

# 如何理解 GNN 表达能力的粗浅小结

参考阅读：

1. Chapter5: The Expressive Power of Graph Neural Networks
2. 中科院计算所沈华伟：图神经网络表达能力的回顾和前沿
3. 【ICLR2021论文解读】初探 GNN 表达能力
4. Analyzing the Expressive Power of Graph Neural Networks in a Spectral Perspective
5. 图神经网络的表达能力与置换同变性

## 1. 神经网络的表达能力

机器学习的任务，可以理解为存在一个从特征空间到目标空间的映射  $f^*$ ，希望能用模型  $f_\theta$  来近似  $f^*$ 。可将  $f_\theta$  能近似的**映射范围**理解为模型的表达能力。

先前研究已证明了定义任意定义在 compact space 上的连续函数都可被**MLP**近似。但其实，一方面并不能保证**模型经训练所学的  $\hat{f}$  是想近似的  $f^*$** ，另一方面过强的表达能力还可能导致 overfitting。

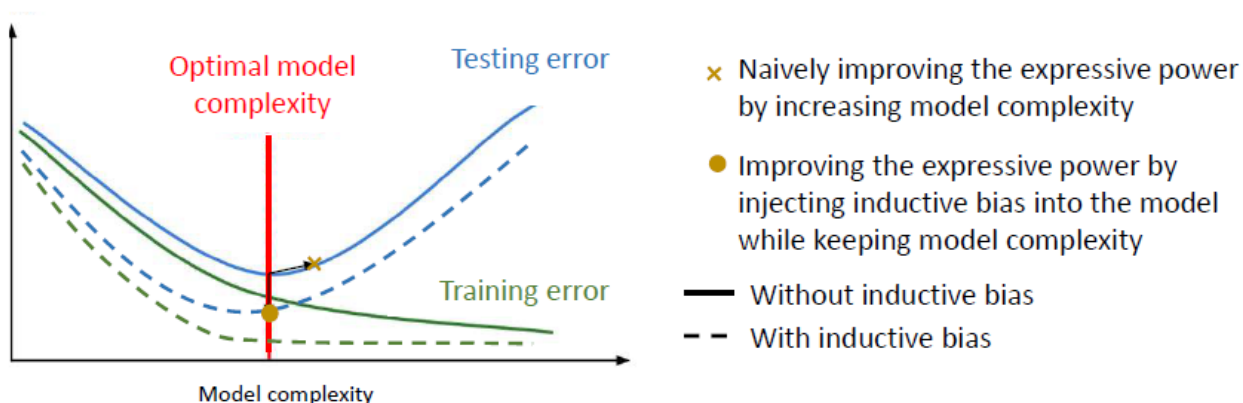


Fig. 5.2: Training and testing errors with and without inductive bias can dramatically affect the expressive power of models.

因此，我们希望建立能够保持强大表达能力的NN，同时对其参数施加约束——约束反映着对问题的先验认知。

对于CNN/RNN，模型共享参数的机制隐含着translation invariance的假设，对模型的表达力进行限制，但已经能完成对应任务(**limited but sufficient**)。

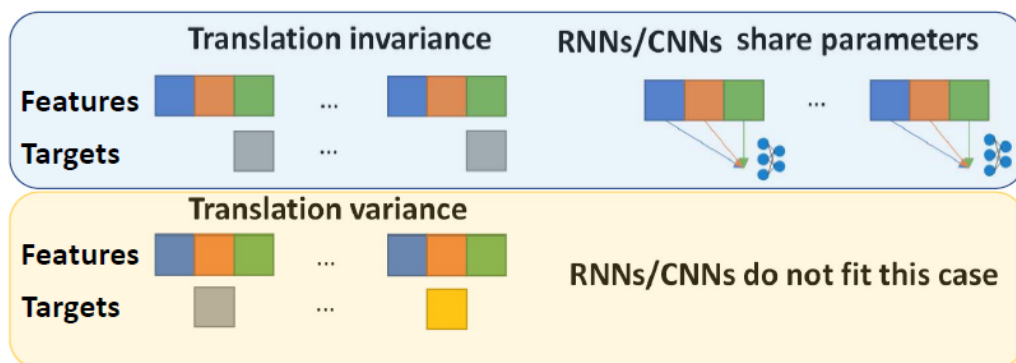


Fig. 5.3: Illustration of 1-dimensional translation invariance/variance. RNNs/CNNs use translation invariance to share parameters.

对于GNN，则有如下图所示的permutation invariance限定。

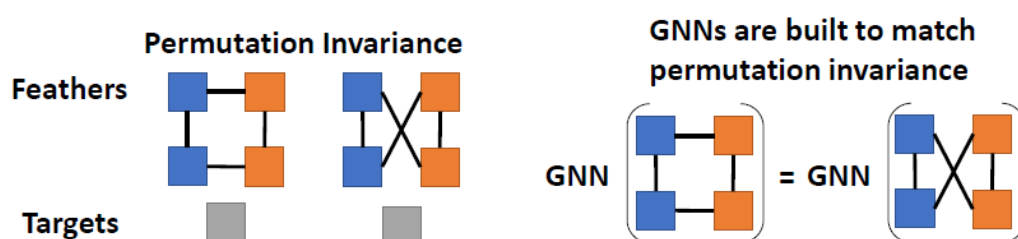


Fig. 5.4: This illustrates how GNNs are designed to maintain permutation invariance.

