

第18章 图分析算法

《人工智能算法》

清华大学出版社

2022年7月

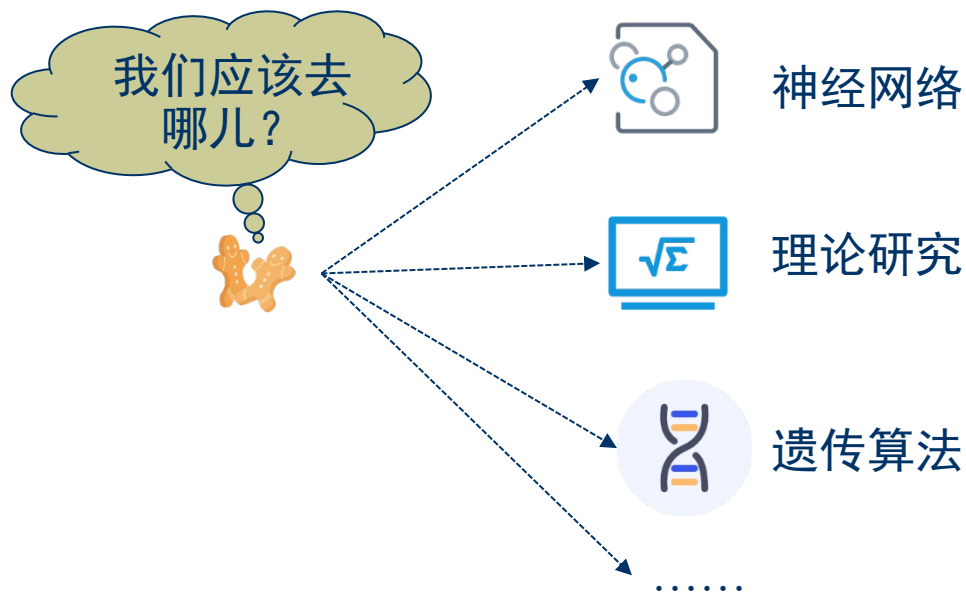
提纲

- ◆ 引例
- ◆ 图分析概述
- ◆ 图神经网络
- ◆ 图卷积网络
- ◆ 基于图卷积网络的图节点分类
- ◆ 总结

引例 (1)

◆ 论文分类

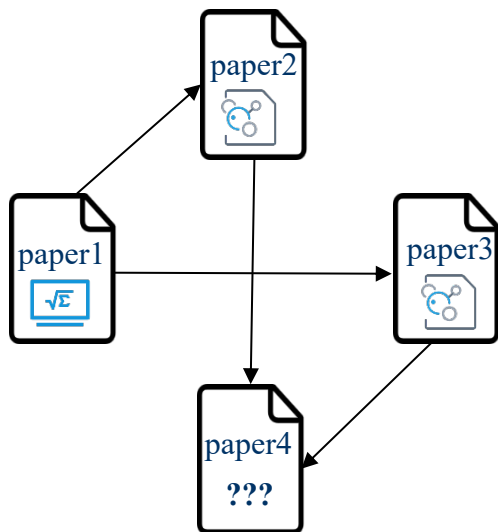
- ✓ 以机器学习领域论文为例，论文可基于“遗传算法”、“神经网络”、“理论研究”等主题划分为多类。
- ✓ 面对大量论文时，人工标注所有论文类别变得**非常困难**。



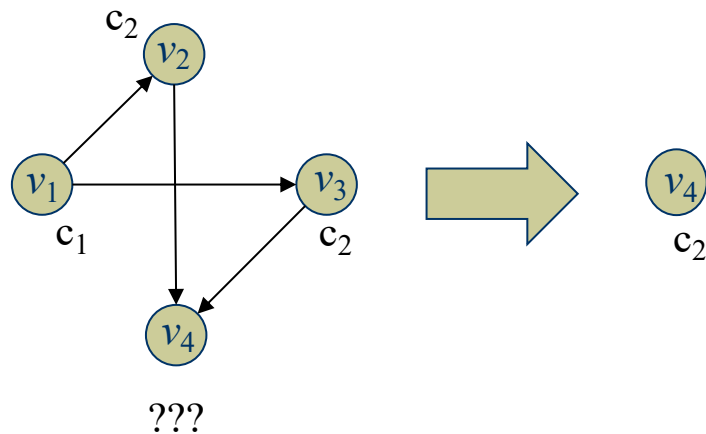
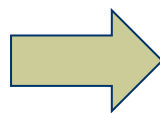
引例 (2)

◆ 图分析方法

- ✓ 通过收集论文中各词出现的情况、论文之间的引用关系以及部分论文的分类
- ✓ 以论文为节点，以词出现情况为节点特征、以引用关系为边构建图节点分类模型
- ✓ 预测其他论文的分类



论文分类问题



图节点分类问题

提纲

- ◆ 引例
- ◆ 图分析概述
- ◆ 图神经网络
- ◆ 图卷积网络
- ◆ 基于图卷积网络的图节点分类
- ◆ 总结

图分析概述 (1)

