

图基础模型

张竞文

2024/09/14



中国科学院 信息工程研究所
INSTITUTE OF INFORMATION ENGINEERING, CAS

目录

1

图基础模型VS语言基础模型

2

现有的图基础模型与关键设计

3

图基础模型的可迁移原则

目录

1

图基础模型VS语言基础模型

2

现有的图基础模型与关键设计

3

图基础模型的可迁移原则

图基础模型VS语言基础模型

什么是图基础模型？

基础模型是指在海量数据上进行预训练，有效地利用从预训练阶段获得的先验知识和数据，从而直接或者经过少量微调后从下游任务中获得更好的性能。

语言基础模型是指自然处理领域内的基础模型，得益于LLMs的发展，基础模型的概念首先在自然处理领域内成为现实。

图基础模型是图领域的一个新的研究方向，旨在开发基于广泛而多样的数据训练的图模型，以增强其在不同任务和领域中的适用性。

图基础模型VS语言基础模型

相似点

目标:

- 增强模型表达能力
- 提高模型泛化能力
- 创建通用模型来适应特定任务

学习范式:

- 遵循预训练-适应范式

针对图基础模型的prompt-tuning的研究还较少

图基础模型VS语言基础模型

内在差异

数据:

- 语言基础模型: 欧几里得数据

样本可以自然的被看作欧几里得空间中的一个点, 那么样本间距离可以直接求空间中两点之间的距离

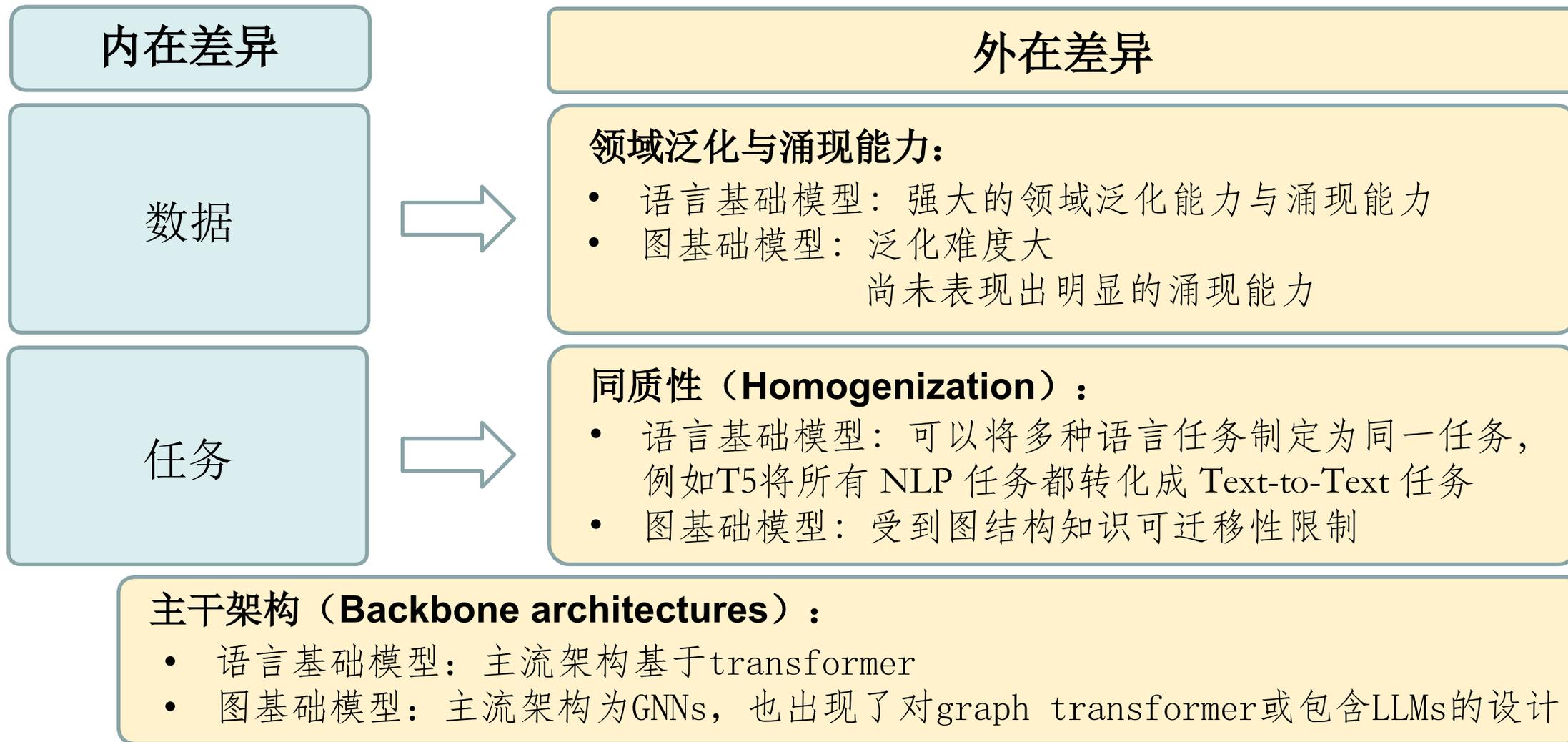
- 图基础模型: 非欧几里得数据 (图结构) 或两者的混合体 (图结构与属性)



任务:

- 语言基础模型: 多样的任务可以统一于语言建模
- 图基础模型: 任务形式多样, 节点分类、链路预测...

图基础模型VS语言基础模型



目录

1

图基础模型VS语言基础模型

2

现有的图基础模型与关键设计

3

图基础模型的可迁移原则

现有的图基础模型与关键设计

Table 2. A collection of existing GFMs.

