

Interesting Topics in GNN

- 1、过平滑问题(Over-smoothness issue)
- 2、边信息有效利用 缺失边和节点的交互 仅仅对节点进行建模
- 3、Label-feature 从 label 的角度去建模 缺乏 label 信息融合及 label 到 feature 的预测。
- 4、一致性与多样性 consistency constraint and diversity encouragement
- 5、Discrete-continuous 的学习任务
- 6、残差信息的高效利用 (context 的高利用率 high utilization)
- 7、稀疏数据的多尺度、多任务协同学习
- 8、GCN: 无向聚合 空间平滑、邻接信息、时间过长 temporal & structural 邻居集合的构建 dynamically select neighborhoods
稀疏动态的异质图学习、条件引导的时空可靠学习
- 9、时空半监督学习 Semi-supervised spatiotemporal learning ambiguity active learning
- 10、核函数可以计算两个向量的距离 $K(x, x_2)$
- 11、Graph2Seq 空间信息序列化
- 12、动态传感器问题

GNN 网络方面的最新研究进展:

- 1 更加基础的研究: 表示能力/过平滑/传播机制/灾难性遗忘
- 2 更加复杂的图数据: 异质图/有向图/动态图
- 3 更加丰富的训练策略: 混合训练/数据扩增/对比训练
- 4 更加多样化的应用: 推荐/药物化学/物理系统/NLP/CV

1、更加基础的研究:

“传播是 GNN 的本质”。

灾难性遗忘指模型会忘记先前学习到的知识, 在 NN 中已经有了一些研究。TWP[3]研究了 GNN 上的遗忘问题并提出了一种拓扑感知的权重保留技术来克服上述问题。类似的 ER-GCN[4]利用经验回放机制来实现 GNN 在连续任务上的持续学习。

2、更加复杂的图数据

异质图 GraphMSE: 多种交互下邻居(结构)信息来提升节点表示。

HGSL[6]则探索了异质图结构对于节点表示的影响, 通过学习更加的准确的图结构来提升 GNN 的表现。

SDGNN[7]是一种针对有向符号图设计的图神经网络, 同时考虑了边的方向/符号(喜欢为正, 讨厌为负)和动态图演化的相关理论(status theory 和 balance theory)来更好的建模动态性并实现图的表示学习。

3、丰富的训练策略

GraphMix: Interpolation 数据扩增和 self-training 数据扩增

动态图、有向图和超图等

4、多样化的应用

链路预测: 推荐系统

药物化学: 图结构数据可以很好地建模分子及其之间的化学键。因此, AI 制药开始尝试利用 GNN 来实现药物分子的研发(如性质预测, 逆合成)。GTA[16]将 GNN 用于药物分子领域的逆合成预测问题, CAGG[17]则是从图生成的角度来实现药物分子的合成。

图像中引入图结构信息: 不同目标(建模为子图)之间的关系建模来实现更好的多类图像分类, 而 PC-RGNN[19]将点云数据建模为图, 利用图上不同尺度的关系聚合来强化其点云表示。部分内容取自公众号和北邮 GAMMA Lab。