图神经网络 基础与前沿; 马腾飞;

Chapter 1, 当深度学习遇上图: 图神经网络的兴起;

Node 1.1, 什么是图;

用来表示一堆实体和它们之间的关系; (2021-4-5)

Node 1.2, 深度学习与图;

List 1.2.1, 图数据的特殊性质;

节点的不均匀分布(卷积核的尺寸不断变化); 排列不变性; 边的额外属性; (2021-4-5)

List 1.2.2, 将深度学习扩展到图上的挑战;

图数据的不规则性; 图结构的多样性(有向图, 无向图, 有权图, 无权图); 图数据的大规模性; 图研究的跨领域性; (2021-4-5)

Node 1.3, 图神经网络的发展;

List 1.3.1, 图神经网络的历史;

谱域图神经网络; 空域图神经网络; (2021-4-5)

List 1.3.2, 图神经网络的分类;

卷积模式vs循环模式; 有监督vs无监督; 单图vs多图; (2021-4-5)

Node 1.4, 图神经网络的应用;

List 1.4.1, 图数据上的任务;

节点上的任务(节点的分类、回归、聚类); 边上的任务(边的分类, 链路预测); 图上的任务(图的分类, 图的生成, 图的匹配); (2021-4-5)

List 1.4.2, 图神经网络的应用领域;

计算机视觉; 自然语言处理; 物理系统、交通网; 化学/生物/医疗; 知识图谱; 推荐系统; 金融(反洗钱反欺诈); 组合优化问题; 其他; (2021-4-5)

Chapter 2, 预备知识;

Node 2.1, 图的基本概念;

邻接矩阵; 顶点的度; 度矩阵; 路径; 距离; 邻居节点; 权重图; 有向图; 图的遍历; 图的同构; (2021-4-5)

Node 2.2, 简易图谱论;

List 2.2.1, 拉普拉斯矩阵;

对称归一化的拉普拉斯矩阵; 随机游走归一化的拉普拉斯矩阵; (2021-4-5)

List 2.2.2, 拉普拉斯二次型;

List 2.2.3, 拉普拉斯矩阵与图扩散;

List 2.2.4, 图论傅里叶变换;

图信号; 图论傅里叶变换phi^=u-1phi (利用离散傅里叶变换公式); 图论傅里叶逆变换phi=uphi^ (上面两边左乘u); (2021-4-5)

Chapter 3, 图神经网络模型介绍;

Node 3.1, 基于谱域的图神经网络;

List 3.1.1, 谱图卷积网络;

List 3.1.2, 切比雪夫网络;

使用了切比雪夫多项式展开近似; (2021-4-5)

List 3.1.3, 图卷积网络;

List 3.1.4, 谱域图神经网络的局限和发展;

图小波网络(Graph Wavelet Net); (2021-4-5)

Node 3.2, 基于空域的图神经网络;

List 3.2.1, 早期的图神经网络与循环图神经网络;

如果我们有一个压缩映射, 就从某一个初始值开始, 一直循环迭代, 最终到达唯一的收敛点; 图上的每个节点有一个隐藏状态, 这个隐藏状态需要包含它的邻接点的信息, 而图神经网络的目标就是学习这些节点的隐藏状态; (2021-4-6)

List 3.2.2, 再谈图卷积网络;

WL测试; (2021-4-6)

List 3.2.3, GraphSAGE: 归纳式图表示学习;

GraphSAGE的前向传播过程; 为了降低计算复杂度, 可以只采样固定数量的邻居节点; GraphSAGE的邻居采样; GraphSAGE中聚合函数的选择(均值聚合, LSTM聚合, 池化聚合); GraphSAGE小结; (2021-4-6)

List 3.2.4, 消息传递神经网络;

消息传递M函数, 状态更新U函数; 加入了边的信息; 加入全局虚拟节点; (2021-4-7)

List 3.2.5, 图注意力网络;

注意力机制通过赋予输入不同的权重, 区分不同元素的重要性, 从而抽取更为关键的信息, 达到更好的效果; (2021-4-7)

List 3.2.6, 图同构网络: WL测试与图神经网络的表达力;

图神经网络的表达能力不会超过WL测试的区分能力; (2021-4-7)

Node 3.3, 小试牛刀: 图卷积网络实战;

Node 3.4, 小结;

Chapter 4, 深入理解图卷积网络;

Node 4.1, 图卷积与拉普拉斯平滑: 图卷积网络的过平滑问题;