	Name	Domain	Task
Primitive GFM	PRODIGY (HUANG ET AL., 2023A)	Text-attributed graph, Knowledge graph	Node classification, Knowledge graph reasoning
	ONEFORALL (LIU ET AL., 2023B)	Text-attributed graph, Knowledge graph, Molecule	Node classification, Knowledge graph reasoning, Graph classification
	LLAGA (CHEN ET AL., 2024B)	Text-attributed graph	Node classification, Link Prediction, Graph classification
Domain-specific GFM	DIG (ZHENG ET AL., 2023A)	Molecule	Molecular sampling, Property-guided structure generation.
	MACE-MP-0 (BATATIA ET AL., 2023)	Material Science	Property predictions of solids, liquids, gases, and chemical reactions.
	JMP-1 (SHOGHI ET AL., 2023)	Material Science	Atomic property prediction
	DPA-2 (ZHANG ET AL., 2023A)	Material Science	Molecular simulation
	MOLEBERT (XIA ET AL., 2023)	Molecule	Molecule property prediction
Task-specific GFM	ULTRA (GALKIN ET AL., 2023)	Knowledge graph	Knowledge graph reasoning
	ULTRAQUERY (GALKIN ET AL., 2024)	Knowledge graph	Knowledge graph reasoning
	TRIPLET-GMPNN (IBARZ ET AL., 2022)	General graph	algorithm reasoning
	G-RETRIEVER (HE ET AL., 2024)	General graph	Graph Question Answer
	GRAPHTOKEN (PEROZZI ET AL., 2024)	General graph	Graph Question Answer

现有的图基础模型与关键设计

Table 2. A collection of existing GFM.

	Name	Domain	Task
Primitive GFM	PRODIGY (HUANG ET AL., 2023A)	Text-attributed graph, Knowledge graph	Node classification, Knowledge graph reasoning
	ONEFORALL (LIU ET AL., 2023B)	Text-attributed graph, Knowledge graph, Molecule	Node classification, Knowledge graph reasoning, Graph classification
	LLAGA (CHEN ET AL., 2024B)	Text-attributed graph	Node classification, Link Prediction, Graph classification
Domain-specific GFM	DIG (ZHENG ET AL., 2023A)	Molecule	Molecular sampling, Property-guided structure generation.
	MACE-MP-0 (BATATIA ET AL., 2023)	Material Science	Property predictions of solids, liquids, gases, and chemical reactions.
	JMP-1 (SHOGHI ET AL., 2023)	Material Science	Atomic property prediction
	DPA-2 (ZHANG ET AL., 2023A)	Material Science	Molecular simulation
	MOLEBERT (XIA ET AL., 2023)	Molecule	Molecule property prediction
Task-specific GFM	ULTRA (GALKIN ET AL., 2023)	Knowledge graph	Knowledge graph reasoning
	ULTRAQUERY (GALKIN ET AL., 2024)	Knowledge graph	Knowledge graph reasoning
	TRIPLET-GMPNN (IBARZ ET AL., 2022)	General graph	algorithm reasoning
	G-RETRIEVER (HE ET AL., 2024)	General graph	Graph Question Answer
	GRAPHTOKEN (PEROZZI ET AL., 2024)	General graph	Graph Question Answer

对节点级、边级和图级的任务进行统一

现有的图基础模型与关键设计

Table 2. A collection of existing GFMs.

	Name	Domain	Task	
Primitive GFM	PRODIGY (HUANG ET AL., 2023A)	Text-attributed graph, Knowledge graph	Node classification, Knowledge graph reasoning Node classification, Knowledge graph reasoning, Graph classification Node classification, Link Prediction, Graph classification	对节点级、边级和图级的任务进行统一
	ONEFORALL (LIU ET AL., 2023B)	Text-attributed graph, Knowledge graph, Molecule		
	LLAGA (CHEN ET AL., 2024B)	Text-attributed graph		
Domain-specific GFM	DIG (ZHENG ET AL., 2023A)	Molecule	Molecular sampling, Property-guided structure generation. Property predictions of solids, liquids, gases, and chemical reactions. Atomic property prediction Molecular simulation Molecule property prediction	在领域内进行迁移
	MACE-MP-0 (BATATIA ET AL., 2023)	Material Science		
	JMP-1 (SHOGHI ET AL., 2023)	Material Science		
	DPA-2 (ZHANG ET AL., 2023A)	Material Science		
	MOLEBERT (XIA ET AL., 2023)	Molecule		
Task-specific GFM	ULTRA (GALKIN ET AL., 2023)	Knowledge graph	Knowledge graph reasoning	
	ULTRAQUERY (GALKIN ET AL., 2024)	Knowledge graph	Knowledge graph reasoning	
	TRIPLET-GMPNN (IBARZ ET AL., 2022)	General graph	algorithm reasoning	
	G-RETRIEVER (HE ET AL., 2024)	General graph	Graph Question Answer	
	GRAPHTOKEN (PEROZZI ET AL., 2024)	General graph	Graph Question Answer	