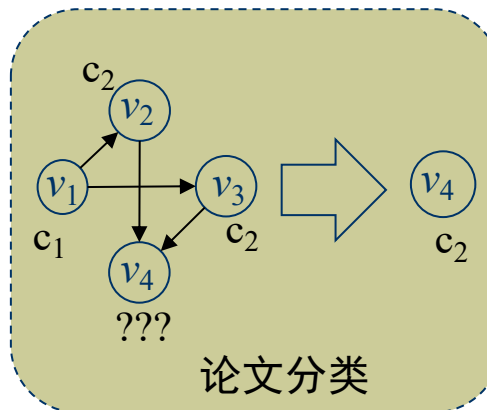
◆ 图分析目的

挖掘图数据中的知识，为基于图数据的分析应用提供支撑

◆ 图分析任务

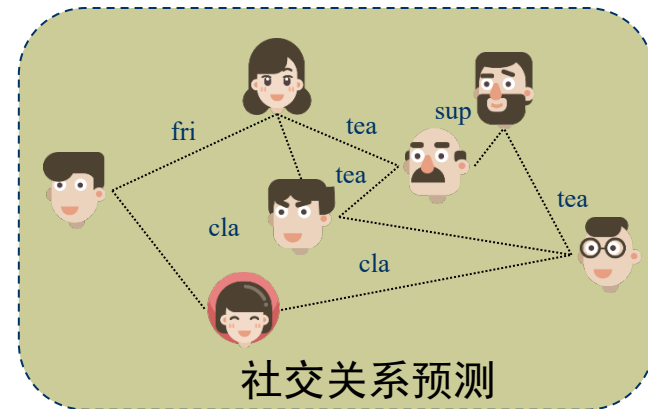
✓ 节点级

节点分类：论文分类



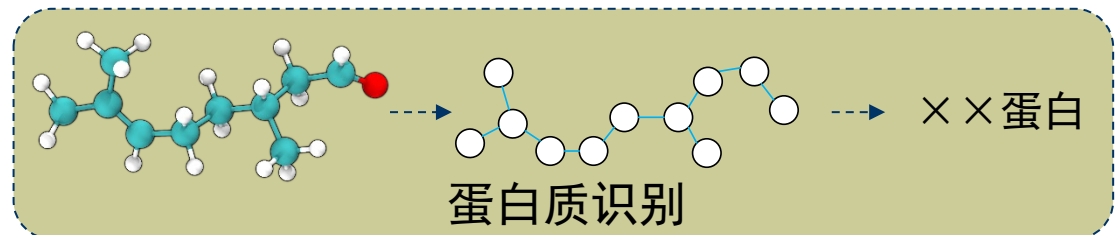
✓ 边级

链接分类：社区发现、社交关系预测



✓ 图级

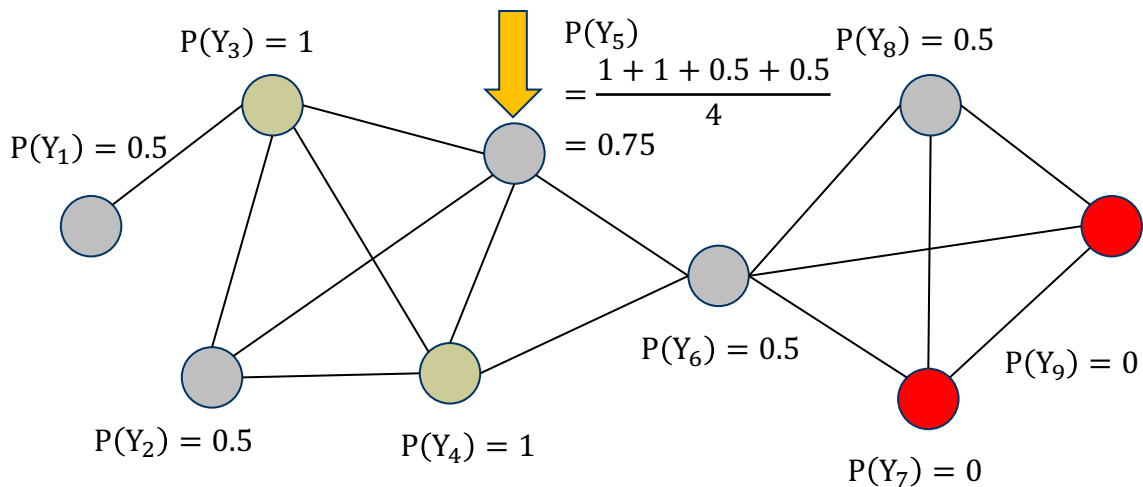
图生成：蛋白质生成
交通路线规划



图分析概述 (2)

◆ 图分析

- ✓ **传统算法**：最小生成树算法、联通子图算法、标签传播算法
- ✓ **标签传播算法**：节点 v 的类别概率 $P(Y_v = c | c \in \{0,1\})$ 是其邻居节点类别概率的加权平均。（假设只有0、1两种分类）



- **优点**：算法易实现、直观 😊
- **缺点**：
 - 无法保证收敛性 😞
 - 没有充分利用其他信息，如节点特征、边特征和图特征 😞

图分析概述 (3)

◆ 图分析

✓ 基于图神经网络的算法

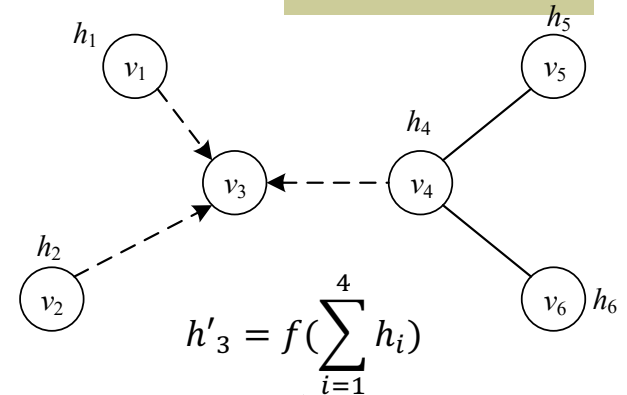
✓ 图卷积神经网络 (GCN)

对边特征、节点特征、图特征进行**聚合**及**更新**操作

✓ 图注意力网络 (GAT)