一层图卷积网络的性能已经大大超过了全连接网络; 图卷积网络的每一层就是一种特别的拉普拉斯平滑; 拉普拉斯平滑就是让一个点和它周围的点尽可能相似, 每个节点的新特征是其周围节点特征的均值; 叠加多层图卷积网络会过平滑, 而用浅层(两层)图卷积网络又不能获得有用的远程信息; (2021-4-7)

Node 4.2, 图卷积网络与个性化PageRank;

PPNP; APPNP; (2021-4-8)

Node 4.3, 图卷积与低通滤波;

图卷积网络和它的其它变体本质上都是图信号的低通滤波器; (2021-4-8)

List 4.3.1, 图卷积网络的低通滤波效果;

特征向量阵中的每个特征向量代表一个基底, 特征值阵中的每一个特征值代表一个图信号的频率; (2021-4-8)

List 4.3.2, 图滤波神经网络;

并非所有图神经网络都是低通滤波的, 比如基于小波分析的谱域图神经网络; (2021-4-8)

List 4.3.3, 简化图卷积网络;

Node 4.4, 小结;

Chapter 5, 图神经网络的扩展;

Node 5.1, 深层图卷积网络;

图卷积网络一般两层就够用了, 层数再多也不能对结果有很大的提升, 反而增加模型的复杂度; (2021-4-8)

List 5.1.1, 残差连接;

改善深层卷积网络训练时的梯度消失、梯度爆炸问题; 同时打破神经网络的对称性, 提升神经网络的表达力; (2021-4-9)

List 5.1.2, JK-Net;

它将图卷积网络的每一层输出最后聚合在一起, 作为最终的输出; 接近于DenseNet; (2021-4-9)

List 5.1.3, DropEdge与PairNorm;

DropEdge就是在dropout在图神经网络上的扩展; (2021-4-9)

Node 5.2, 图的池化;

池化的作用是降采样, 降低特征维度, 减少网络的参数数量, 控制过拟合; 图像的池化得到图像的更粗粒度的模糊表示; (2021-4-9)

List 5.2.1, 聚类与池化;

List 5.2.2, 可学习的池化: DiffPool;

List 5.2.3, Top-k池化和SAGPool;

Node 5.3, 图的无监督学习;

List 5.3.1, 图的自编码器;

List 5.3.2, 最大互信息;

List 5.3.3, 其他;

List 5.3.4, 图神经网络的预训练;

预训练通过输入巨量的数据, 使预训练好的模型只需通过微调就能迁移到不同的数据上; 节点级别的任务, 上下文预测; 节点级别的任务, 属性遮蔽(分子图, 蛋白质交互图); 图级别的预测, 属性预测和相似度预测(先在节点级别做两个自监督的预训练任务, 然后到图级别做有监督的训练); (2021-4-10)

Node 5.4, 图神经网络的大规模学习;

邻居爆炸; (2021-4-10)

List 5.4.1, 点采样;

GraphSAGE对每个中心点随机采样固定数量的邻居节点进行信息聚合; (2021-4-10)

List 5.4.2, 层采样;

FastGCN; (2021-4-10)

List 5.4.3, 图采样;

通过限制子图的大小来解决邻居爆炸的问题; (2021-4-10)

Node 5.5, 不规则图的深度学习模型;

关系图卷积网络RGCN; 异构图神经网络; (2021-4-10)

Node 5.6, 小结;

Chapter 6, 其他图嵌入方法;

Node 6.1, 基于矩阵分解的图嵌入方法;

List 6.1.1, 拉普拉斯特征映射;

List 6.1.2, 图分解;

Node 6.2, 基于随机游走的图嵌入方法;

网络嵌入考虑的信息更加本地化, 只考虑每个节点利用随机游走得到的邻居节点; (2021-4-10)

List 6.2.1, DeepWalk;

Skip-gram模型, 用一个词做输入, 预测它周围的上下文; CBOW模型, 用一个词的上下文做输入, 预测当前词; DeepWalk采用随机游走的方法在途中随机采样大量固定的路径, 每个路径相当于一个句子, 每个节点相当于一个词; 负采样不需要精确计算概率, 只需要尽可能区分目标节点和噪声(负样本); (2021-4-12)

List 6.2.2, node2vec;

最大化观察到邻接节点的概率; 平衡DFS和BFS; (2021-4-12)

List 6.2.3, 随机游走和矩阵分解的统一;

Node 6.3, 从自编码器的角度看图嵌入;

