

一、图神经网络

论文 1: Principal Neighbourhood Aggregation for Graph Nets

作者: Gabriele Corso, Luca Cavalleri, Dominique Beaini, Pietro Liò, Petar Veličković

总结: 作者将 GNN 的理论框架扩展到连续特征上, 并证明了在这种情况下对多个聚合器的需求, 同时提出了基于节点度的缩放器来泛化求和聚集器, 使 GNN 的聚合方式尽可能具有高的表达能力。综上提出由多个聚合器和基于节点度的缩放器组成的主邻域聚合 (PNA) 网络。为了理解 GNN 捕获和利用图结构的能力, 作者提出一种新颖的多任务基准和一种 “encode-process-decode” 结构, 可以使得模型学习出多种任务中具有共性的图结构特性。实验结果验证了模型捕获图结构的能力。

论文 2: Graph Information Bottleneck

作者: Tailin Wu, Hongyu Ren, Pan Li, Jure Leskovec

总结: 作者基于 IB 提出图信息瓶颈 (GIB), 一种信息理论的原则平衡了图结构表示学习的有效性和鲁棒性。GIB 旨在学习关于给定的特定下游任务最小充分表示。GIB 信息原则可以应用到很多的 GNN 模型, 作者将 GIB 原则应用于 GAT 模型, 根据 attention 权重, 采样 k-hop 邻域中特定数量的邻居进行特征聚合, 并根据分类分布和伯努利分布设计不同的邻居采样策略。

论文 3: Random Walk Graph Neural Networks

作者: Giannis Nikolentzos, Michalis Vazirgiannis

总结: 作者提出一种用于图分类的随机游走图神经网络 (RWNN), 通过设计一些可训练的 “隐藏图”, 并使用 P 步随机游走核对输入图与 “隐藏图” 进行比较, 利用生成的核值构成输入图的表征, 以实现图分类。RWNN 不仅很好的保留了核

方法应用于结构化数据的灵活性，还能有效学习出与任务相关的图结构，使图分类更具可解释性。

论文 4: Iterative Deep Graph Learning for Graph Neural Networks: Better and Robus Node Embeddings

作者: Yu Chen, Lingfei Wu, Mohammed J. Zaki

总结: 作者提出一种端到端的图学习框架 (IDGL)，联合迭代地学习图结构和图嵌入。IDGL 基于更好的节点嵌入学习更好的图结构，同时基于更好的图结构学习更好的节点嵌入。并且当学习的图结构接近用于下游任务的优化图时动态停止。

论文 5: Can graph neural networks count substructures

作者: Zhengdao Chen, Lei Chen, Soledad Villar, Joan Bruna

总结: 作者提出用子图和诱导子图计数这个标准来帮助设计更强大的 GNN 模型。作者提出框架 Local Relational Pooling (LRP)，该框架可以通过把一个表达能力很强，但是对排列变化敏感的模型 (比如 MLP)，通过此公式转换成排列不变的模型，但仍保留通用逼近器能力。

论文 6: Path Integral Based Convolution and Pooling for Graph Neural Networks

作者: Zheng Ma, Junyu Xuan, Yu Guang Wang, Ming Li, Pietro Liò

总结: 网络中结点在使用 GCN 聚合远距离节点表征时，由于指数级爆炸增长的邻居数目而导致远距离邻居信息被稀释，长程邻居结点的信息难以被获取为动机，作者类比量子力学 Feynman 路径积分原理，计算节点对之间所有路径权重的加权和，推出基于结点间路径为基本单位的新卷积运算，构建新的卷积 MET 矩阵，根据 MET 矩阵对角线对池化筛选重要节点，提出新的卷积神经网络模型 PAN。该论

文模型起作用的部分是将原先消息层层向中心传递的卷积过程做了改变，变成基于连接结点对间路径的卷积运算，而取消了层层传递的过程，基于路径卷积的目的就是使得远路径的节点的信息能够直接传递给中心节点而不是在层层传递的过程中逐渐削弱。

论文 7: Pointer Graph Networks

作者: Petar Velickovic, Lars Buesing, Matthew C. Overlan, Razvan Pascanu, Oriol Vinyals and Charles Blundell DeepMind

