

日期:

/

Designing the Most Powerful GNN

- Neighbor aggregation can be abstracted as a function over a multi-set (a set with repeating elements).

GCN 和 GraphSAGE 使用不同的 aggregation 方式:

GCN: $\text{Mean}(\{X_u\}_{u \in N(v)})$ 以表现为排序:
Sum Pooling \rightarrow Mean Pooling \rightarrow

GraphSAGE: $\text{Max}(\{X_u\}_{u \in N(v)})$ Max Pooling

GCN 与 GraphSAGE 均不满足单射条件, 没有最大化的表现力
任何单射的多集函数均可表示为以下形式:

$$\phi(\sum_{x \in S} f(x))$$

ϕ, f 均为非线性变换。we use MLP

$$\text{MLP}_\phi(\sum_{x \in S} \text{MLP}_f(x))$$

最具表现力的图神经网络称为图同构神经网络 (GIN)

在颜色细化算法中:

$$C^{(k+1)}(v) = \text{HASH}(\{C^{(k)}(v), \{C^{(k)}(u)\}_{u \in N(v)}\})$$

GIN 使用 MLP 建模 HASH function

$$C^{(k+1)}(v) = \text{MLP}_\phi((1\epsilon) \cdot \text{MLP}_f(C^{(k)}(v)) + \sum_{u \in N(v)} \text{MLP}_f(C^{(k)}(u)))$$

GIN模型的更新机制是:

1) 向每个节点分配初始嵌入 $C^{(0)}(v)$

2) 以GIN核迭代更新

$$C^{(k+1)}(v) = \text{GINConv}(\{C^{(k)}(v), \{C^{(k)}(u) | u \in N(v)\}\})$$

3) 在k步迭代后, $C^{(k)}(v)$ 总结了k跳L内的邻域信息

然而计算图相同的节点仍是不可分的