给每条边加上可学习的系数，进行带注意力的节点特征融合，使得模型在卷积过程中能够根据任务实时调整系数

$$h'_3 = \tilde{f}\left(\sum_{i=1}^4 h_i\right)$$



带注意力的节点特征融合

图分析概述 (4)

- ◆ **图分析：基于图神经网络的算法**
- **优点：**
 - ✓ 充分利用图中的信息，有效地提取的节点特征
 - ✓ 从节点、边和图层面实现高效的表示学习
 - ✓ 学习到更加丰富的语义信息
- **缺点：**
 - ✓ 无法通过堆叠神经网络层数来获得更好的性能
 - ✓ 节点特征计算的代价将非常高昂

提纲

- ◆ 引例
- ◆ 图分析概述
- ◆ 图神经网络
- ◆ 图卷积网络
- ◆ 基于图卷积网络的图节点分类
- ◆ 总结

图神经网络 (1)

◆ 图神经网络 (Graph Neural Network, GNN)

- 概述

- ✓ 一类用于图数据建模与分析的神经网络
- ✓ 利用图卷积操作聚合信息，得到节点、边和图的特征

- 分类

- ✓ 消息传播神经网络 (Message Passing Neural Network, MPNN)
- ✓ 非局部神经网络 (Non-Local Neural Network, NLNN)

- 归纳

图网络 (Graph Network, GN) 是GNN结构的一般化总结

图神经网络 (2)

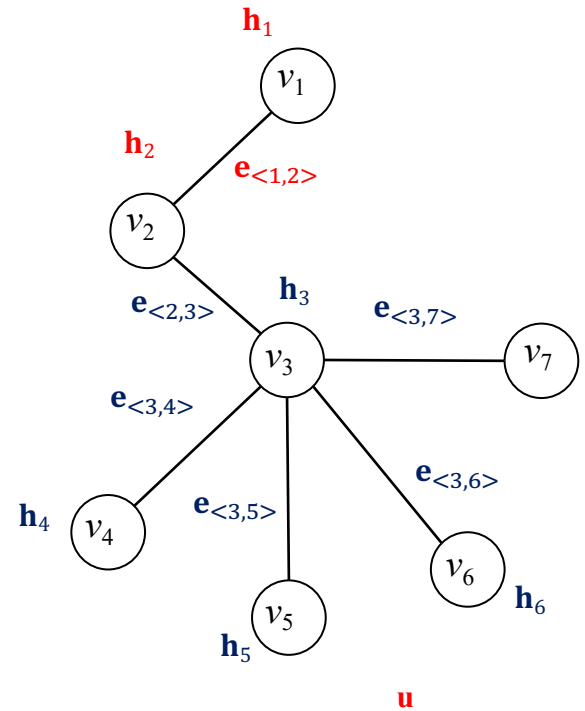
◆ 图网络的操作

- 边更新

- ✓ 输入边特征 $\mathbf{e}_{\langle i,j \rangle}$ 、全图特征 \mathbf{u} 、节点特征 \mathbf{h}_i 和 \mathbf{h}_j
- ✓ 利用更新函数 ϕ^e 得到新的边特征 $\mathbf{e}'_{\langle i,j \rangle}$

$$\mathbf{e}'_{\langle i,j \rangle} = \phi^e(\mathbf{e}_{\langle i,j \rangle}, \mathbf{h}_i, \mathbf{h}_j, \mathbf{u})$$

例如，图中的边特征 $\mathbf{e}'_{\langle 1,2 \rangle}$ 为 $\phi^e(\mathbf{e}_{\langle 1,2 \rangle}, \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{u})$ 。



图神经网络 (3)

- 节点更新

- ✓ 边更新后，输入与节点 v_i 相关的边特征 $\mathbf{e}'_{\langle i,j \rangle}$
- ✓ 利用聚合函数 $\rho^{e \rightarrow h}$ 聚合与节点 v_i 相关的边特征 $\mathbf{e}'_{\langle i,j \rangle}$

$$\bar{\mathbf{e}}'_i = \rho^{e \rightarrow h}([\mathbf{e}'_{\langle i,j \rangle}, \forall v_j \in N(v_i)])$$

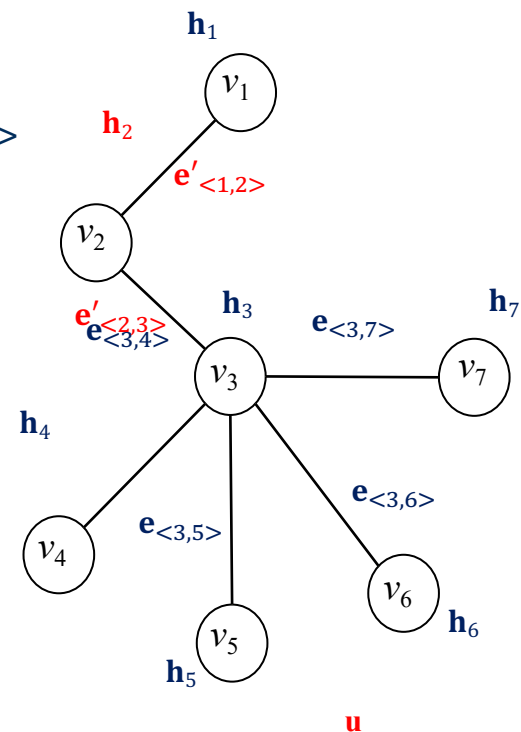
- ✓ 利用更新函数 ϕ^h 得到新的节点特征 \mathbf{h}'_i

$$\mathbf{h}'_i = \phi^h(\bar{\mathbf{e}}'_i, \mathbf{h}_i, \mathbf{u})$$

例如，图中

$$\bar{\mathbf{e}}'_2 \text{ 为 } \rho^{e \rightarrow h}([\mathbf{e}'_{\langle 1,2 \rangle}, \mathbf{e}'_{\langle 2,3 \rangle}])$$

$$\mathbf{h}'_2 \text{ 为 } \phi^h(\bar{\mathbf{e}}'_2, \mathbf{h}_2, \mathbf{u})。$$