总结: 作者引入指针图网络 (PGN)，用额外的推断边来扩充集合或图，自适应地学习节点之间的指针边数，目的是在不牺牲计算成本或图结构的稀疏性的情况下，进一步增加了 GNN 对图结构的推广学习，以提高模型泛化能力。该方法只需指定部分具有边信息的图结构，通过引入指针矩阵信息，以及一系列对边的操作序列，使用编码-处理-解码模型，来预测图中两节点是否存在一条连通的路径。其在 DSU 和 LCT 数据集中得到了验证。

论文 8: Factorizable Graph Convolutional Networks

作者: Yiding Yang, Zunlei Feng, Mingli Song, Xinchao Wang

总结: 作者认为传统的 GCN 无法解耦节点之间的多语义关系，只能将多种语义关系混合在一起进行卷积。然而现实环境下两个节点之间的一条边是两个节点间多种语义关系的一个最终体现，将所有关系混合在一起，不利于捕获节点间的不同语义关系的强弱，也不利于解耦特征的不同维度，从而对下游任务不利。作者借鉴了已有的一些解耦方法，提出了可分解的 GCN 模型——FactorGCN，该模型将源图分解为多个不同的因子图，用于反映在不同语义场景下节点间的不同关系及关系强弱，然后在不同的因子图空间中分别进行卷积操作，从而得到不同语义空间下的节点特征，最后将不同因子图下得到的节点特征拼接起来作为节点的最终表示。实验表明该模型具有良好的节点特征解耦能力，并进一步提升了下游分类任务的表现。

论文 9: Subgraph Neural Networks

作者: Emily Alsentzer, Samuel G. Finlayson, Michelle M. Li, Marinka Zitnik

总结: 作者在子图预测任务提出了几个独特的挑战: 子图可以具有非平凡的内部拓扑, 但也携带相对于其存在的底层图的位置和外部连通性信息的概念。作者提出一种新的子图路由机制, 在子图的组件和随机抽样的锚片之间传播神经信息, 产生高精度的子图表示。SUBGNN 指定了三个通道, 每个通道的设计都是为了捕捉子图拓扑的一个不同方面, 并且我们提供了这些通道编码其预期属性的经验证据。

二、图匹配

论文 1: Graduated Assignment for Joint Multi-Graph Matching and Clustering with Application to Unsupervised Graph Matching Network Learning

作者: Runzhong Wang, Junchi Yan, Xiaokang Yang

总结: 作者基于融合多个图信息可以得到更加健壮的图匹配结果, 更精确的多图匹配将提高聚类精度, 提出了联合聚类和匹配的二次分配模型 (GANN), 并通过加入退火参数 β 来表示聚类的置信度。作者还利用了多图匹配信息作为成对匹配的伪标签, 实现了一种无监督的深度多图匹配学习算法。

三、对比学习

论文 1: Contrastive Learning with Adversarial Examples

作者: Chih-Hui Ho, Nuno Vasconcelos

总结: 本篇文章的工作属于对抗样本在自监督学习领域中的应用, 目的不是提升鲁棒性, 而是使用对抗样本提升对比学习得到的表征的质量。通过使用 FGSM 生

成的对抗样本作为数据增强的一种形式,使得其与在增强集中随机采样的增强方式之间差异最大化,从而给对比学习的过程提供最具有挑战性的样本对。与先前方法不同,他能同时产生高质量的正负样本来增强学习过程,并且实验表明这种方法对先前的自监督算法有所提升。

论文 2: Joint Contrastive Learning With Infinite Possibilities

作者: Qi Cai, Yu Wang, Yingwei Pan, Ting Yao, Tao Mei

总结: 论文探讨了通过概率模型来改进对比学习的最新发展。作者推导出一种特殊的对比损失形式,称为联合对比学习(JCL)。JCL 隐式地涉及同时学习无限数量的查询键对,这在搜索不变特性时产生了更严格的约束。作者推导了这个公式的上界,它允许以端到端训练的方式进行解析解。同时之前论文中对比学习通常只有一个正样本,忽略了同一锚点不同正样本之间的依赖关系。本文作者将正样本的数量拓展为无限个,并将正样本拟合为一种高斯分布,简化损失函数的同时减少内存使用,最终通过实验验证了 JCL (Joint Contrastive Learning) 的有效性。