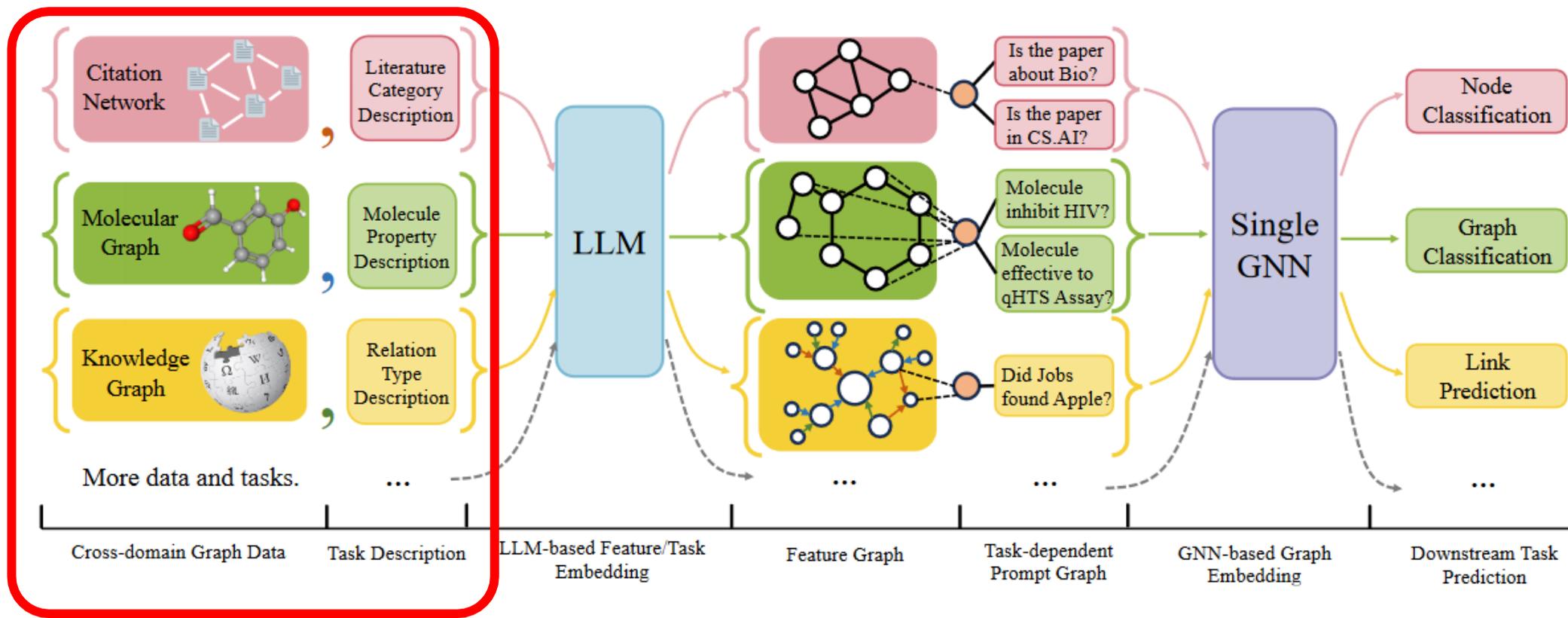
现有的图基础模型与关键设计

Table 2. A collection of existing GFM.

	Name	Domain	Task	
Primitive GFM	PRODIGY (HUANG ET AL., 2023A)	Text-attributed graph, Knowledge graph	Node classification, Knowledge graph reasoning Node classification, Knowledge graph reasoning, Graph classification Node classification, Link Prediction, Graph classification	对节点级、边级和图级的任务进行统一
	ONEFORALL (LIU ET AL., 2023B)	Text-attributed graph, Knowledge graph, Molecule		
	LLAGA (CHEN ET AL., 2024B)	Text-attributed graph		
Domain-specific GFM	DIG (ZHENG ET AL., 2023A)	Molecule	Molecular sampling, Property-guided structure generation. Property predictions of solids, liquids, gases, and chemical reactions. Atomic property prediction Molecular simulation Molecule property prediction	在领域内进行迁移
	MACE-MP-0 (BATATIA ET AL., 2023)	Material Science		
	JMP-1 (SHOGHI ET AL., 2023)	Material Science		
	DPA-2 (ZHANG ET AL., 2023A)	Material Science		
	MOLEBERT (XIA ET AL., 2023)	Molecule		
Task-specific GFM	ULTRA (GALKIN ET AL., 2023)	Knowledge graph	Knowledge graph reasoning Knowledge graph reasoning algorithm reasoning Graph Question Answer Graph Question Answer	在特定的任务之间进行迁移
	ULTRAQUERY (GALKIN ET AL., 2024)	Knowledge graph		
	TRIPLET-GMPNN (IBARZ ET AL., 2022)	General graph		
	G-RETRIEVER (HE ET AL., 2024)	General graph		
	GRAPHTOKEN (PEROZZI ET AL., 2024)	General graph		

现有的图基础模型与关键设计

初始图基础模型（Primitive GFM） - OFA



现有的图基础模型与关键设计

初始图基础模型 (Primitive GFM) - OFA

Text feature of nodes: Feature node. $\langle \text{feature description} \rangle$: $\langle \text{feature content} \rangle$; $\langle \text{feature description} \rangle$: $\langle \text{feature content} \rangle$; ...

Example: Feature node. Atom: Carbon, Atomic number 6, helix chirality, is not in a ring, ...

Example: Feature node. Paper title and abstract: Attention is all you need. The dominant sequence transduction models are ...

Text feature of edges: Feature edge. $\langle \text{feature description} \rangle$: $\langle \text{feature content} \rangle$; $\langle \text{feature description} \rangle$: $\langle \text{feature content} \rangle$; ...

Example: Feature edge. Chemical Bond: ionic bonding, is conjugated, ...

Example: Feature edge. Citation from one paper to another.

Text feature of the NOI prompt node: Prompt node. $\langle \text{task description} \rangle$.

Example: Prompt node. Graph classification on molecule properties.

Example: Prompt node. Node classification on the literature category of the paper.