所有的图嵌入实际上都是一个自编码器; (2021-4-12)

Node 6.4, 小结;

将节点本身的属性向量映射到一个更低维的向量; (2021-4-12)

Chapter 7, 知识图谱与异构图神经网络;

知识图谱是由实体(节点)和关系(边)组成的多关系图; (2021-4-12)

Node 7.1, 知识图谱的定义和任务;

List 7.1.1, 知识图谱;

KG = (h,r,t) ; (2021-4-12)

List 7.1.2, 知识图谱嵌入;

KG embedding就是知识图谱的表示学习, 就是将实体和关系映射到一个低维连续空间上; KG completion; (2021-4-12)

Node 7.2, 距离变换模型;

List 7.2.1, TransE模型;

可以将r看作h到t的翻译; (2021-4-12)

List 7.2.2, TransH模型;

投影到超平面上; (2021-4-12)

List 7.2.3, TransR模型;

List 7.2.4, TransD模型;

Node 7.3, 语义匹配模型;

List 7.3.1, RESCAL模型;

双线性模型; fr(h,t) = hT\*Mt\*t; (2021-4-12)

List 7.3.2, DistMult模型;

List 7.3.3, HoiE模型;

List 7.3.4, 语义匹配能量模型;

List 7.3.5, 神经张量网络模型;

List 7.3.6, ConvE模型;

Node 7.4, 知识图谱上的图神经网络;

List 7.4.1, 关系图卷积网络;

List 7.4.2, 带权重的图卷积编码器;

List 7.4.3, 知识图谱与图注意力模型;

List 7.4.4, 图神经网络与传统知识图谱嵌入的结合: CompGCN;

Node 7.5, 小结;

Chapter 8, 图神经网络模型的应用;

Node 8.1, 图数据上的一般任务;

List 8.1.1, 节点分类;

List 8.1.2, 链路预测;

List 8.1.3, 图分类;

Node 8.2, 生化医疗相关的应用;

List 8.2.1, 预测分子的化学性质和化学反应;

List 8.2.2, 图生成模型与药物发现;

自回归模型; GraphRNN; 基于生成对抗网络的模型; MolGAN; 基于变分自编码器的模型; 联接树VAE; 如果按照自回归模型中一个节点一个节点依序生成, 很难保障生成的分子图是符合语法的, 那么不如把图分解成一些子结构, 再拼接这些在一定语义中有效的子结构; 基于标准化流的模型; Real NVP; GraphNVP; (2021-4-14)

List 8.2.3, 药物/蛋白质交互图的利用;

将蛋白质作为节点, 将蛋白质之间的相互作用当成边; GameNet; (2021-4-14)

Node 8.3, 自然语言处理相关的应用;

文本分类; TextGCN; 语义角色标注; Syntactic GCN; (2021-4-14)

Node 8.4, 推荐系统上的应用;

PinSAGE; (2021-4-14)

Node 8.5, 计算机视觉相关的应用;

Node 8.6, 其他应用;

Node 8.7, 小结;

青源Forum丨图神经网络前沿学术研讨会暨清华“计算未来”博硕论坛069期（ 回放中）

<https://hub.baai.ac.cn/activity/details/145>

马腾飞; 图神经网络前沿专题;

引用网络, 知识图谱, 蛋白质交互图; (2021-4-2)

节点的不均匀分布; 排列不变性; 边的额外属性(知识图谱上不同的关系); (2021-4-2)

图表示学习

邻居节点尽量相近, 同类节点尽量相近, 节点顺序没有影响; (2021-4-2)

节点分类, 链路预测, 图分类; (2021-4-2)

拉普拉斯矩阵; 拉普拉斯二次型; 物理意义是图信号的光滑程度; 图论傅里叶变换; 谱域上的图卷积; 谱域图卷积网络; 多项式卷积核; (2021-4-2)

局部化; ChebyNet; 从ChebyNet到GCN; GCN(图卷积网络); 消息传递网络MPNN; GAT(图注意力网络); R-GCNs, 多关系图上的GCN; 多关系图(知识图谱); 谱域GNN; 空域GNN(更流行); GCN的本质, 低通滤波; 图滤波神经网络GfNN; GCN的本质, 拉普拉斯平滑; GCN的问题, 过平滑; 深层GNN--解决过平滑、过拟合; 训练方式(drop edge); GCN问题2, 邻居爆炸; 节点采样GraphSage(只做两层); 层采样--FastGCN; FastGCN的重要性采样; 均匀采样; 方差缩减; 图采样--graphSAINT; 多关系图上的采样--RS-GCN; 实际应用-PinSAGE, 基于GraphSAGE的一个改进; GNN的可扩展模型小结; (2021-4-3)