图神经网络 (4)

图更新

- ✓ 边更新以及节点更新后，输入全图的边特征和节点特征
- ✓ 利用聚合函数 $\rho^{e \rightarrow u}$ 聚合所有的边特征

$$\bar{\mathbf{e}}' = \rho^{e \rightarrow u}([\mathbf{e}'_{\langle i,j \rangle}, \forall \langle i,j \rangle \in E])$$

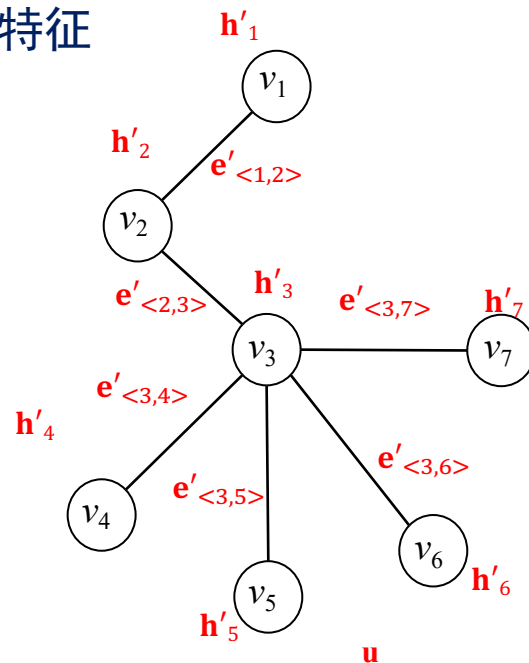
- ✓ 利用聚合函数 $\rho^{h \rightarrow u}$ 聚合所有节点特征

$$\bar{\mathbf{h}}' = \rho^{h \rightarrow u}([\mathbf{h}'_i, \forall v_i \in V])$$

- ✓ 利用更新函数 ϕ^u 得到新的全图特征 \mathbf{u}'

$$\mathbf{u}' = \phi^u(\bar{\mathbf{e}}', \bar{\mathbf{h}}', \mathbf{u})$$

例如，图中 \mathbf{u}' 为 $\phi^u(\rho^{e \rightarrow u}([\mathbf{e}'_{\langle 1,2 \rangle}, \dots]), \rho^{h \rightarrow u}([\mathbf{h}'_1, \dots]), \mathbf{u})$



图神经网络 (5)

- ◆ **使用GNN进行图分析处理的基本步骤**

- **定义损失函数**

根据具体图分析任务类别定义损失函数

- **搭建模型结构**

根据任务输入和目标输出搭建模型结构，包括输入层、图卷积层和输出层

- **训练模型**

基于损失函数和梯度下降法设计模型训练算法，更新图卷积层的参数

- **实现图分析任务**

基于训练好的GNN模型实现具体的图分析任务

提纲

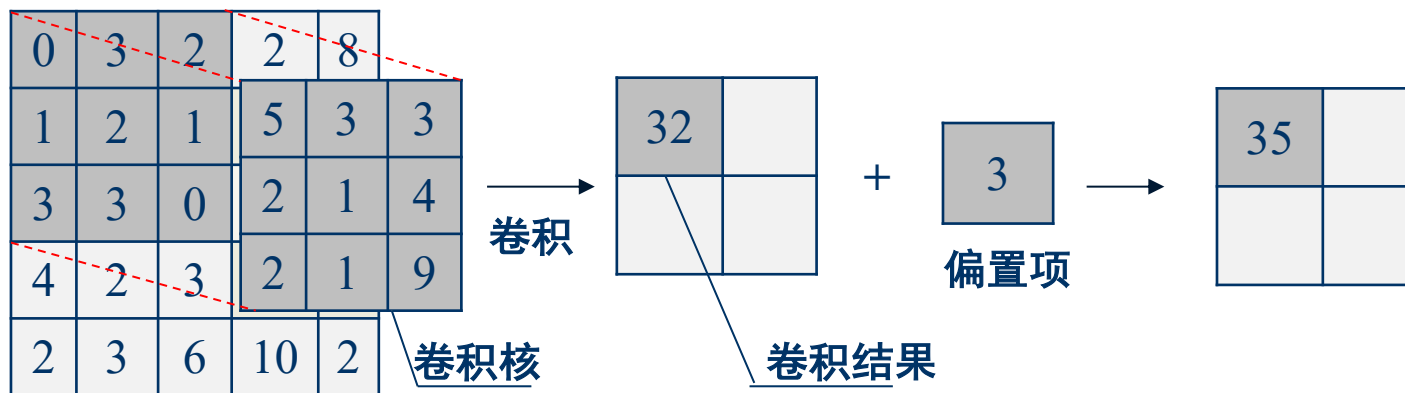
- ◆ 引例
- ◆ 图分析概述
- ◆ 图神经网络
- ◆ 图卷积神经网络
- ◆ 基于图卷积网络的图节点分类
- ◆ 总结

图卷积神经网络 (1)

◆ 概述

图卷积神经网络（Graph Convolution Network, GCN）是一类基于MPNN框架的图神经网络，其核心是将卷积神经网络的卷积操作拓展在图数据上。