现有的图基础模型与关键设计

初始图基础模型（Primitive GFM） - OFA

实现了良好的迁移性的原因：

1. 将来自不同领域的图数据转化为统一的文本属性图，将不同的任务转化为统一的提示节点，从所有领域中共同学习
2. 任何节点/边/任务都可以用对应的标准化格式描述

Cross-domain Graph Data

Task Description

Embedding

Feature Graph

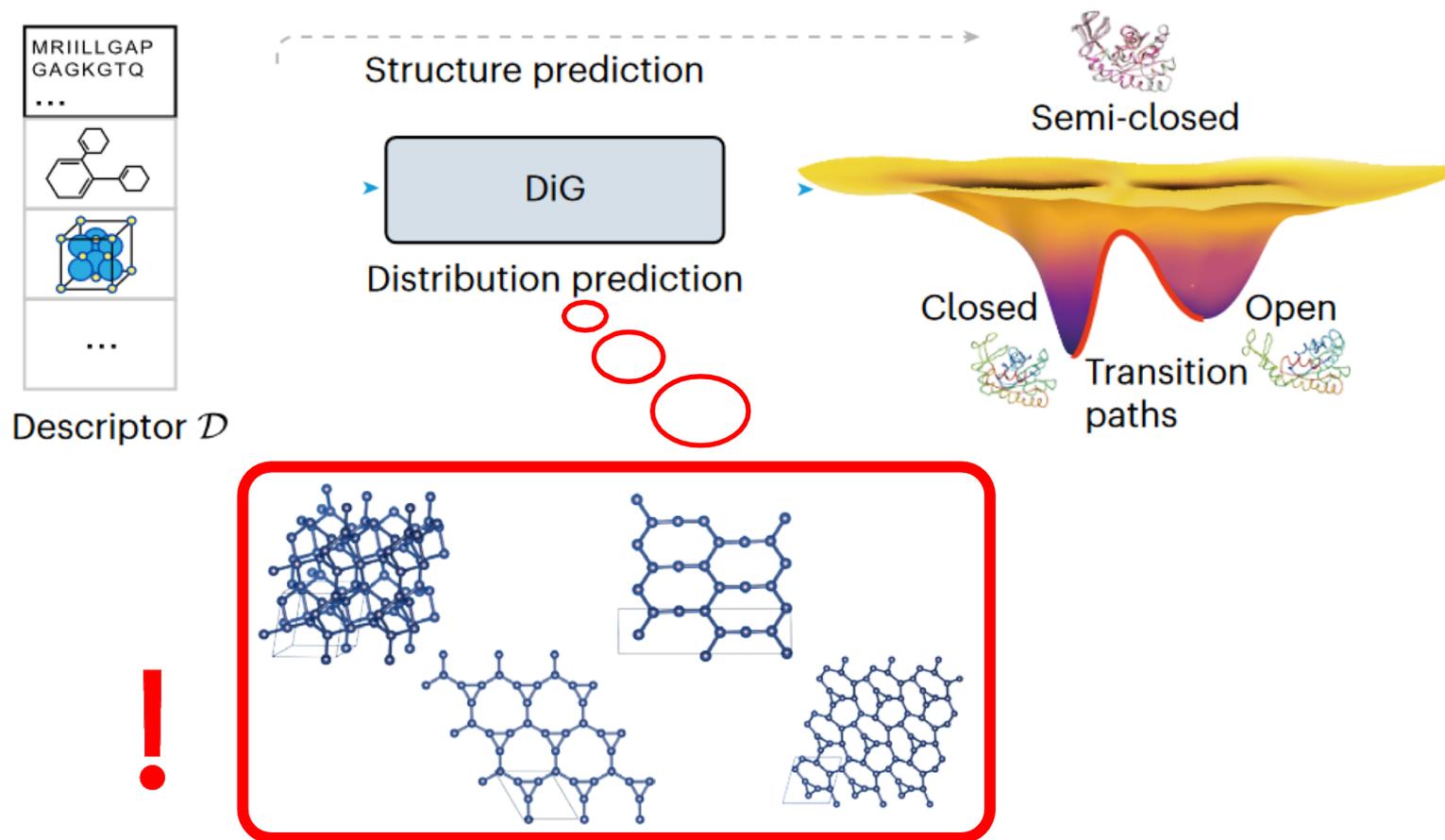
Task-dependent
Prompt Graph

GNN-based Graph
Embedding

Downstream Task
Prediction

现有的图基础模型与关键设计

领域特定型图基础模型 (Domain-specific GFMs) - DiG

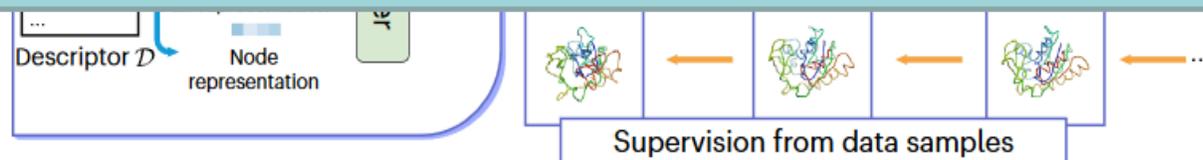


现有的图基础模型与关键设计

领域特定型图基础模型 (Domain-specific GFMs) - DiG

实现了良好的迁移性的原因:

1. 将不同的图 (分子结构) 映射到同样的表示空间 (分子为节点, 相互作用为边) 进行稳定状态下的概率预测, 有唯一表示
2. 词汇表具有包容性, 能理解不同分子结构的描述符



现有的图基础模型与关键设计

任务特定型图基础模型（task-specific GFM） - ULTRA

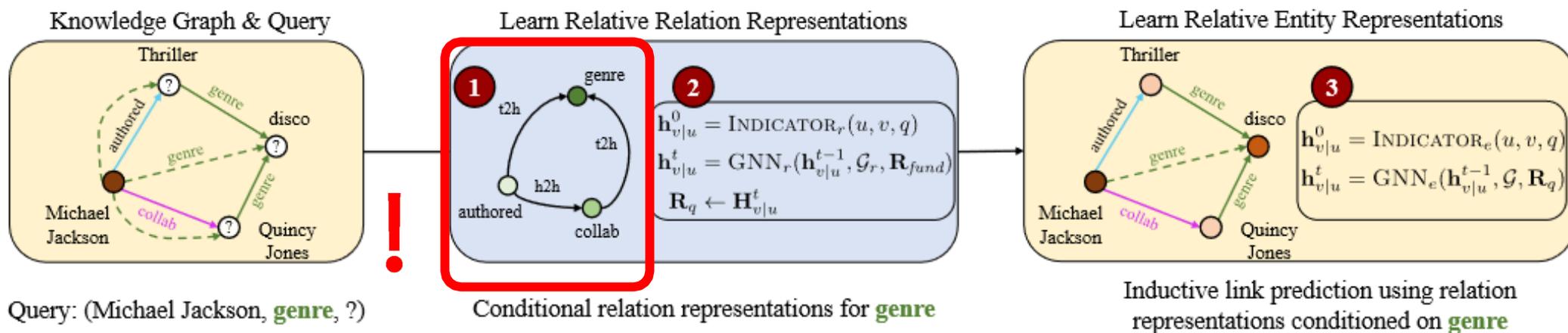


Figure 3: Given a query $(h, q, ?)$ on graph \mathcal{G} , ULTRA (1) builds a graph of relations \mathcal{G}_r with four interactions \mathcal{R}_{fund} (Sec. 4.1); (2) builds relation representations \mathbf{R}_q conditioned on the query relation q and \mathcal{G}_r (Sec. 4.2); (3) runs any inductive link predictor on \mathcal{G} using representations \mathbf{R}_q (Sec. 4.3).

