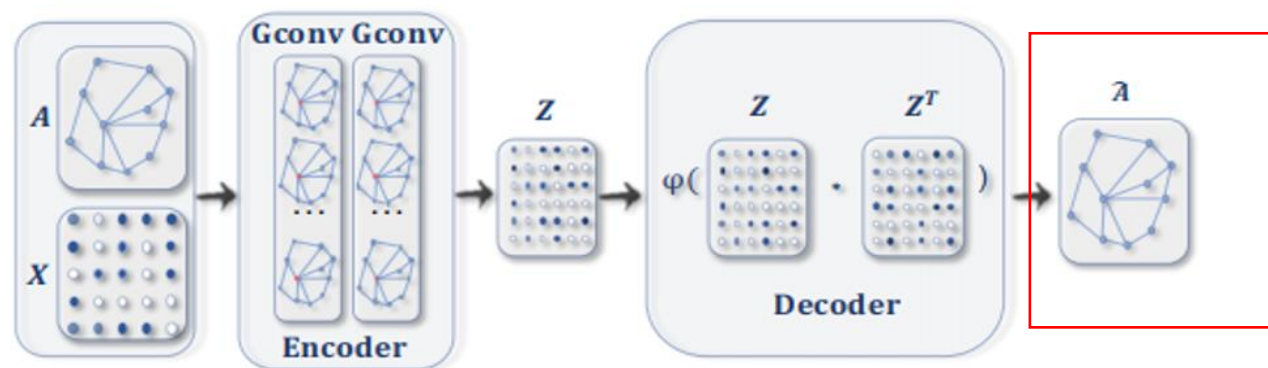
(a) Graph Convolutional Network



(b) Hidden layer activations

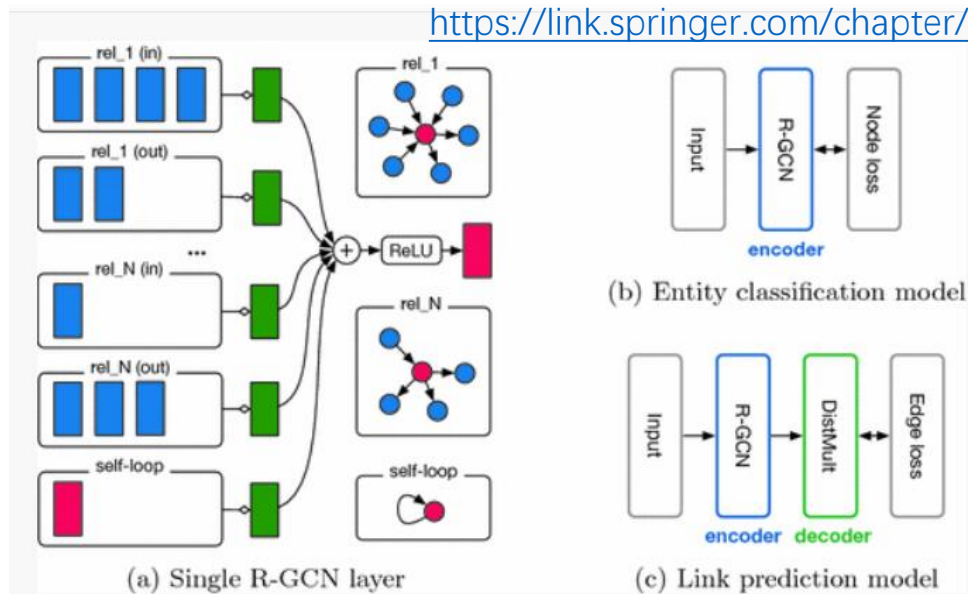
## 2. Edge Level

图变分自编码器用于链路预测



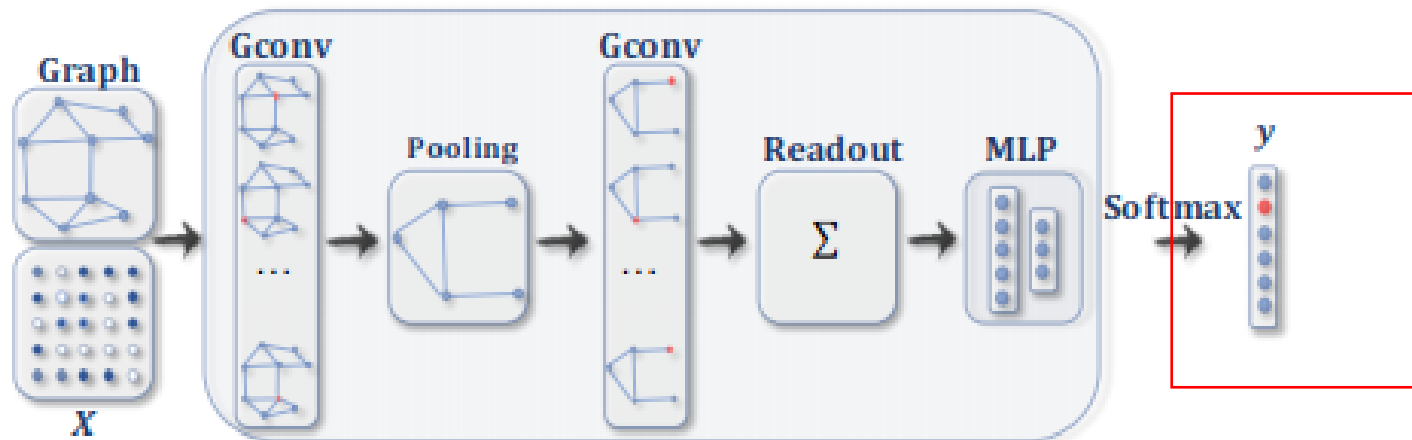
案例：链路预测：Modeling Relational Data with Graph Convolutional Networks

[https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-93417-4\\_38](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-93417-4_38)



### 3. Graph Level

通过池化层和readout函数，提取图级别的表示，最终达成图级别的分类任务



案例：Convolutional Networks on Graphs for Learning Molecular Fingerprints  
借助分子结构使用图卷积神经网络学习分子指纹 <https://arxiv.org/pdf/1509.09292.pdf>