◆ 传统卷积神经网络

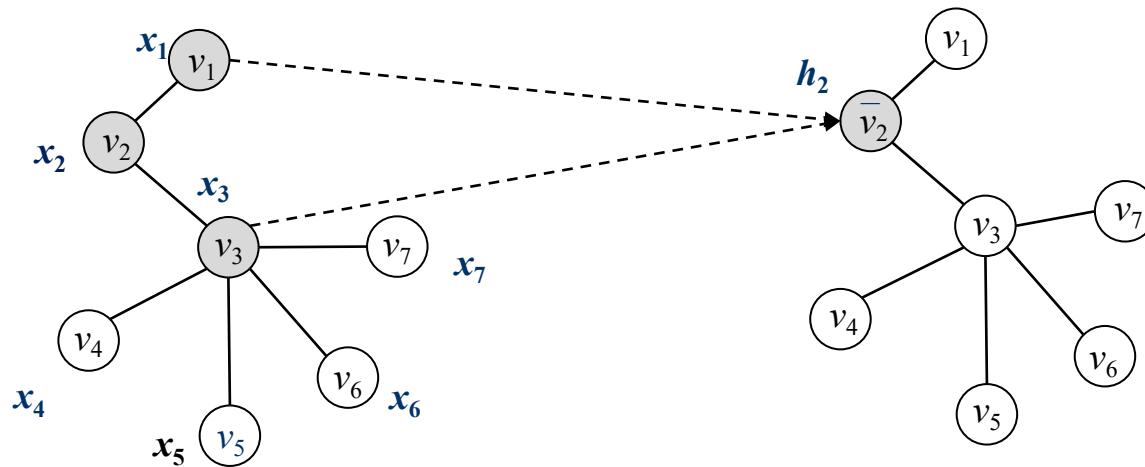


$$0 \times 5 + 3 \times 3 + 2 \times 3 + 1 \times 2 + 2 \times 1 + 1 \times 4 + 3 \times 2 + 3 \times 1 + 0 \times 9 + 3 = 35$$

图卷积神经网络 (2)

◆ 图卷积

将卷积操作拓展到图上



操作过程：消息传播 + 节点更新

图卷积神经网络 (3)

◆ 消息传播①

- 利用消息传播函数 M 接收第 l 层 GCN 的邻居的信息 \mathbf{o}^l

$$\mathbf{o}_i^{l+1} = \sum_{v_j \in N(v_i)} M^l(\mathbf{e}_{\langle i,j \rangle}^l, \mathbf{h}_i^l, \mathbf{h}_j^l)$$

例如，图中 v_2 接收的邻居信息 \mathbf{o}_2^2 为

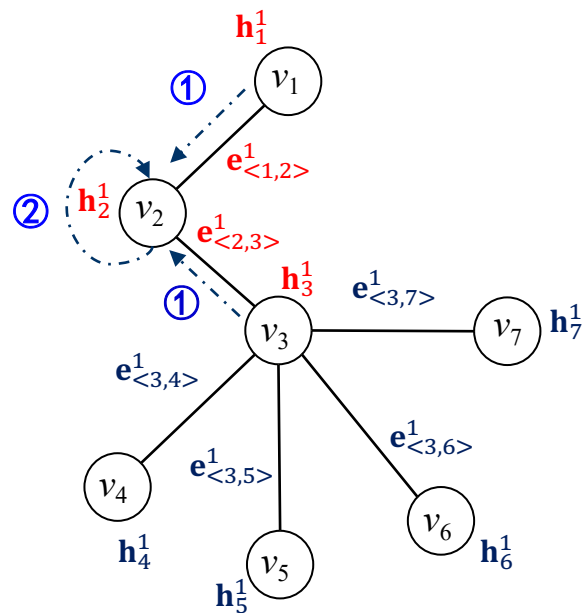
$$\sum_{v_j \in \{v_1, v_3\}} M^1(\mathbf{e}_{\langle 2,j \rangle}^1, \mathbf{h}_2^1, \mathbf{h}_j^1)$$

