











基于差分池化的分层图表示方法概述










作者: [vcjmhg](#)

原文链接: <https://ld246.com/article/1572163646961>

来源网站: [链滴](#)

许可协议: [署名-相同方式共享 4.0 国际 \(CC BY-SA 4.0\)](#)

声明

本篇论文的主要内容来自于斯坦福大学的博士生 Rex Ying，论文名称为：Hierarchical Graph Representation Learning with Differentiable Pooling。论文地址：https://ld246.com/forward?goto=https%3A%2F%2Fgithub.com%2Fvcjmhg%2FTestBlog%2Fblob%2Fmaster%2Fsrc%2Fmain%2Ffiles%2FHierarchical_Graph_Representation_Learning_withDif.pdf 点击下载。但需要说明的是本篇文正并不是对论文的翻译，书中大部分内容作者对论文理解，当然可能个人水平有限，中间难免会出现一些错误，如若发现恳请指出，不胜赐教

背景

近年来人们对卷积神经网络的研究越来越热门化，其成果被广泛应用于计算机视觉、自然语言处理诸多领域。但是人们深入研究的过程中也发现了 cnn 的诸多不足。其中最大的局限性之一就是无法进行因果推理。对于该问题工业界一直在进行积极探索，其中一个很有前景的方向就是图神经网络，简称为 GNN。GNN 在对图进行处理的过程中将底层的输入图作为一个计算图，通过在图中节点、边和聚合特征节点信息来学习生成单个节点嵌入。然后将生成的节点嵌入用作微分预测层的输入，例如用于节点分类或者链接预测。然而当前 GNN 有一个极大的限制就是其处理过程是平面化的即信息的传递更多在边上进行，而不是以层级方式推断和聚合信息。但是对于图分类来说，层级结构的确实确实是个比较严重的问题，因为该类任务主要是用于预测出整个图相关的标签。如果对该类任务用传统的 GN 方式进行处理，它会对图中所有的节点嵌入进行全局池化，这种全局池化的方式忽略了图中存在的次结构，不利于生成有效的 GNN 模型。因此作者在本篇论文中提出了“基于差分池化的分层图表示式”，这是一个可以分层和端到端的方式应用于不同图神经网络的可微图池化模块。DIFFPOOL 允许发可以学习在图的层级表征上运行的更深度的 GNN 模型。他们开发了一个和 CNN 中的空间池化操作相似的变体，空间池化可以让深度 CNN 在一张表征越来越粗糙的图上迭代运行。与标准 CNN 相比 GNN 的挑战在于图不包含空间局部性的自然概念，也就是说，不能将所有节点简单地以 $[m \times m \text{ patch}]$ 的方式池化在一张图上，因为图复杂的拓扑结构排除了任何直接、决定性的 $[patch]$ 的定义。此外，与像数据不同，图数据集中包含的图节点数和边数都不同，这使得定义通用的图池化操作更具挑战性

算法概述

该算法通过通过上一层的节点嵌入将本层节点映射为一组堆叠，然后生成的堆叠作为下一组的节点嵌入，一次类推。以下图为例

第一层通过上一层的节点嵌入生成一组堆叠，然后该组堆叠作为第二层的节点嵌入，当然该图表示只有三层，实际的 GNN 模型可能会有十几层。在这种方法的处理下，每处理一层图就会越粗化，并通过该方法训练之后可以产生任何输入图的层级表征。

接下来我们对算法的具体过程进行描述，开始之前我们首先要明确两个概念，第一个是训练集，论文作者选择的训练集命名为 G ，其中 G_1 、 G_2 、 G_3 都有两部分组成即 A 和 F ， A 表示的是图的邻接矩阵， F 表示的节点特征矩阵。而 y_1 、 y_2 、 y_3 都输入分类集合 y 代表的是某个具体的分类标签。我们的目标是训练一个模型，该模型通过给出其输入图，然后输出其对应的分类标签。

在论文中作者选择的是 GNN 中的 `message passing` 方式作为 GNN 模型，该模型的具体构成如下图所示

通过多次训练逐步找出训练参数，然后得出训练模型。上边的公式我们可以看到其核心是传播函数 M 针对 M 的选择有好多种，作者在论文中选择的是将线性变化和 ReLU 非线性激活函数结合起来而形成的一个传播函数。该函数的具体形式如下所示

比较复杂如果大家感兴趣可以查相关文献，这里就不在进行详述了。作者本篇论文中给出的基于分配

习的可微池化方法抽象说就是，通过给定第 L 层的节点嵌入以及第 L 层的邻接矩阵，产生第 L+1 层邻接矩阵以及第 L+1 层的粗化图的特征矩阵。具体讲通过下边两个公式，第一个公式产生第 L+1 层粗化图特征矩阵，第二公式产生第 L+1 层的节点嵌入。大家注意作者为了得到第 L 层的节点嵌入和第 L 层软分配这里他用到了两个 GNN 模型（两个模型是不同的）以及 softmax 函数。



实验验证

作者为了证明自己方法的优越性设计了一系列实验来进行验证，他在论文中给出了三个需要验证问题也就是实验问题。

-

- Q1: 与其他已提出的 GNN 池化方法相比，DIFFPOOL 如何?

- Q2: 与现有最好的图分类任务模型相比，结合了 DIFFPOOL 的 GNN 如何?

- Q3: DIFFPOOL 对输入图给出了有意义且可解释的簇吗?

为了保证方法的泛化能力，作者使用多种图的分类基准数据包括蛋白质数据集、社交网络数据集及科学协作数据集作为输入。设计了一个多层的神经网络模型，其中 GNN 部分选择的是 GCN 的变体 CRAPHSAGE 作为 GNN 模型，其中每两个 GNN 层都加上一层微分池化层。通过实验作者也给出了实验结果



从这张图函数我们可以看到微分池化方法在 GNN 池化方法中获得了最高的平均性能值，其中四个基测试中有四个达到了最优。因此我们可以得出结论与其他 GNN 池化方法相比，微分池化方法表现是好的。针对第三个问题的回答。作者给出了 COLLAB 数据集的前两层节点分配的可视化图，可以看出微分池化可以学习稀疏图中存在的有意义的部分，并且可以对输入图给出有意义且可解释的。