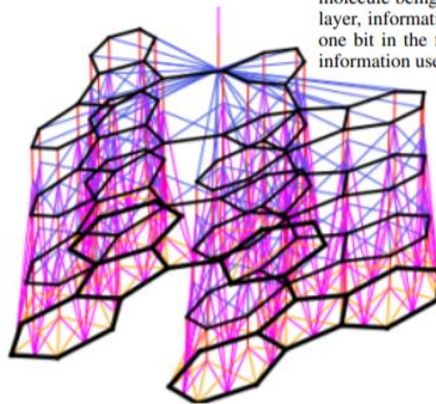
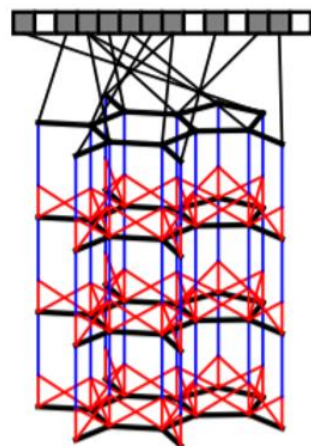


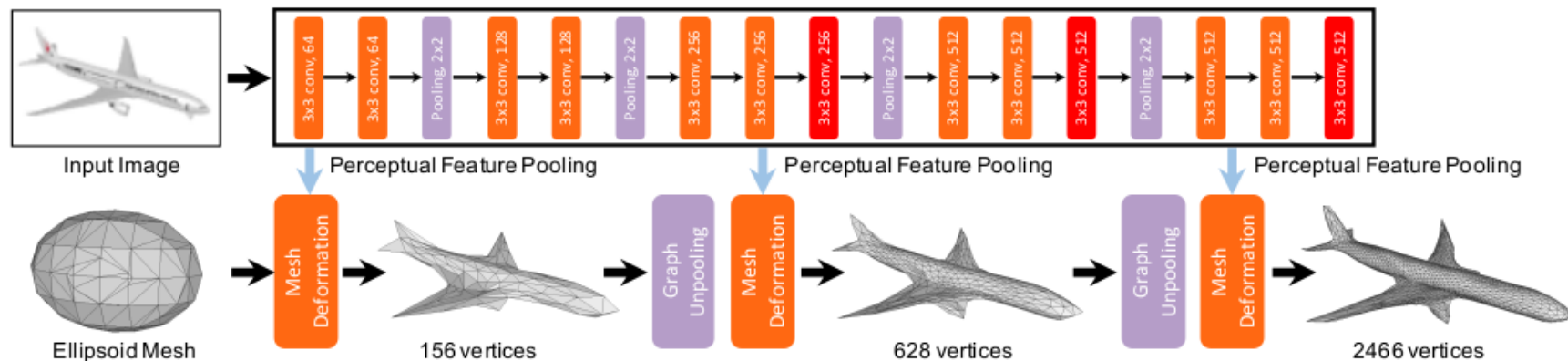
Figure 1: *Left:* A visual representation of the computational graph of both standard circular fingerprints and neural graph fingerprints. First, a graph is constructed matching the topology of the molecule being fingerprinted, in which nodes represent atoms, and edges represent bonds. At each layer, information flows between neighbors in the graph. Finally, each node in the graph turns on one bit in the fixed-length fingerprint vector. *Right:* A more detailed sketch including the bond information used in each operation.

