

图神经网络

从谱图理论到前沿图学习

MarkZZZ WeChat: MarkZZZ20XX

课程简介

本课程系统讲授图神经网络 (Graph Neural Networks, GNN) 的数学基础、核心模型与前沿方法。课程以严格的数学推导为核心：从谱图理论 (Laplacian 特征分解、图傅里叶变换、谱卷积定理) 出发，推导 ChebNet 的 Chebyshev 多项式近似与 GCN 的一阶简化，深入分析消息传递神经网络 (MPNN) 的统一框架及其等变性/不变性；严格证明 Weisfeiler-Leman 测试与 GNN 表达能力等价性 (Xu et al. 2019 的完整定理)；涵盖图生成模型 (GraphVAE、GraphRNN、GDSS 扩散图生成)、时序图网络、异构图与知识图谱推理；探讨图上大规模学习的采样理论与分布式训练；分析 GNN 在组合优化 (TSP/MVC/IS) 中的近似比；以及图基础模型、图 Transformer、分子/蛋白质/材料科学的前沿应用。课程要求学员具备扎实的线性代数与概率论基础，能够理解并推导核心定理的完整证明，掌握从理论分析到实验设计的完整研究能力。

适合人群

- 计算机科学、数学、统计学及相关专业的博士研究生
- 从事图学习、网络科学与几何深度学习的科研人员
- 希望深入理解 GNN 数学原理 (谱理论、等变性、WL 层次) 的高级工程师
- 对 AI for Science (分子/蛋白质/材料/知识图谱) 感兴趣的跨学科研究者

前置知识

- 线性代数：矩阵分解 (特征分解、SVD)、矩阵多项式、谱理论基础
- 图论：图的基本概念 (路径、连通性、树、二部图)、图矩阵 (邻接矩阵、度矩阵、Laplacian)
- 实分析/泛函分析：函数空间、 L^2 空间、内积、Fourier 分析基础
- 概率论：随机图模型、期望与方差、集中不等式
- 深度学习：前馈网络、反向传播、注意力机制、变分自编码器基础
- 凸优化：梯度下降、拉格朗日对偶、近端算子
- 编程能力：Python + PyTorch/PyG (PyTorch Geometric)，能够实现论文中的算法

1 课程内容

讲次	主题	内容概要
1	图论基础	图的矩阵表示（邻接矩阵 A 、度矩阵 D 、关联矩阵 B ）、规范化 Laplacian $\mathcal{L} = D^{-1/2}LD^{-1/2}$ 的半正定性证明、Laplacian 特征值与图结构（代数连通度、谱间隙、Cheeger 不等式完整证明）、随机游走与 PageRank 的矩阵形式、Perron-Frobenius 定理、谱聚类（Fiedler 向量）、图同构问题概述
2	谱图理论	图傅里叶变换 $\hat{f} = U^\top f$ （Laplacian 特征分解）、图上卷积定理 $f * h = U(U^\top f \odot U^\top h)$ 的完整推导、滤波器的频域解释（低通/高通/带通）、带宽分析、多分辨率图分析（图小波）、Graph SAGE 前驱：扩散核、谱域方法的内在缺陷（计算复杂度 $O(n^3)$ 、非局部性）及局部化解决方案
3	谱域 GNN	SpectralCNN 到 GNN 的演化、ChebNet: Chebyshev 多项式近似推导（ \tilde{L} 的谱裁剪、递推计算、 $O(m)$ 复杂度）、GCN（Kipf & Welling 2017）：一阶近似完整推导、自环技巧与规范化、层叠传播规则 $H^{(l+1)} = \sigma(\hat{A}H^{(l)}W^{(l)})$ 的谱意义、过平滑（Over-Smoothing）现象的理论分析（Dirichlet 能量衰减）、SGCN/APPNP：分离传播与预测、 k 阶近似的谱域比较
4	空域 GNN	消息传递范式的空域直觉、GraphSAGE（Hamilton et al. 2017）：采样聚合、归纳学习（Inductive）、图注意力网络 GAT（Veličković et al. 2018）：注意力系数完整导出、多头注意力、图同构网络 GIN（Xu et al. 2019）： ε 技巧与 MLP 聚合、PNA（Principal Neighbourhood Aggregation）：多标量/多方向聚合、EdgeConv（DGCNN）与点云处理、空域与谱域方法对比
5	图同构与表达能力	图同构问题（GI）与 WL 算法：1-WL 颜色精化完整描述、GNN 表达能力上界定理（Xu et al. 2019, 完整证明）：GNN \preceq 1-WL、GIN 达到 1-WL 上界的充要条件及证明、反例构造：1-WL 不能区分的图类（正则图、Cai-Fürer-Immerman 图）、高阶 WL（ k -WL）与 k -GNN、 δ - k -GNN、谱方法与 WL 的关系、可区分性的代数视角（同构图的多项式不变量）