现有的图基础模型与关键设计

任务特定型图基础模型 (task-specific GFM) - ULTRA

实现了良好的迁移性的原因:

1. 提出关系相互作用的四种表示, 每一种的定义都严格且唯一
2. 所提出的四种表示具有包容性, 能将新的、未知的关系映射到现有的词汇上

现有的图基础模型与关键设计

总结

实现了良好的迁移性的原因：

1. 可以将不同结构的图转换为同样的表示
2. 表示需要具有包容性，能将新的、未知的关系映射到现有的表示上

目录

1

图基础模型VS语言基础模型

2

现有的图基础模型与关键设计

3

图基础模型的可迁移原则

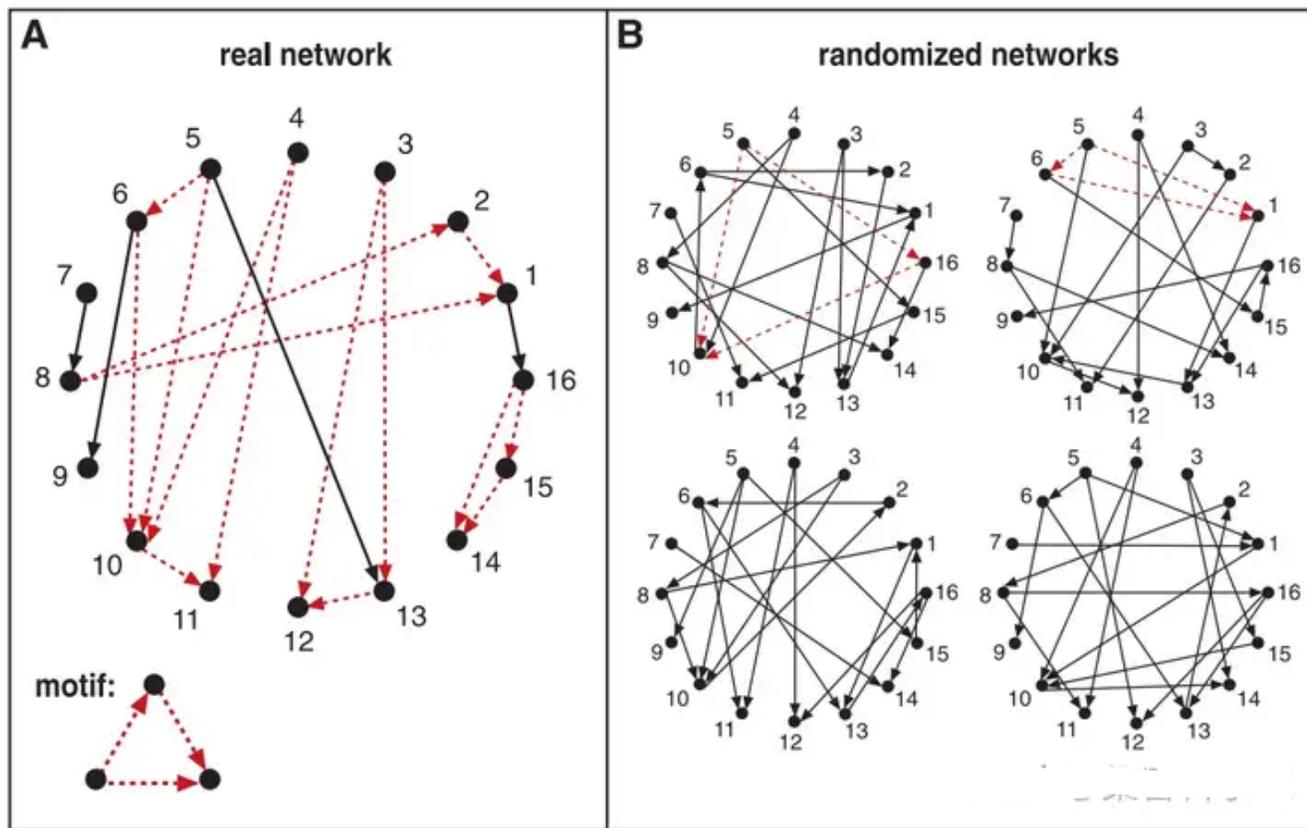
图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 网络分析

通过识别基本的图模式并建立关键的原则，提供对网络系统的常规理解，这些原则在不同的领域中通常是有效的。

网络模体（Network motif）：

在复杂网络中发现的某种相互连接的子图个数显著高于随机网络。



图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 网络分析

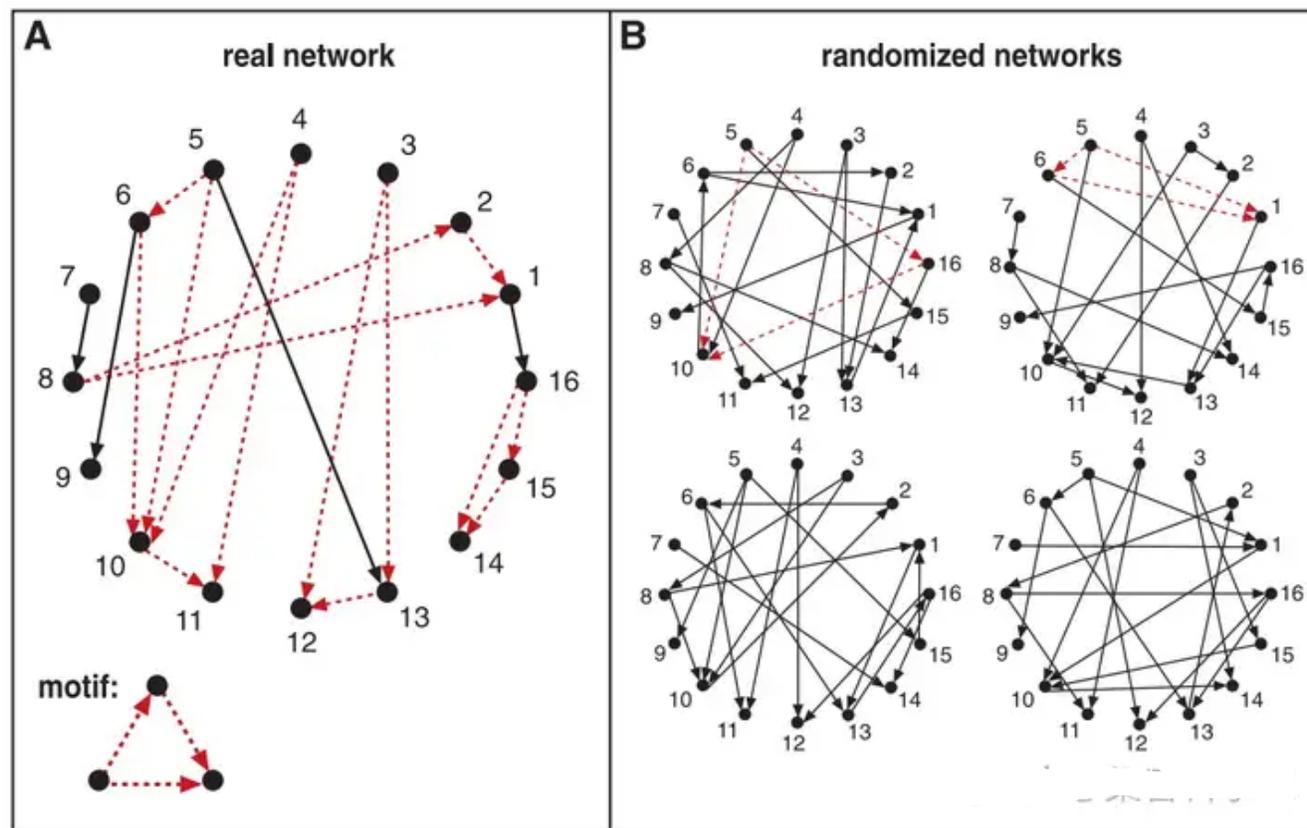
通过识别基本的图模式并建立关键的原则，提供对网络系统的常规理解，这些原则在不同的领域中通常是有效的。

