日期: /

DL for Graphs

假设有一图G：

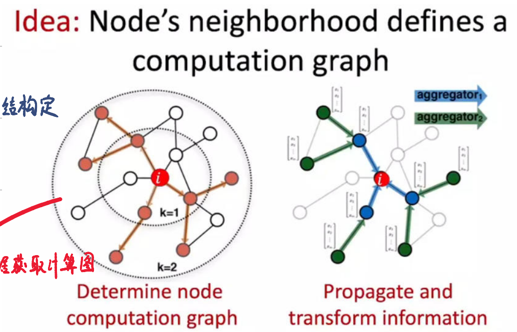
- V表示节点集合
- A表示邻接矩阵
- $X \in \mathbb{R}^{m\times|V|}$ 为节点特征集合
- N(v)表示节点v的邻居集合

为什么不直接拼合A.X并使用MLP并生输出？

1) 参数量极大 (O(|V|))
2) 模不能适用于不同大小的图
3) 对节点顺序敏感

解决方案是借鉴用于图像处理的CNN，定义图卷积(GCN)

根据图的结构定义计算图



消息传递及特征更新

每个节点根据其邻居获取计算图

GNN可以是任意深的，通过消息传递，k层的GNN可以使节点融合k跳以外的信息。

不同GNN的区别主要在于：

1) 如何进行消息聚合　由于图的无序性，聚合操作符必须是排列不变的

2) 如何进行特征更新

一种最简单的消息汇聚方法是求均值

可训练参数

$$h_v^0 = x_v$$

$$h_v^{(l+1)} = \sigma\left(W_l \sum_{u \in N(v)} \frac{h_u^{(l)}}{|N(v)|} + B_l h_v^{(l)}\right), \forall l \in \{0, \dots, L-1\}$$

$$z_v = h_v^{(L)}$$

以矩阵运算表示：$\sum_{u \in N(v)} \frac{h_u^{(l-1)}}{|N(v)|} = D^{-1} A H^{(l)}$

即 $H^{(l+1)} = \sigma(D^{-1} A H^{(l)} W_l^T + H^{(l)} B_l^T)$

根据任务确定，例如对于分类任务

$\mathcal{L} = \sum_{v \in V} y_v \log(\sigma(z_v^T \theta)) + (1 - y_v) \log(1 - \sigma(z_v^T \theta))$

有监督情况下的训练：$\min_\theta \mathcal{L}(y, f(z_v))$

无监督情况下：使用相似性匹配的方式训练：

相似性量度，当u.v相似时 $y_{u,v}=1$

$$\mathcal{L} = \sum_{z_u, z_v} CE(y_{u,v}, DEC(z_u, z_v))$$

交叉熵　　解码器(如点积)