论文 3: LoCo: Local Contrastive Representation Learning

作者: Yuwen Xiong, Mengye Ren, Raquel Urtasun

总结: 作者提出了一种无监督对比学习的局部学习算法。将两个块分组为一个局部单元,并由两个单元同时共享中间块。因此,中间块将接收来自下部和上部的梯度,就像是在下一级和上一级之间建立一座“桥梁”。在执行局部梯度下降时,每个阶段基本上都执行局部 loss 回传,并且由于重叠,现在可以从最上面发送反馈。也就是说,本文通过在梯度隔离块之间引入隐式梯度反馈并适当地深化解码器,可以很大程度上缩小局部对比学习和最先进的端到端对比学习框架之间的差距。

四、多标签学习

论文 1: Node Classification on Graphs with Few-Shot Novel Labels via Meta Transformed Network Embedding

作者: Lin Lan, Pinghui Wang, Xuefeng Du, Kaikai Song, Jing Tao, Xiaohong Guan

总结: 作者提出了在多标签任务中, 不同标签会共享某种潜在的演化模式。作者通过使用基于 self-attention 的转化函数, 从拓扑 embedding 中挖掘这种潜在模式。其训练好的模型可以应用到具有少量样本的新标签分类任务中。模型具体过程包括 i) 由图结构学得 embedding(类似 deepwalk); ii) 针对已知标签, 通过采样模拟 few-shot novel labels 的场景, 并通过基于 self-attention 设计的转换函数来将 embedding 转换为适合这些标签分类任务的 embedding, 来捕捉不同种标签共享的潜在演化模式; iii) 优化模块实现第一步和第二步的目标函数联合交替优化。

五、异质图神经网络

论文 1: Self-supervised Auxiliary Learning with Meta-paths for Heterogeneous Graphs

作者: Dasol Hwang, Jinyoung Park, Sunyoung Kwon, KyungMin Kim, Jung-Woo Ha, Hyunwoo J. Kim

总结: 为了学习异构图上的图神经网络, 作者提出了一种新的使用元路径的自监督辅助学习方法。目标是学习多个辅助任务, 以提高主要任务的性能, 作者通过预测元路径作为辅助任务来学习主要任务。这可以被看作是一种元学习的类型。该方法可以识别辅助任务的有效组合, 并自动平衡, 以改进主要任务。同时提出的方法可以以插件的方式应用于任何图形神经网络, 而无需人工标记或其他数据。实验验证了方法的有效性。

六、双曲空间图表示学习

论文 1: Graph Geometry Interaction Learning

作者: Shichao Zhu, Shirui Pan, Chuan Zhou, Jia Wu, Yanan Cao, Bin Wang

总结: 复杂网络往往具有正则结构（各个节点度数相同），和层级结构（类似于树状），两种特性，因此只在单个空间中学习，是无法学习具有不同结构属性的节点表示信息。论文针对双曲图卷积类方法（例如 HGCN、HGNN）相对 GNN 类方法只能在层级结构较为明显的图（Disease、Airport）进行图表示学习上有较为明显的提升，而在层级结构不明显的图（Cora）提升效果不明显的问题，设计了一种综合的几何表示学习方法，同时利用双曲空间和欧式空间节点特征信息，进行图表示学习，分别学习双曲结构属性和正则特性信息，通过引入距离感知注意力以及交互学习模式等方法，最后在不同特点数据集（层级结构明显以及正则属性明显）图上进行节点分类和链路预测，实验表明其性能均超过了相应领域的最优方法。

七、深度关系主题模型

论文 1: Deep Relational Topic Modeling via Graph Poisson Gamma Belief Network

作者: Chaojie Wang, Hao Zhang*, Bo Che, Dongsheng Wang, Zhengjue Wang

总结: 作者提出深度关系主题模型，同时捕捉节点的语义的层次结构，以及节点之间关系的语义层次结构。并利用 Poisson 和 Gamma 共轭分布的组合按层次结构生成节点内容和链接关系，高效利用 gibbs 采样进行推断。为了提高 theta 参数的学习效率，引入两种不同的 Weibull 分布（全连接和 GCN）为基础的 encoder。实验结果表明，模型提取了高质量的分层潜在文档表示，从而在各种图分析任务中提高了性能。