网络模体 (Network motif) :

在复杂网络中发现的某种相互连接的子图个数显著高于随机网络。

图分类:

网络模体可能是用于图分类的词汇的基本单位，当不同的数据集之间存在**相同的模体**时，就可能发生正迁移。



图基础模型的可迁移性原则

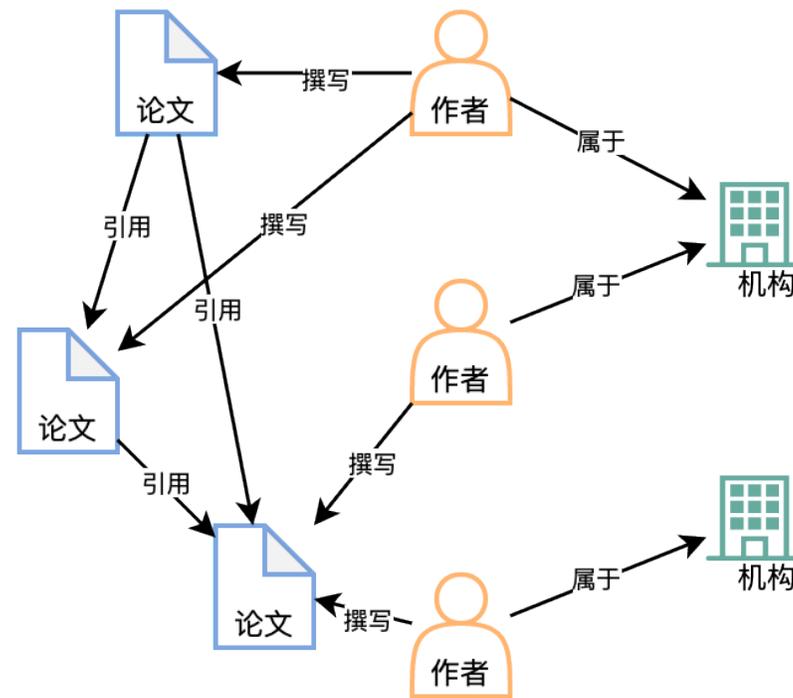
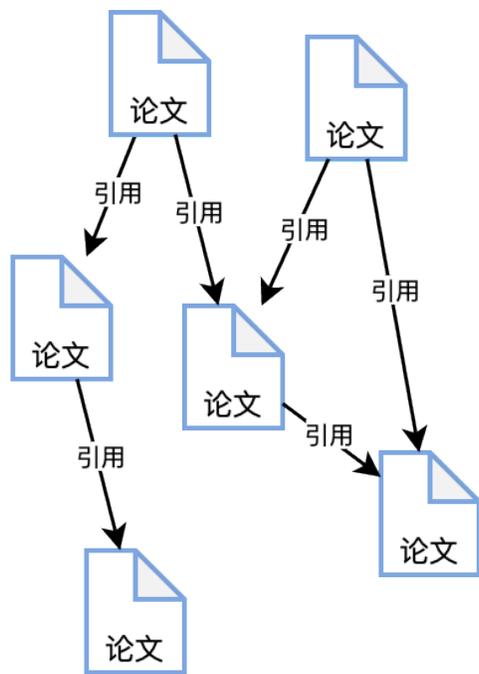
可迁移性原则- 网络分析

通过识别基本的图模式并建立关键的原则，提供对网络系统的常规理解，这些原则在不同的领域中通常是有效的。

节点分类:

现有的GNN架构通常基于同质性原则构建，促进了模型在**同质图**数据集之间的可迁移性

! 在处理**异质图**时面临着重大挑战。



图基础模型的可迁移性原则

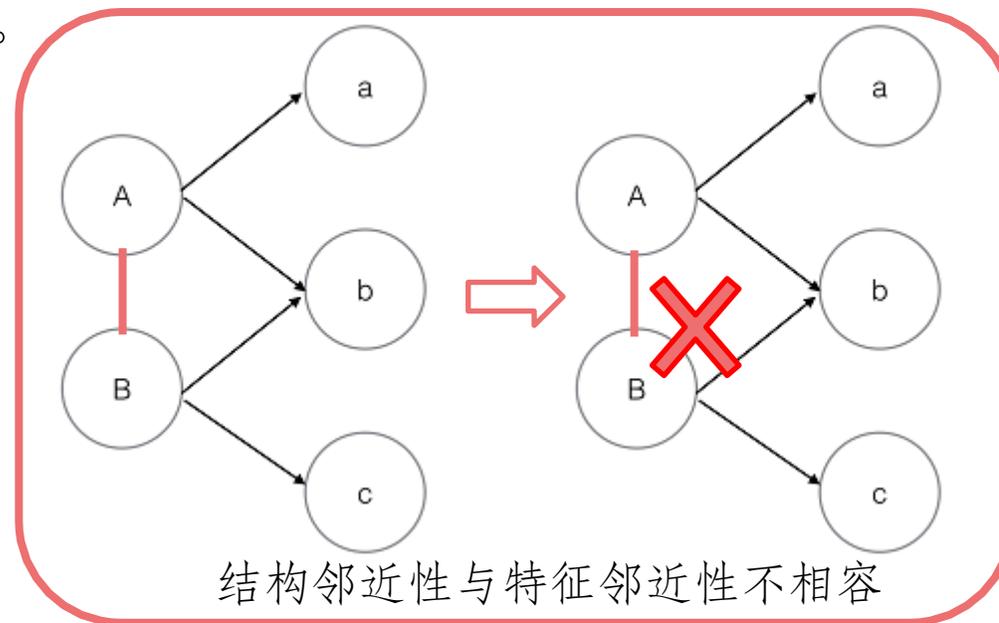
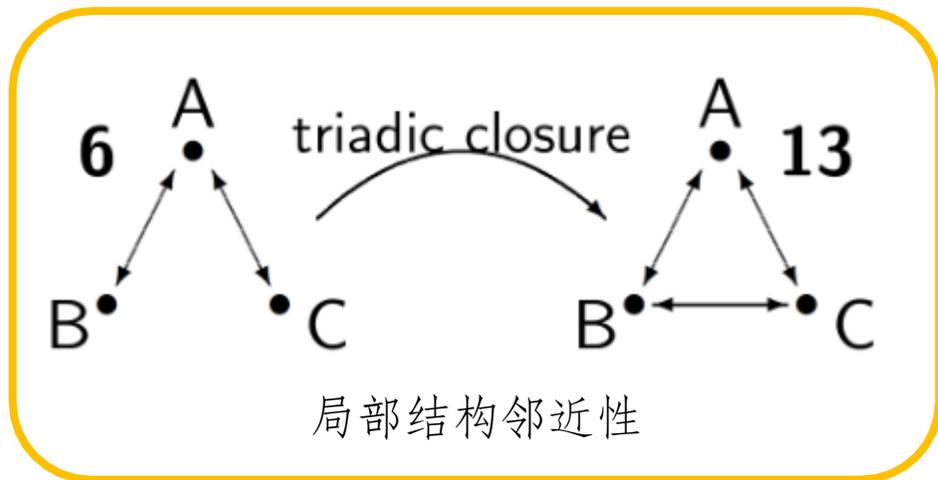
可迁移性原则- 网络分析

