图卷积神经网络

author: riverspace@yeah.net

1. ~~信号~~ 信号的拉普拉斯算子

哈密顿算子: $\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$

拉普拉斯算子: $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \nabla^2$

∴ 拉普拉斯算子表示梯度变化量的汇总

2. 一维信号的拉普拉斯算子与傅里叶变换

函数 $g(t) = e^{-jwt}$ 的拉普拉斯~~算~~变换为:

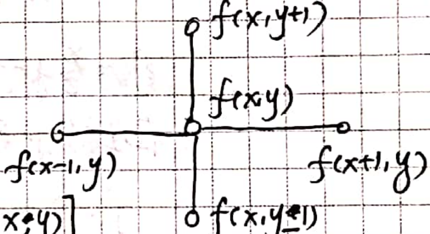
$$\Delta g(t) = \Delta(e^{-jwt}) = \frac{d\, g'(t)}{dt} = -jw\frac{d\,(e^{-jwt})}{dt} = -w^2(e^{-jwt})$$

∴ 函数 $g(t) = e^{-jwt}$ 是拉普拉斯算子的特征函数

∴ 函数 $f(t)$ 的傅里叶变换可视为一维拉普拉斯算子特征函数的展开:

$$F(w) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{-jwt} dt$$

3. 二维离散信号的拉普拉斯变换



$$\Delta f = div\, \nabla f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$$

$$= [f(x+1,y) - f(x,y)] + [f(x-1,y) - f(x,y)] + [f(x,y+1) - f(x,y)] + [f(x,y-1), f(x,y)]$$

4. 图的拉普拉斯变换

边无权重时: $\Delta f_i = \sum_{j\in N_i}(f_i - f_j)$

边有权重时:

$$\Delta f_i = \sum_{j\in N_i} W_{ij}(f_i - f_j)$$

$$= \sum_{j\in N_i} W_{ij} f_i - \sum_{j\in N_i} W_{ij} f_j$$

$$= d_i f_i - W_{i:} f$$

$$\therefore \Delta f = \begin{pmatrix} \Delta f_1 \\ \vdots \\ \Delta f_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 f_1 - W_{1:} f \\ \vdots \\ d_N f_N - W_{N:} f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_N \end{pmatrix} f - \begin{pmatrix} W_{1:} \\ \vdots \\ W_{N:} \end{pmatrix} f$$

$$= diag(d_i) f - W f$$

$$= D f - W f = \underbrace{L f}_{\text{拉普拉斯矩阵}} \quad \text{(定义)}$$

$$= (D - W) f$$

1

1、图的傅里叶变换

图的傅里叶变换定义为图在拉普拉斯矩阵特征向量上的谱特征展开，即

$$\hat{f}(\lambda) = \begin{array}{c} \text{特征向量} \\ \begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{n1} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \end{array} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} = U^T f$$

其中，矩阵U的列向量是拉普拉斯矩阵的特征向量，即

$$LU = U\Lambda$$

矩阵Λ是由拉普拉斯矩阵特征值组成的对角矩阵，即

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

2、图的傅里叶逆变换

$\because UU^T = I$

$\therefore$ 图的傅里叶逆变换 $f = UU^T f = U\hat{f}$

其中 $\hat{f}(\lambda) = U^T f$

3、图的卷积变换：

① 在坐标系变换中，傅里叶变换有

$$f(x) * g(x) = F^{-1}(F(f(x)*g(x)))$$

$$F(f(x)*g(x)) = F(f(x)) \cdot F(g(x))$$

② 在图变换中，傅里叶变换有

$$\cancel{x *_G y = F_G^{-1}(F_G(x*}$$

$$x *_G y = F_G^{-1}(F_G(x *_G y))$$

$$F_G(x *_G y) = \langle F_G(x), F_G(y) \rangle$$

③ 图上的卷积定义：

设 x 是定义在图 $G(E,V)$ 上的信号，g 是定义在图上的空间滤波器。则 x 与 g 的卷积：

$$y = x *_G g = U\left((U^T x) \odot (U^T g)\right)$$

其中，$\odot$ 表示哈达玛积。

∵ $U^T g$ 为未知参数，可将其参数化为 $U^T g = \theta$.

则 $y = x_G * g$

$$= U\left((U^T g) \odot (U^T x)\right)$$

$$= U g_\theta U^T x$$

$$= U \operatorname{diag}(\theta) U^T x$$

其中，记

$$g_\theta = \operatorname{diag}(U^T g) = \operatorname{diag}(\theta)$$

注：$\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \odot \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & & \\ & \ddots & \\ & & x_n \end{bmatrix} y$

进一步，将 g_θ 看成关于拉普拉斯矩阵 L 特征的函数，即 $g_\theta = g(\Lambda)$.

则 $y = x *_G g = U g_\theta(\Lambda) U^T x$ ……(*)

(*) 式计算复杂度较高，可用切比雪夫多项式近似计算。

设 λ_{max} 代表拉普拉斯矩阵的最大特征值，令

$$\tilde{\Lambda} = \frac{2\Lambda}{\lambda_{max}} - I_N$$ （此时 $\tilde{\Lambda}$ 的元值界于 $[-1,1]$ 间），

则 $g_\theta(\Lambda)$ 可近似为如下截断的 $K-1$ 阶切比雪夫多项式：

$$g_\theta(\Lambda) = \sum_{k=0}^{K-1} \theta_k T_k(\tilde{\Lambda})$$

③谱滤波的实现

- 切比雪夫序列：

具有度 $n \geq 0$ 的切比雪夫序列定义为

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)), \quad x \in [-1,1]$$

或表示为

$$T_n(x) = \cos(n\theta), \quad x = \cos\theta \in [-1,1]$$

∴切比雪夫序列可表示为如下递归形式：

$$T_n(x) = 2x T_{n-1}(x) - T_{n-2}(x)$$

其中，$T_0(x) = 1$，$T_1(x) = \cos(\theta) = x$

- 图卷积结果：

由式子 $g_\theta(\Lambda) = \sum_{k=0}^{K-1} \theta_k T_k(\tilde{\Lambda})$

可得图卷积的结果表示为：

$$\begin{aligned} y &= U g_\theta(\Lambda) U^T x \\ &= U \left(\sum_{k=0}^{K-1} \theta_k T_k(\tilde{\Lambda})\right) U^T x \\ &= \left(\sum_{k=0}^{K-1} \theta_k U T_k(\tilde{\Lambda}) U^T\right) x \\ &= \sum_{k=0}^{K-1} \theta_k T_k(\tilde{L}) x \end{aligned}$$

- 图卷积的快速计算方法：

设 $\tilde{x}_k = T_k(\tilde{L}) x$，则由关系式：

$$T_{k+1}(x) = 2x T_k(x) - T_{k-1}(x)$$

可得：$\tilde{x}_k = 2\tilde{L}\tilde{x}_{k-1} - \tilde{x}_{k-2}$

由此可得：$y = g_\theta(L) x = (\tilde{x}_0, \cdots, \tilde{x}_{K-1})\theta$

其中，$\theta = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ \vdots \\ \theta_{K-1} \end{pmatrix}$ 是由系数 θ_k 组成的向量。