◆ 节点更新②

- 利用更新函数 U 更新第 l 层节点特征 \mathbf{h}_i^{l+1}

$$\mathbf{h}_i^{l+1} = U^l(\mathbf{o}_i^{l+1}, \mathbf{h}_i^l)$$

例如，图中 v_2 的节点特征 \mathbf{h}_2^2 为 $U^1(\mathbf{o}_2^2, \mathbf{h}_2^1)$



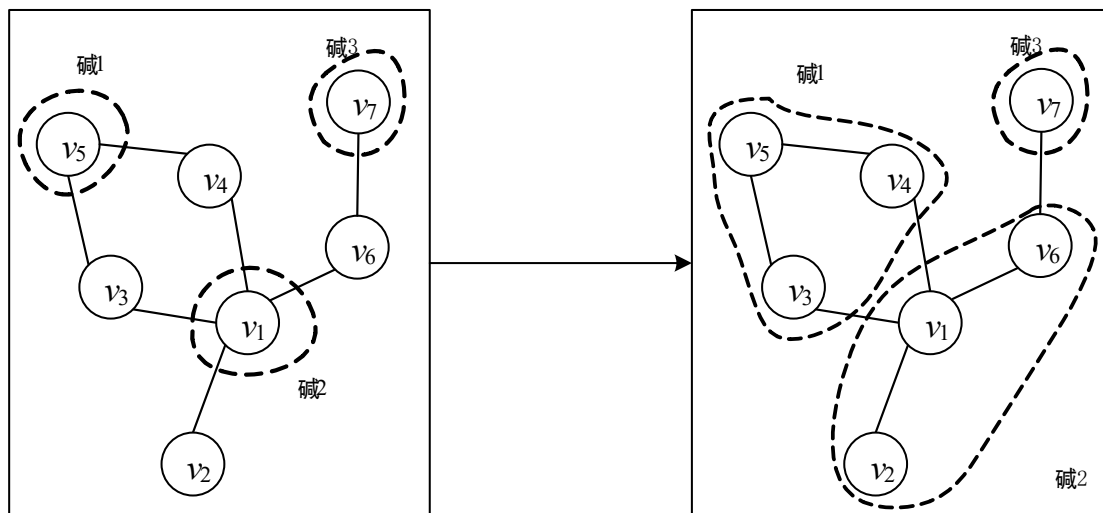
提纲

- ◆ 引例
- ◆ 图分析概述
- ◆ 图神经网络
- ◆ 图卷积网络
- ◆ 基于图卷积网络的图节点分类
- ◆ 总结

基于图卷积网络的图节点分类 (1)

◆ 问题描述

给定图网络，其中包含部分已标注类别的节点，对未标注的节点进行标注



◆ 形式化描述

- 输入

图网络 $G=(V, E, H, e, u)$; 部分节点类别 $Y=(y_1, y_2, \dots, y_n)$; 节点属性 $X=(x_1, x_2, \dots, x_n)$

- 输出

全部节点类别 $P=(p_1, p_2, \dots, p_n)$

基于图卷积网络的图节点分类 (2)

◆ 损失函数

$$\mathbb{E}(\mathbf{Y}, \mathbf{P}) = -\frac{1}{|\mathbf{Y}|} \sum_{i=1}^{|\mathbf{Y}|} \sum_{j=1}^C \mathbf{Y}_{ij} \log \mathbf{P}_{ij}$$

其中， C 为节点类别数， \mathbf{Y} 为节点类别矩阵， \mathbf{P} 为预测的节点类别矩阵， \mathbf{Y}_{ij} 为节点 i 属于类别 j 的情况， $|\mathbf{Y}|$ 表示样本数， \mathbf{P}_{ij} 表示节点 i 属于类别 j 的概率

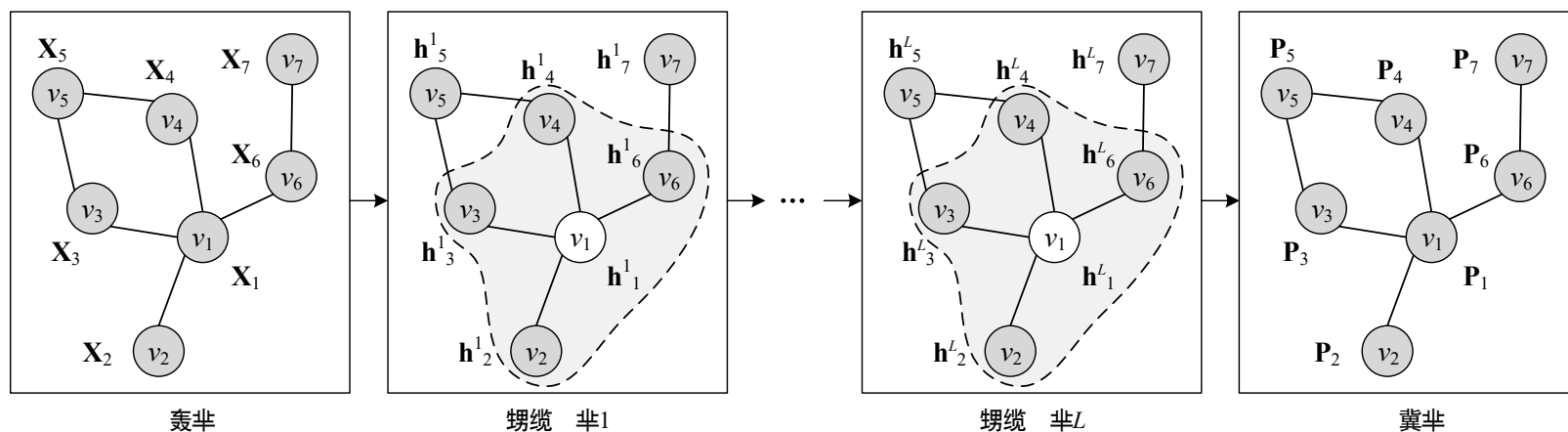
真实节点类别矩阵 $\mathbf{Y}^{\text{tr}} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$ \longrightarrow 真实概率矩阵 $\mathbf{Y}^{\text{tr}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

\longrightarrow $\mathbb{E}(\mathbf{Y}, \mathbf{P}) = -\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \mathbf{Y}_{ij} \log \mathbf{P}_{ij} \approx 0.12$

预测节点类别矩阵 $\mathbf{P}^{\text{tr}} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ \longleftarrow 预测概率矩阵 $\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.7 & 0.2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0.6 & 0 & 0.4 \end{bmatrix}$

基于图卷积网络的图节点分类 (3)