通过识别基本的图模式并建立关键的原则，提供对网络系统的常规理解，这些原则在不同的领域中通常是有效的。

链接预测：

局部结构邻近性、全局结构邻近性、特征邻近性。

! 结构邻近性与特征邻近性**不相容**。



图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则-表达能力

最具表达力的结构表示应该是不变的当且仅当两个节点集是对称的且具有置换等变性。这种表示是在多元预测任务中设计合适的图词汇以完美区分所有非同构结构模式的重要原则。

置换等变性VS置换不变性:

记 π 为节点的一个置换, f, g 为定义在节点特征 H 的映射, 称 f 为置换不变的, 如果

$$f \circ \pi(H) = f(H)$$

称 g 是置换等变的, 如果

$$g \circ \pi(H) = \pi \circ g(H)$$

置换不变性使得输出与输入顺序无关, 而置换等变性使得输出顺序与输入顺序对应。

因为图天然具有无序性, 当我们关心节点特征时, 我们希望改变节点标号时, 节点特征不变, 或者说节点特征的排序要根据节点编号做出重排, 这时候就需要置换等变性; 当我们关心图特征时, 希望改变节点标号不影响图特征, 就需要置换不变性。

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则-表达能力

最具表达力的结构表示应该是不变的当且仅当两个节点集是对称的且具有置换等变性。这种表示是在多元预测任务中设计合适的图词汇以完美区分所有非同构结构模式的重要原则。

链路预测：

⚠️ 并不是具有置换等变性就能正迁移

还需区分目标节点，使源节点和目标节点与其他节点相比具有不同的标签；



使得找到一组完全不同的表示来区分所有非同构的节点对，从而缓解标准GNN中负迁移的风险。

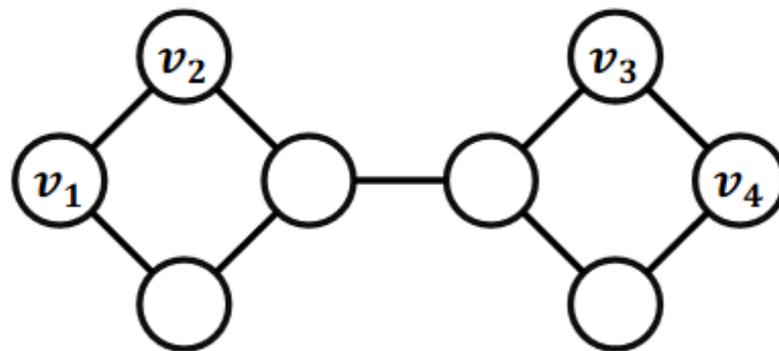


Figure 1. In this graph, nodes v_1 and v_4 are isomorphic; links (v_1, v_2) and (v_2, v_4) are not isomorphic. However, vanilla GNN with the same node representations v_1 and v_4 gives the same prediction to links (v_1, v_2) and (v_2, v_4) .

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则-表达能力

最具表达力的结构表示应该是不变的当且仅当两个节点集是对称的且具有置换等变性。这种表示是在多元预测任务中设计合适的图词汇以完美区分所有非同构结构模式的重要原则。

图分类:

表达能力更强的GNN可以检测到更多样的模体，构建更全面的图词汇。

Table 1: Experimental results on homomorphism counting. Red/blue nodes indicate marked vertices.

Model \ Task	Graph-level			Node-level		Edge-level		
								
MPNN	.300	.233	.254	.505	.478	-	-	-
Subgraph GNN	.011	.015	.012	.004	.058	.003	.058	.048
Local 2-GNN	.008	.008	.010	.003	.004	.005	.006	.008
Local 2-FGNN	.003	.005	.004	.005	.005	.007	.007	.008

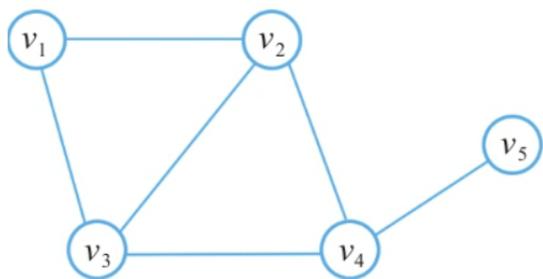
图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