讲次	主题	内容概要
6	消息传递框架	MPNN (Gilmer et al. 2017) 统一框架形式化: 消息函数 M_t 、聚合 A_t 、更新 U_t 、读出 R 、等变性 (Equivariance) 与不变性 (Invariance) 的群论定义与证明、SE(3)/E(3)-等变 GNN: EGNN、DimeNet、SchNet、NequIP 的设计原理、深度图学习: 层深度与过平滑 (Dirichlet 能量下界定理)、DropEdge/PairNorm 等正则化手段的理论效果、异步消息传递与并行化
7	图生成模型	图生成的数学形式化 (置换等变、有效性约束)、GraphVAE (Simonovsky & Komodakis 2018): 图上 ELBO 推导与匹配损失、GraphRNN (You et al. 2018): 序列化图生成与条件概率分解、GDSS (扩散图生成, Jo et al. 2022): 图上前向 SDE 与逆向 SDE 推导、Flow Matching 在图生成中的应用、分子图生成 (JTVAE、REINVENT)、图生成质量评估: MMD、FID、图同构率、Validity/Uniqueness/Novelty
8	时序图网络	动态图的数学表示 (快照模型 vs. 时间事件流模型)、时序节点嵌入: JODIE、TGAT、TGN (完整公式推导)、时序图变换器 (GraphGPS 时序扩展)、连续时间动态图: Hawkes 过程与时序 GNN 的结合、时序图上的 WL 等价性: 时序 WL 测试与表达能力分析、应用: 金融风控、社交网络演化、交通流量预测 (STGCN/DCRNN)
9	异构图与知识图谱	异构图的形式化定义与元路径 (Meta-path)、关系图卷积网络 R-GCN (Schlichtkrull et al. 2018): 关系特定权重与正则化、HAN/HGT (异构图注意力与 Transformer)、知识图谱嵌入: TransE、DistMult、ComplEx、RotatE 的几何解释与损失函数推导、KGE 的表达能力: 关系模式 (对称/反对称/逆/复合) 的建模能力比较、GNN-based KG 推理: KGNN、CompGCN、RED-GNN、知识图谱补全评估: MRR、Hits@k

讲次	主题	内容概要
10	可扩展图学习	大规模 GNN 的瓶颈：邻域爆炸与内存开销分析 ($O(n^L)$ 复杂度)、GraphSAGE 邻域采样：有偏/无偏估计分析、方差上界定理、ClusterGCN (Chiang et al. 2019)：图划分损失误差分析、GraphSAINT (Zeng et al. 2020)：重要性采样与无偏估计证明、层采样 (LADIES、FastGCN)：每层独立采样的收敛性、分布式训练：图分割策略 (METIS)、量化/蒸馏：轻量化 GNN 的精度-效率权衡、工程实践：PyG vs. DGL 存储格式、边列表 vs. CSR 格式、mini-batch 图采样
11	GNN 与组合优化	组合优化的 GNN 求解框架：问题编码（节点/边特征设计）与解码（自回归/并行）、TSP：S2V-DQN、Attention Model (Kool et al. 2019)、POMO 的 GNN 架构分析、最大独立集 (MIS)：INTEL/GNN 近似比理论分析与 LP 松弛界、最小顶点覆盖 (MVC)：PI-GNN 与随机化近似、图着色：GNN 作为消息传递近似推断 (Belief Propagation 连接)、PAC 学习框架下 GNN 近似比的理论保证 (Khalil et al. 分析)、学习-搜索混合框架：ML+B&B、GNN+MCTS
12	前沿与展望	图 Transformer：Graphormer (Ying et al. 2021, 全对注意力 + 拉普拉斯位置编码)、GPS (General Powerful Scalable)、SAT (Structure-Aware Transformer)、图基础模型：预训练 GNN (Hu et al. 2020)、OFA (One-For-All)、LLM+GNN 混合架构：GraphGPT、G-Retriever、LLaGA、分子图：分子指纹、MPNN for QM9、SE(3)-Transformer 蛋白质结构预测、蛋白质：GVP-GNN、ESM-GNN、AlphaFold 中的 Evoformer (图结构分析)、材料科学：晶体图 GNN (CGCNN/MEGNet)、GNoME (谷歌材料发现)、开放问题与研究前沿