# 应用： 三维表面网格变形

论文:Pixel2Mesh: Generating 3D Mesh Models from Single RGB Images  
地址:<https://arxiv.org/pdf/1804.01654>

- **网格 = 模型**，通过数学公式建立网格形变算法

- 优点：对于不同网格算法通用；无需训练；可解释性强；
- 缺点：实时性差；效果较差；



- **网格 = 数据**,数据集训练变形算法. 如: Pixel2Mesh

- 优点：实时性较好；效果贴近真实情况；
- 缺点：可解释性差；需要训练；只适用于部分网格



# 案例：三维表面网格生成/重建

## Pixel2Mesh++: Multi-View 3D Mesh Generation via Deformation

Chao Wen

Yinda Zhang

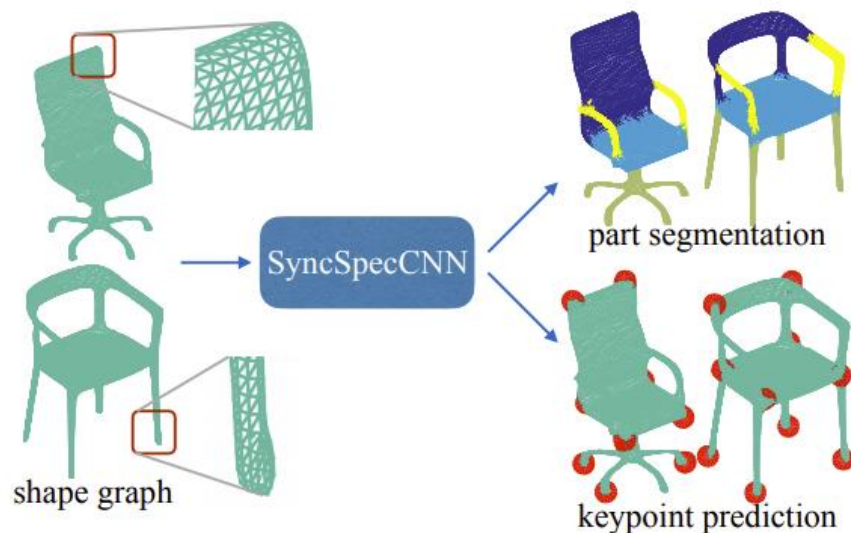
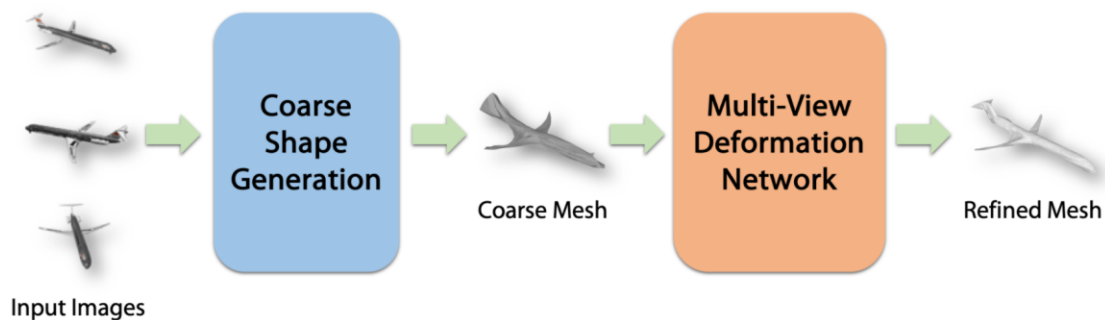
Zhuwen Li