GNN的池化, 相邻的节点聚合在一起, 相似的节点聚合在一起; 预处理的方式, 先对图进行聚类; 池化的原则和方法, 聚类, AMG-style(代数多重网格); graclus; AMG方式的池化; 可微池化; top-K pooling; 自注意力池化; OTCoarsen--DiffPool和TopK的折中; 池化真的有用吗? GCN的问题3, 缺少标签; 无监督模型; deep graph infoMax(DGI); 多模态的图自编码器; 两图的距离与最优传输; 可解算法; 实验结果; 无监督的用处, 多任务实验结果; GCN的预训练; 节点级别(上下文预测, 属性遮蔽); 图级别(图标签预测, 图相似度比较); 应用实例; 分子图生成(加上了语义限制); 分子图上的语义限制; 生成结果可视化; 药物推荐I, GameNet; 药物推荐II, GBert; GNN的应用, semantic parsing; GNN的应用, planner selection; 通过构建SQL数据库中column name的连接图获得更好的跨领域表示; GNN的应用, 金融; EvolveGCN, 反欺诈反洗钱; 应用方法小结; 寻找图结构(自然语言的语法树); 无中生有(产生分子图); deep graph library; (2021-4-3)

王啸 Dive into the Message Passing Mechanism of Graph Neural Networks (2:40)

Network representation learning; pipeline for GNN; 除了node周边的拓扑结构, 还有node自身的结构; topology graph和feature graph分别做图传播和聚合(attention自适应提取), 通过参数共享共同embedding; 低频信号(把大家都变得一样)并不总是最优; (空域对应信号处理中的时域); revisit GNNs; the unified framework; GCN/SGC; PPNP; GNN-HF; 现在还是以同质化网络为主, 毕竟人和它的邻居是相似的嘛; (2021-4-4)

图计算在推荐召回中的应用和挑战; 王晓伟 快手AI Platform AI算法研究员 (3:22:41)

快手推荐流程; 短视频召回现状, 效率高, 精准, 覆盖全; 基于图的I2I召回通用设计; 实际场景优化--初始图构建; 没有groundtruth, 需要构建初始图; 去噪--图结构学习; 实际场景优化--多级优化目标; 实际场景优化--多任务召回; 挑战和展望(多兴趣, 动态图); (2021-4-5)

异质图神经网络在阿里推荐业务中的探索; 纪厚业 北京邮电大学 (3:58:16)

将基于图拉普拉斯矩阵将图信号从空域(顶点上)转换到谱域; 推荐系统及其价值; 和图数据挖掘息息相关; 淘宝大社区, 分享推荐(非对称性); 特征表示; 传递性三元组表示; 在线实验online serving; 聚划算百亿补贴, 选品推荐; 项目背景; 方案设计; 架构图; 用户级别(细粒度)&人群级别(粗粒度); 仿真结果; (2021-4-5)

Intention-aware Sequential Recommendation with Structured Intent Transition 李昊阳 清华大学 (4:28:46)

推荐系统能否理解用户行为之后的意图; 从购买序列了解用户的意图; model framework; transformer-based encoder; intent extraction; structured intent transition (用到ConceptNet); intent decoder; experimental settings; experimental metrics, hit rate, MRR; experimental result; (2021-4-6)

分子图表示学习：一种分子动力学思路; 李子尧 北京大学 (4:57:52)

HamNet; molecular representation; molecular fingerprints; virtual screening (虚拟筛选); 2D fingerprints (ECFP 2010, MPNN 2015, Attentive FP 2019); 3D fingerprints (3DGCN 2019, DimeNet 2020, CMPNN 2020); HamNet; Hamiltonian Equations; Neural Hamiltonian, using NNs to model the energy; GCN (encoding the atomic chemical environment) + LSTM; supervising the Hamiltonian engine; generating the fingerprints; (2021-4-6)

Graph Heterogeneous Multi-Relational Recommendation 陈冲 清华大学 (5:33:16)

Multi-relational recommendation; GCN; graph heterogeneous collaborative filtering; embedding propagation layers; multi-task prediction; utilizing implicit feedback data, negative sampling vs non-sampling learning; complexity issue of non-sampling learning; experimental settings; model comparisons; handling cold-start issue; ablation study; conclusion; (2021-4-6)