Дано

$G=(V,\mathcal{E})$, где $v_i \in V$ – точки датчиков на голове, а $e_{ij} \in \mathcal{E}$ – силу связи между v_i и v_j

Зададим векторную функцию сигнала $\forall v_i \in V$

$$x(t) = x(v_i, t) \in \mathbb{R}^n$$

Тогда $x(t)$ можем назвать решением диффура в частных производных:

$$\frac{\partial x(t)}{\partial t} = \operatorname{div}\left[G(x(t),t)\,\nabla x(t)\right],$$

где $G(x(t),t) = \operatorname{diag}\left(a(x_i(t), x_j(t)\right)$ $|\mathcal{E}| \times |\mathcal{E}|$ и $a(x_i, x_j)$ – фун. близости между двумя верш.

Применив div и ∇ получим

$$\frac{\partial x(t)}{\partial t} = (A(x(t)) - I)x(t) = \bar{A}(x(t))\,x(t),$$

где $A(x(t)) = (a(x_i, x_j))$

Если $\bar{A}$ – не завис от. $x(t)$, то данное PDE имеет аналитическое решение

$$x(t) = e^{\bar{A}t} x_0$$

Большинство моделей можно вывести из данного PDE.

Method	Evolution	Diffusivity	Graph $(\mathcal{V}, \mathcal{E}')$	Discretisation
ChebNet	Features $\mathbf{X}$	Fixed a_{ij}	Fixed $\mathcal{E}$	Explicit fixed step
GAT	Features $\mathbf{X}$	$a(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$	Fixed $\mathcal{E}$	Explicit fixed step
MoNet	Features $\mathbf{X}$	$a(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)$	Fixed $\mathcal{E}$	Explicit fixed step
Transformer	Features $\mathbf{X}$	$a((\mathbf{u}_i, \mathbf{x}_i), (\mathbf{u}_j, \mathbf{x}_j))$	Fixed $\mathcal{E} = \mathcal{V} \times \mathcal{V}$	Explicit fixed step
DeepSet/PointNet	Features $\mathbf{X}$	$a(\mathbf{x}_i)$	Fixed $\mathcal{E} = \emptyset$	Explicit fixed step
DIGL*	Features $\mathbf{X}$	$a(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$	Fixed $\mathcal{E}(\mathbf{U})$	Explicit fixed step
DGCNN/DGM*	Features $\mathbf{X}$	$a(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$	Adaptive $\mathcal{E}(\mathbf{X})$	Explicit fixed step
Beltrami	Positions $\mathbf{U}$ +Features $\mathbf{X}$	$a((\mathbf{u}_i, \mathbf{x}_i), (\mathbf{u}_j, \mathbf{x}_j))$	Adaptive $\mathcal{E}(\mathbf{U})$	Explicit adaptive step / Implicit

Table 1: GNN architectures interpreted as particular instances of our framework. *Attentional variant.

Используя разные методы решения PDE получаем как бы дискретизацию данного процесса где каждый момент k является слоем GNN

GRAND

На вход подается X_{in} - матрица $|V| \times d$

Обучаются энкодер и декодер φ, ψ и диффузионный процесс.

На выходе получаем эмбеддинги вершины

$$Y = \psi(X(t)),$$

где $X(t)$ получается решением PDE с начальным условием $X(0) = \varphi(X_{in})$

В качестве обучаемой фун. в диффузионном процессе берут:

$$a(x_i, x_j) = \text{softmax}\left(\frac{(W_K X_i)^T W_Q X_j}{d_K}\right),$$

где W_Q, W_K - обуч. парам.

Neural Sheaf Diffusion

Решают проблему heterophilic графов, вводя теорию пучков.

Difformer

Основная идея избавиться от проблемы выбора $\bar{A}(x(t))$.

Для этого авторы вводят фун. энергии, которая показывает качество диффузии на шаге k:

$$E(X,k;\delta) = \|X - X^{(k)}\|^2 + \lambda \sum_{i,j} \delta(\|x_j - x_i\|_2^2)$$

Имея данную меру хотелось бы, чтобы в процессе диффузии энергия уменьшалась и сис. приходила в устойчивое положение, по принципу который мы задаем. Т.е.

$$x_i^{(k+1)} = \left(1 - \tau \sum_{j=1}^{|V|} \bar{A}_{ij}(x_i^{(k)})\right) x_i^{(k)} + \tau \sum_{j=1}^{|V|} \bar{A}_{ij}(x_i^{(k)})\, x_i^{(k)}$$

$$E(X^{(k+1)},k;\delta) \le E(X^{(k)},k-1;\delta)$$

$$k \geq 1$$

Теорема 1 говорит о том, что желаемая $\bar{A}(x(t))$, которая будет уменьшать энергию сущ. и будет равна:

$$\text{Diffusivity Inference:}\quad \hat{\mathbf{S}}_{ij}^{(k)} = \frac{f(\|\mathbf{z}_i^{(k)} - \mathbf{z}_j^{(k)}\|_2^2)}{\sum_{l=1}^{N} f(\|\mathbf{z}_i^{(k)} - \mathbf{z}_l^{(k)}\|_2^2)}, \quad 1 \le i, j \le N,$$

$$\text{State Updating:}\quad \mathbf{z}_i^{(k+1)} = \underbrace{\left(1 - \tau \sum_{j=1}^{N} \hat{\mathbf{S}}_{ij}^{(k)}\right) \mathbf{z}_i^{(k)}}_{\text{state conservation}} + \underbrace{\tau \sum_{j=1}^{N} \hat{\mathbf{S}}_{ij}^{(k)} \mathbf{z}_j^{(k)}}_{\text{state propagation}}, \quad 1 \le i \le N.$$