Yanwei Fu

Fudan University

Google LLC

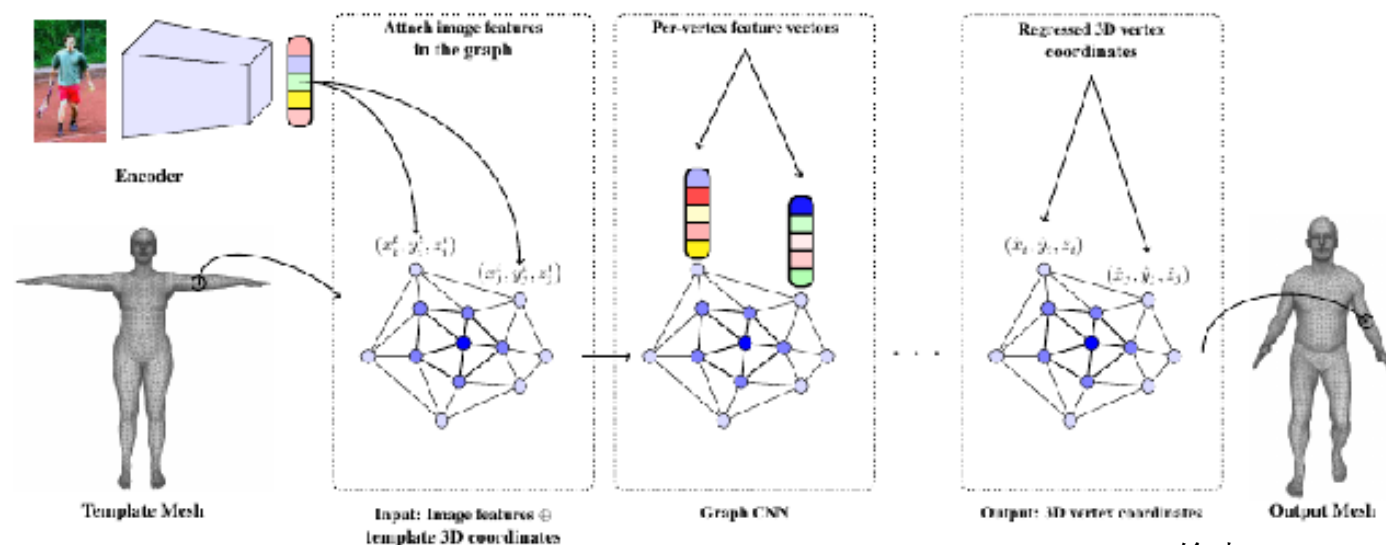
Nuro, Inc.



Results on ShapeNet objects.

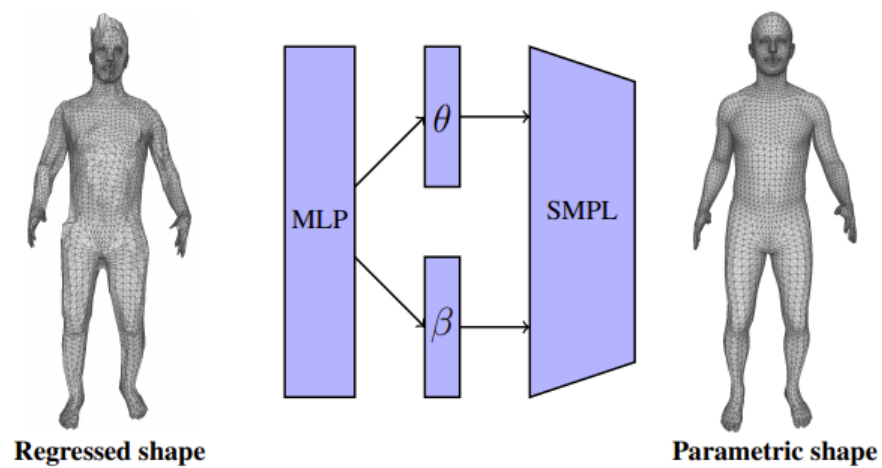
<https://walsvid.github.io/Pixel2MeshPlusPlus/>