2 参考资料

1. Thomas N. Kipf, Max Welling. "Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks." *ICLR*, 2017.
2. Justin Gilmer, Samuel S. Schoenholz, Patrick F. Riley, Oriol Vinyals, George E. Dahl. "Neural Message Passing for Quantum Chemistry." *ICML*, 2017.
3. Keyulu Xu, Weihua Hu, Jure Leskovec, Stefanie Jegelka. "How Powerful are Graph Neural

- Networks?” *ICLR*, 2019.
4. William L. Hamilton, Zhitao Ying, Jure Leskovec. “Inductive Representation Learning on Large Graphs.” *NeurIPS*, 2017.
 5. Petar Veličković, Guillem Cucurull, Arantxa Casanova, Adriana Romero, Pietro Liò, Yoshua Bengio. “Graph Attention Networks.” *ICLR*, 2018.
 6. Michaël Defferrard, Xavier Bresson, Pierre Vandergheynst. “Convolutional Neural Networks on Graphs with Fast Localized Spectral Filtering.” *NeurIPS*, 2016.
 7. David K. Duvenaud et al. “Convolutional Networks on Graphs for Learning Molecular Fingerprints.” *NeurIPS*, 2015.
 8. Jure Leskovec, Christos Faloutsos. “Sampling from Large Graphs.” *KDD*, 2006.
 9. Jiaxuan You, Rex Ying, Xiang Ren, William L. Hamilton, Jure Leskovec. “GraphRNN: Generating Realistic Graphs with Deep Auto-regressive Models.” *ICML*, 2018.
 10. Hanqing Zeng, Hongkuan Zhou, Ajitesh Srivastava, Rajgopal Kannan, Viktor Prasanna. “GraphSAINT: Graph Sampling Based Inductive Learning Method.” *ICLR*, 2020.
 11. Wei-Lin Chiang, Xuanqing Liu, Si Si, Yang Li, Samy Bengio, Cho-Jui Hsieh. “Cluster-GCN: An Efficient Algorithm for Training Deep and Large Graph Convolutional Networks.” *KDD*, 2019.
 12. Michael Schlichtkrull, Thomas N. Kipf, Peter Bloem, Rianne van den Berg, Ivan Titov, Max Welling. “Modeling Relational Data with Graph Convolutional Networks.” *ESWC*, 2018.
 13. Weihua Hu, Matthias Fey, Marinka Zitnik, et al. “Open Graph Benchmark: Datasets for Machine Learning on Graphs.” *NeurIPS*, 2020.
 14. Vijay Prakash Dwivedi et al. “Benchmarking Graph Neural Networks.” *JMLR*, 2023.
 15. Chengxuan Ying, Tianle Cai, Shengjie Luo, et al. “Do Transformers Really Perform Bad for Graph Representation?” *NeurIPS*, 2021.
 16. Marc Brockschmidt. “GNN-FiLM: Graph Neural Networks with Feature-wise Linear Modulation.” *ICML*, 2020.
 17. Jinwoo Kim, Dat Nguyen, Seonwoo Min, et al. “Pure Transformers are Powerful Graph Learners.” *NeurIPS*, 2022.
 18. Srinivasan Balasubramanian, Renjie Liao, et al. “Graph Neural Networks with Learnable Structural and Positional Representations.” *ICLR*, 2021.