## 2. GNN表达能力的不同视角

### 1. 区分能力(separating power)/相似性度量:

经典工作为 *How Powerful are Graph Neural Networks?*，它使用的**图同构检验graph isomorphism problem**来衡量GNN表达能力。表达力强的GNN能学到分辨性强的graph embedding，让我们**在隐空间中判定两个图是否同构**。

进一步的，还可尝试探索GNN是否能处理更难的 **图编辑距离graph edit distance problem**。

### 2. 逼近能力(approximation power):

基于**函数逼近**思路，关心神经网络能够**表达的函数的范围有多大**，工作举例有 *EXPRESSIVE POWER OF INVARIANT AND EQUIVARIANT GRAPH NEURAL NETWORKS*。尝试证明GNN可以逼近的定义在图上的映射集合。

### 3. 模式识别:

通过研究GNN是否能识别图中的特定结构，把模式识别能力视作GNN的表达能力，工作举例有 *Can graph neural networks count substructures?*。

# 3. 提升表达力方式 (WL-test视角)

Chapter5: The Expressive Power of Graph Neural Networks的5.4章给出了具体介绍，在此不赘述。

- ▼ 5.4 Graph Neural Networks Architectures that are more Powerful than 1-WL Test
  - 5.4.1 Limitations of MP-GNN
  - ▼ 5.4.2 Injecting Random Attributes
    - 5.4.2.1 Relational Pooling - GNN (RP-GNN) (Murphy et al, 2019a)
    - 5.4.2.2 Random Graph Isomorphic Network (rGIN) (Sato et al, 2021)
    - 5.4.2.3 Position-aware GNN (PGNN) (You et al, 2019)
    - 5.4.2.4 Randomized Matrix Factorization (Srinivasan and Ribeiro, 2020a) (Dwivedi et al, 2020)
  - ▼ 5.4.3 Injecting Deterministic Distance Attributes
    - 5.4.3.1 Distance Encoding (Li et al, 2020e)
    - 5.4.3.2 Identity-aware GNN (You et al, 2021)
  - ▼ 5.4.4 Higher-order Graph Neural Networks
    - 5.4.4.1 k-WL-induced GNNs (Morris et al, 2019)
    - 5.4.4.2 Invariant and equivariant GNNs (Maron et al, 2018, 2019b)
    - 5.4.4.3 k-FWL-induced GNNs (Maron et al, 2019a; Chen et al, 2019f)

上述观察，主要都聚焦在graph-level研究GNN表达能力，而缺乏从node-level出发的表达能力讨论。

一说对于node-level任务，GNN已经是universal approximator，不必深入研究。（参考阅读2）

## ➤ Is expressive power necessary?

- Expressive power offers us a **theoretical** guide for understanding the capability of GNNs.
  - Whether, and to what degree, are GNNs **universal approximator** to functions mapping graphs to real-valued vector?
    - *For graph classification, No!!!*
    - *For node classification, it is almost.*

但另一方面，一直以来关于GNN架构的研究，除了提升其表达能力外，也在努力提升其拟合能力——使模型能从有限的训练数据中尽可能拟合ground truth映射函数 $f^*$ 。

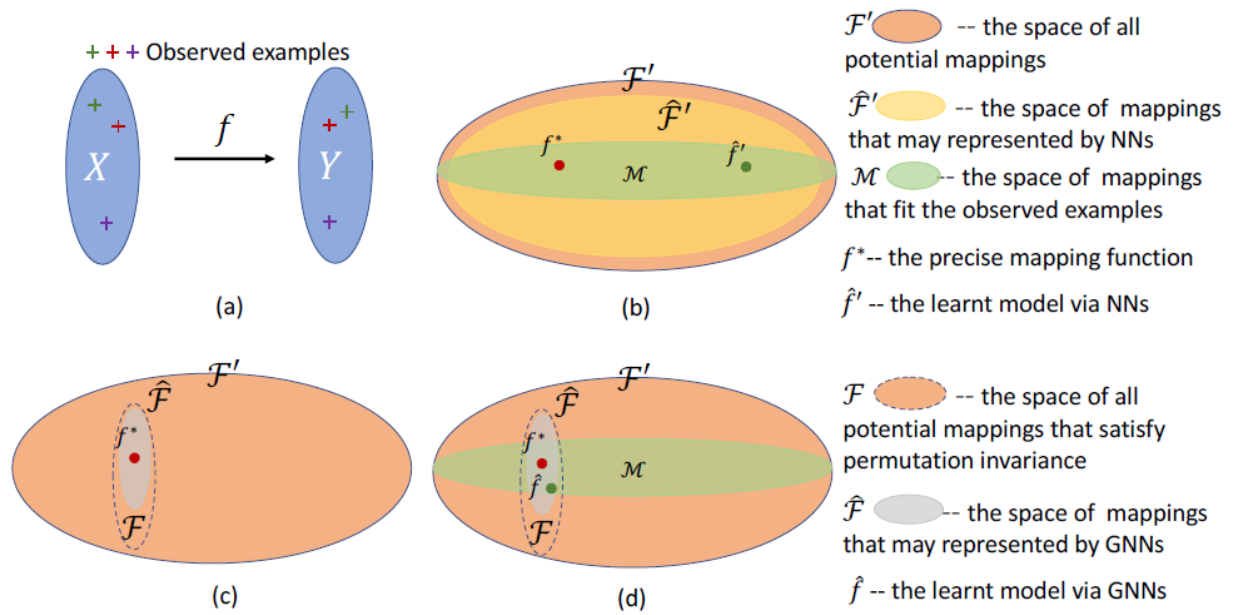


Fig. 5.5: An illustration of the expressive power of NNs and GNNs and their affects on the performance of learned models. a) Machine learning problems aim to learn

或许可理论层面分析node-level层面GNN的表达能力、泛化能力（待阅读[How Neural Networks Extrapolate: From Feedforward to Graph Neural Networks. Keyulu Xu et al. ICLR 2021](#)、[What Can Neural Networks Reason About? Keyulu X et al. ICLR2020](#)）；也可能参考上述他人证明，指导设计 theortical proven node-level specific GNN。