# GraphCMR: Single-Image $\rightarrow$ Human Shape Reconstruction



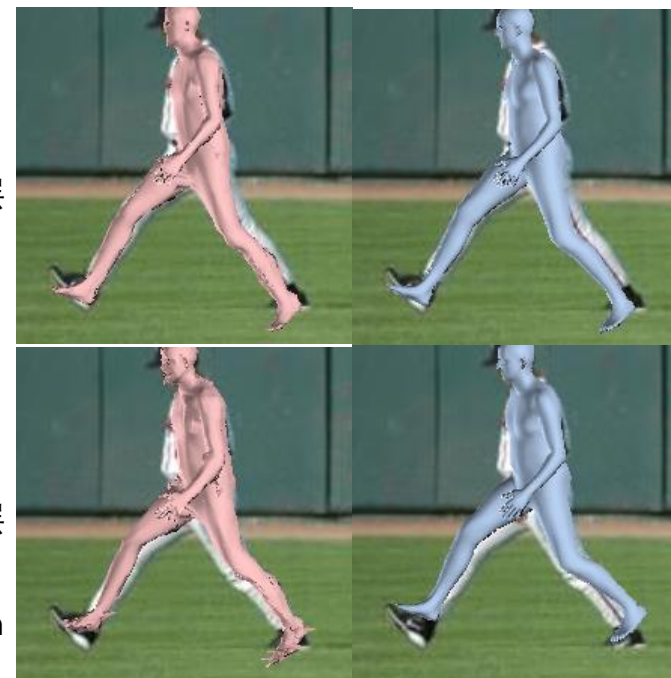
Gcnn输出

SMPL输出



无平滑层

有平滑层



# Graph Pooling

论文: Hierarchical Graph Representation Learning with Differentiable Pooling  
地址: <https://arxiv.org/pdf/1806.08804.pdf>