◆ 模型结构搭建



— 输入层

接收图的邻接矩阵A和节点特征矩阵X

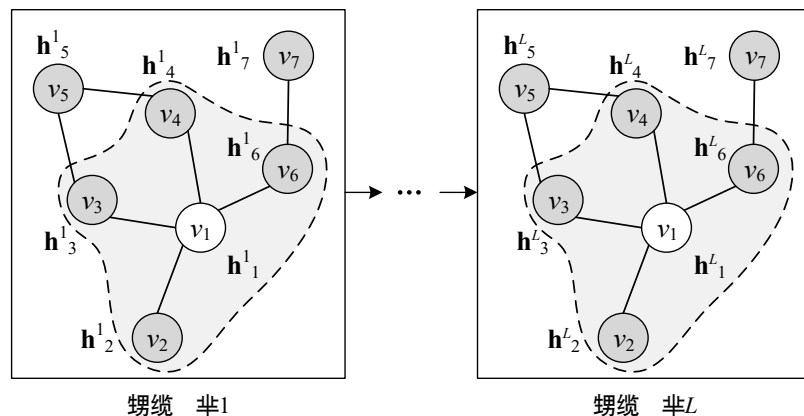
基于图卷积网络的图节点分类 (4)

图卷积层

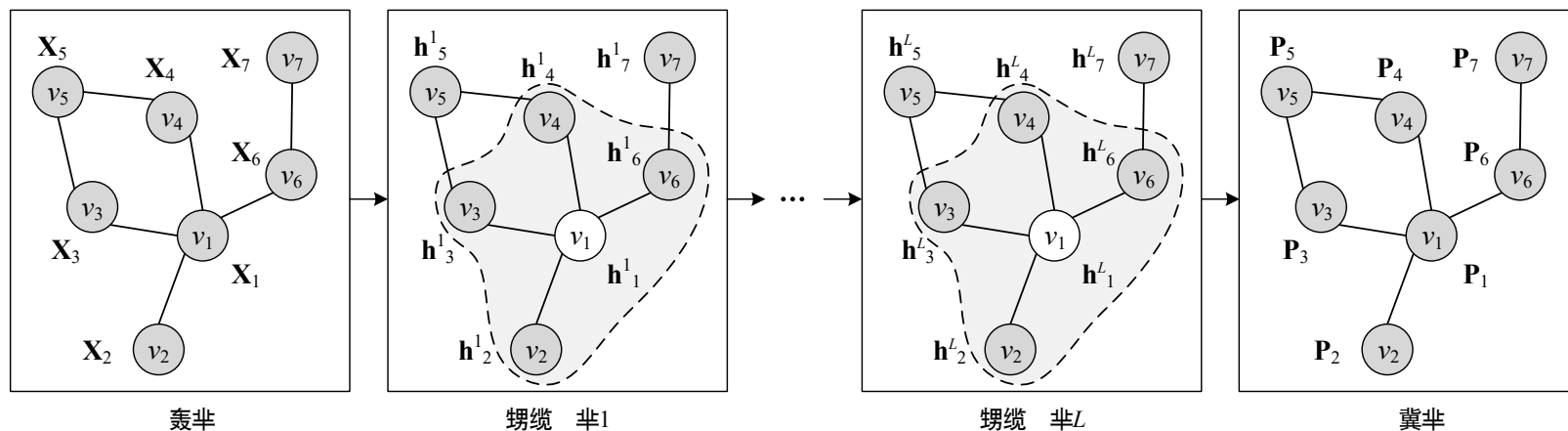
根据消息传播和节点更新操作更新节点特征，这里以矩阵的形式进行更新

$$\mathbf{H}^{l+1} = \sigma(\mathbf{A}\mathbf{H}^l\mathbf{W}^l)$$

- ✓ \mathbf{H}^{l+1} 表示第 l 个图卷积层输出的节点特征矩阵
- ✓ \mathbf{W}^l 表示第 l 个图卷积层待学习的权重矩阵
- ✓ σ 表示形如ReLU的非线性激活函数
- ✓ \mathbf{A} 表示邻接矩阵，通常用归一化操作防止梯度爆炸或者梯度消失，归一化包括随机游走归一化、对称归一化、自循环归一化



基于图卷积网络的图节点分类 (5)

