

图神经网络

网格化数据：常见图像、语音及自然语言

图结构数据：关系网络、化学分子、电网

特点：图无任意拓扑结构限制，无图像的空间规律性；

图无固定结点顺序，无参考节点；图常是动态的，含多状态特征

图：数据结构，可直观表示。可随不同度量间相互转换 $g = \{V, E\}$ 点 → 边
属性图：节点/边具有属性/特征；一个图结构中，节点由自身特征及与其相连的邻居特征决定该节点。

类型：有向图—因果关系；无向图—相关性

经典图算法生成树、最短路径、二分图匹配、费用流

图的研究 框架模型 事件随机场、马尔科夫随机场

图神经网络、图卷积网络、图嵌入

相关任务：图分类、节点分类、连接预测、群体检测/图聚类、图嵌入、图生成

图神经网络 2019年

将图数据与神经网络结合，在图数据上端对端学习计算

初代GNN

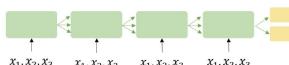
给定一张图 G ，每个节点 v 的特征用 x_v 表示，连接节点 v 和节点 u 的边的特征用 $x_{(v,u)}$ 表示。GNN 的学习目标是：获得每个节点 v 的隐藏状态 h_v 。

注意：
对于每个节点，它的隐藏状态由自身节点的特征、
相邻节点的特征和隐藏状态以及与自身节点相连的
边的特征共同决定。

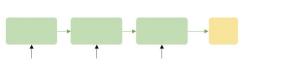
GNN与RNN区别

GNN在不同时刻的输入相同，RNN在不同时刻的输入不同
GNN可以是结构化的输出（多个任务），RNN是单输出

Graph Neural Network



Recurrent Neural Network



图卷积神经网络 GCN

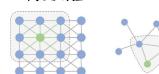
GNN 主要变体 \Rightarrow CNN有能力抽取多尺度局部空间信息，将其融合

起来构建特征表示，但只能应用于常规的欧几里得数据上

两者共同点 ①局部连接 ②权值共享 ③层间连接

两者区别

常规卷积	图卷积
定义在欧式空间	定义在非欧式空间
节点的邻域数量固定	节点的邻域不固定
卷积核大小固定	卷积核大小不固定

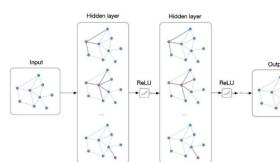


- 邻接点数量不固定
- 把非空间的图转换成欧式空间
- 对处理来说图点的坐标是在图上随机样

图卷积的本质是寻找适用于图的可学习卷积核

GCN框架

- 图卷积网络特点
 - 局部特性
 - 一阶特性
 - 参数共享



GCN输入

目标：在图 $g = (V, E)$ 上学习一个信号/特征函数 f
 输出 ①节点特征：节点的特征 x_i 表示为 $N \times D$ 特征矩阵 X
 ②图结构特征：结构信息表示为邻接矩阵 A

输出 GCN每一层都相当于一个非线性函数 $H^{(l+1)} = f(H^{(l)}, A)$
 $H^{(0)} = X, H^{(L)} = Z$ (L 为 GCN 层数)
选择 $G(XH^{(l)}W^{(l)})$

GNN上的信息传递



注意：
不同时刻间信息的传递与图的拓扑结构一致。

典型应用

- ①图像生成
- ②场景图生成
- ③点云分类
- ④姿态估计
- ⑤图像匹配
- ⑥文本分类
- ⑦推荐系统
- ⑧半监督
- ⑨分子分类