Diff Pool通过定义一个可微池化操作模块进行分层的聚合图节点

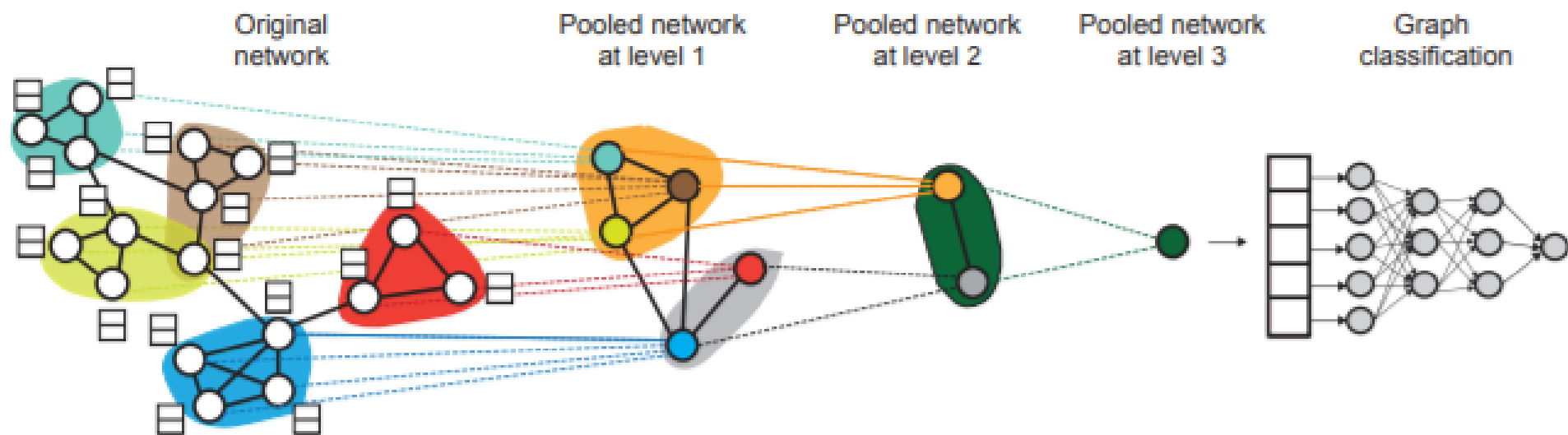


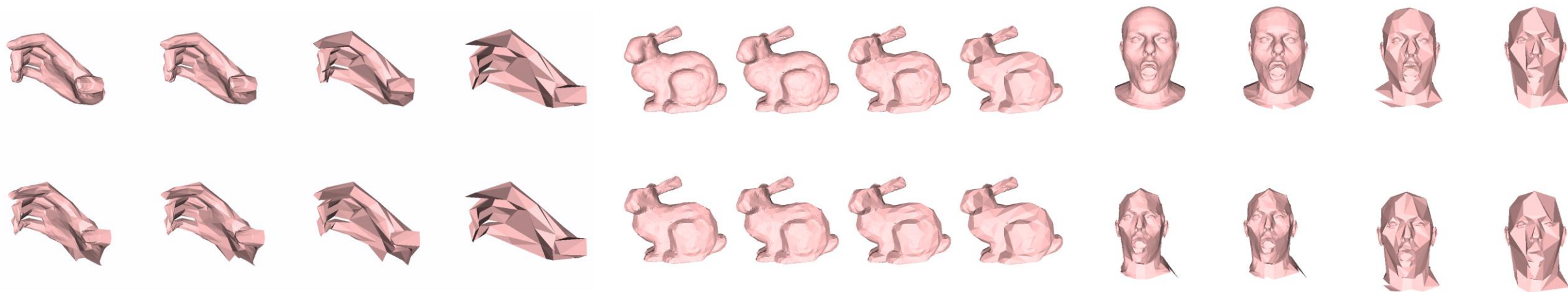
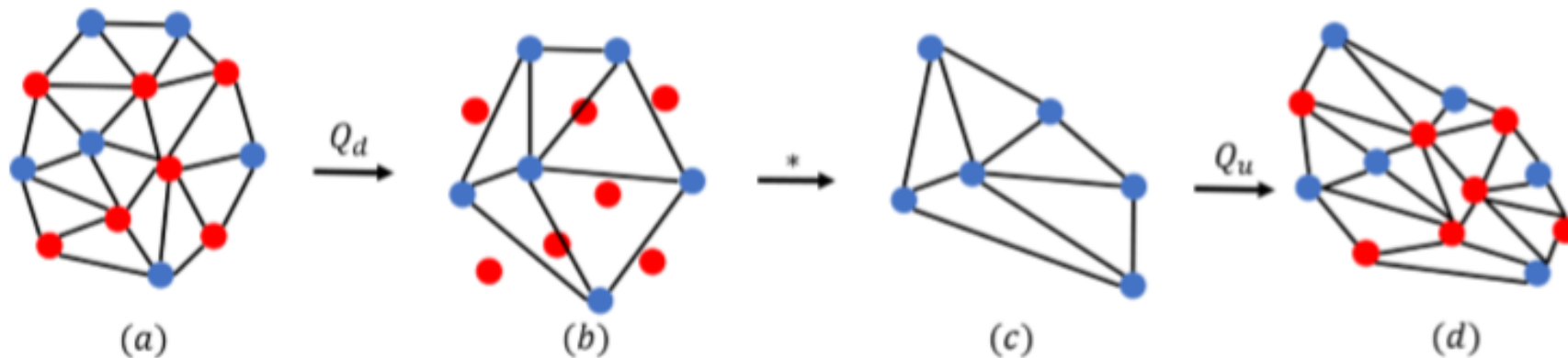
Figure 1: High-level illustration of our proposed method DIFFPOOL. At each hierarchical layer, we run a GNN model to obtain embeddings of nodes. We then use these learned embeddings to cluster nodes together and run another GNN layer on this coarsened graph. This whole process is repeated for  $L$  layers and we use the final output representation to classify the graph.



# Mesh Sampling

论文: Generating 3D faces using Convolutional Mesh Autoencoders

地址: <https://arxiv.org/pdf/1807.10267.pdf>



# 总结

## 1. 复杂网络

- 随机图
- 小世界
- 无标度网络

## 2. 基于networkx的图卷积