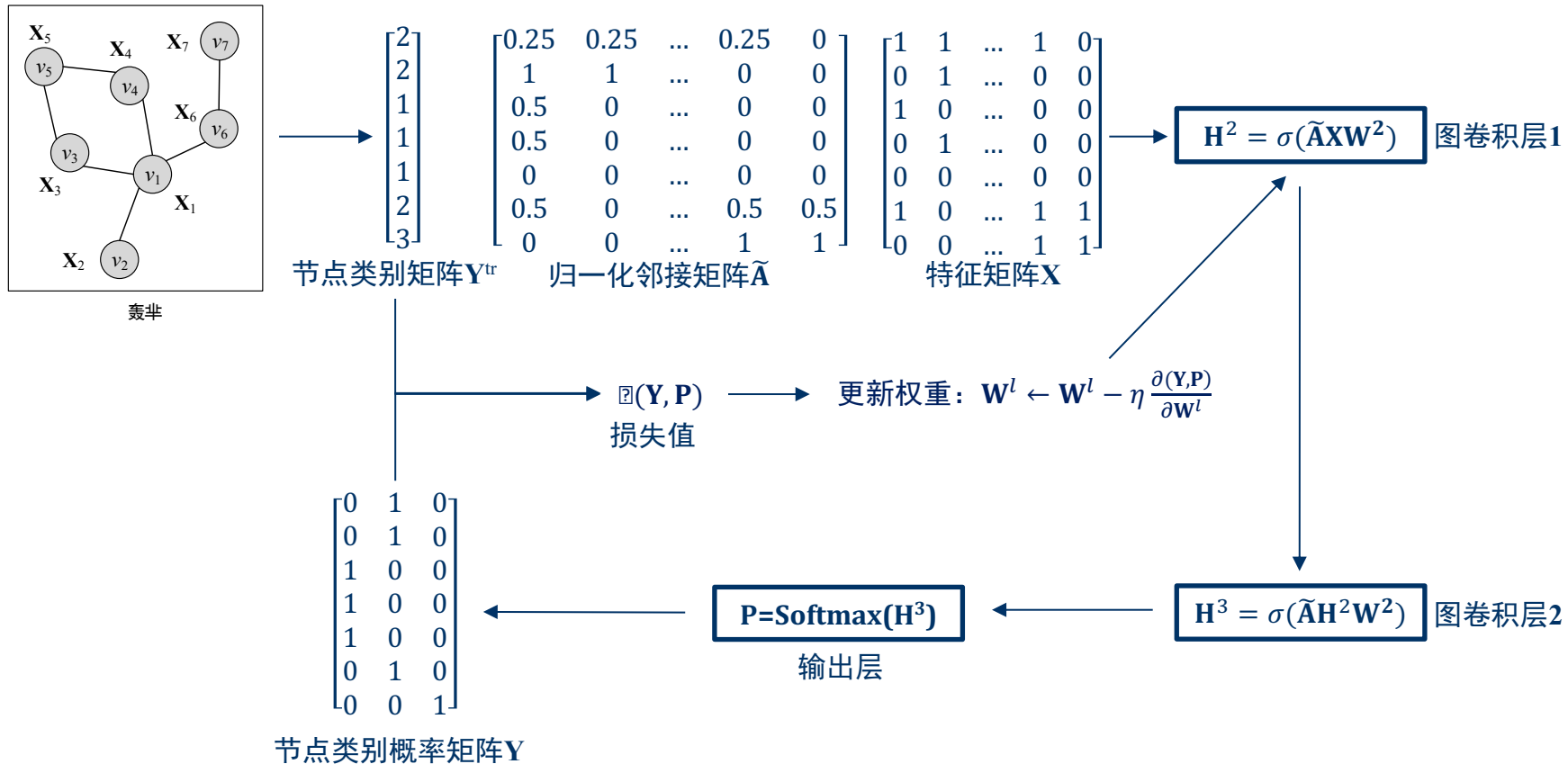


— 输出层

利用Softmax函数将卷积层 L 输出的节点特征矩阵 \mathbf{H}^{L+1} 映射为节点类别矩阵 \mathbf{P}^{tr}

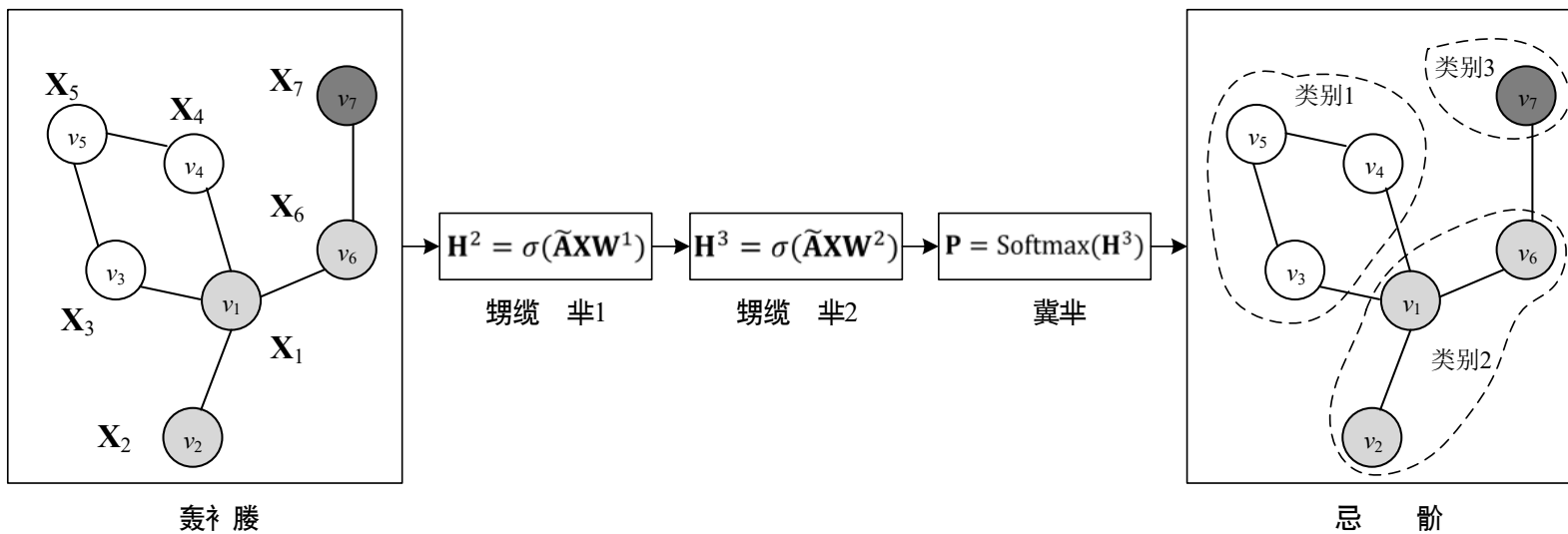
基于图卷积网络的图节点分类 (6)

模型训练



基于图卷积网络的图节点分类 (7)

◆ 模型预测



提纲

- ◆ 引例
- ◆ 图分析概述
- ◆ 图神经网络
- ◆ 图卷积网络
- ◆ 基于图卷积网络的图节点分类
- ◆ 总结

总结

- ◆ 图分析目的、任务和方法
- ◆ 图神经网络的分类，节点级、边级和图级的更新操作
- ◆ 使用图神经网络进行图分析的基本步骤
- ◆ 图分析的经典实例：
 - 标签传播
 - 基于图卷积网络的图节点分类



结语



谢谢！