怎样直观地表示图的稳定性？如果可以想办法画出图信号的图像，就可以直观的看出稳定性。



图G

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

拉普拉斯矩阵

实对称矩阵的正交
对角化公式

$$L = V \Lambda V^T = \begin{bmatrix} \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ v_1 & v_2 & \dots & v_N \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dots & v_1 & \dots \\ \dots & v_2 & \dots \\ \dots & \vdots & \dots \\ \dots & v_N & \dots \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} -0.447 & 0.438 & -0.703 & 0 & 0.338 \\ -0.447 & 0.256 & 0.242 & 0.707 & -0.419 \\ -0.447 & 0.256 & 0.242 & -0.707 & -0.419 \\ -0.447 & -0.138 & 0.536 & 0 & 0.702 \\ -0.447 & -0.811 & -0.318 & 0 & -0.202 \end{bmatrix}$$
$$\Lambda = \text{diag}([0 \quad 0.8299 \quad 2.689 \quad 4 \quad 4.481])$$

特征矩阵与特征值

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

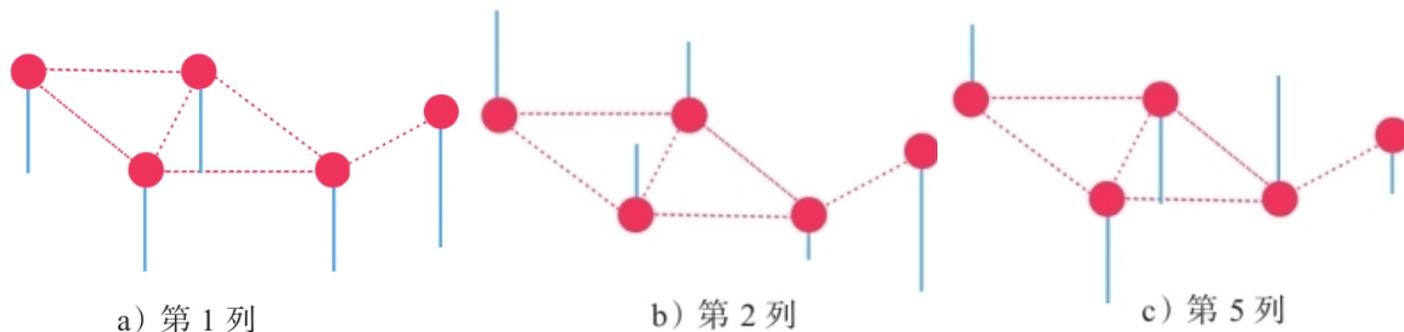
评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

怎样直观地表示图的稳定性？如果可以想办法画出图信号的图像，就可以直观的看出稳定性。

$$V = \begin{bmatrix} -0.447 & 0.438 & -0.703 & 0 & 0.338 \\ -0.447 & 0.256 & 0.242 & 0.707 & -0.419 \\ -0.447 & 0.256 & 0.242 & -0.707 & -0.419 \\ -0.447 & -0.138 & 0.536 & 0 & 0.702 \\ -0.447 & -0.811 & -0.318 & 0 & -0.202 \end{bmatrix}$$

$$\Lambda = \text{diag}([0 \quad 0.8299 \quad 2.689 \quad 4 \quad 4.481])$$



将特征向量作为图信号

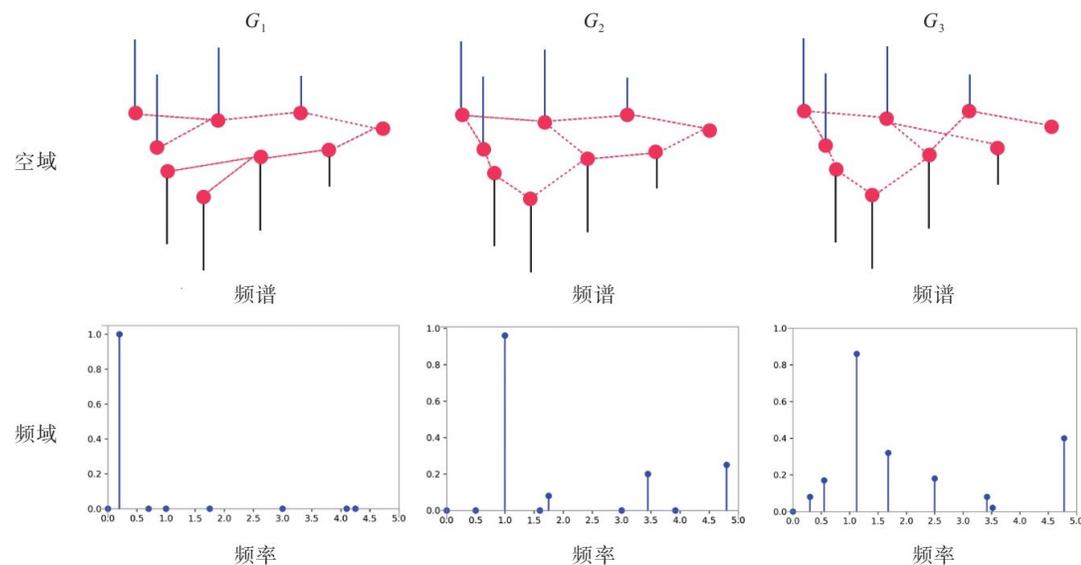
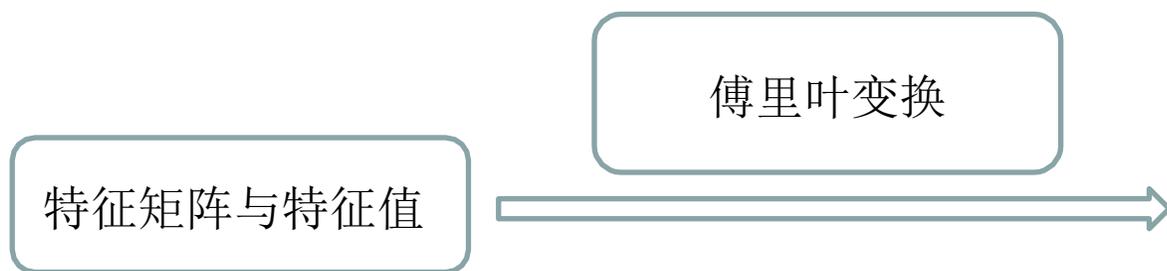
图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

怎样直观地表示图的稳定性？如果可以想办法画出图信号的图像，就可以直观的看出稳定性。



图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

怎样准确的表示图的稳定性？这种稳定性如果写成数学表达式，则可以表示为：

$$\|f(G_1) - f(G_2)\|_2 \leq C_\lambda(1 + \tau\sqrt{N_G})\|A_1 - P^*A_2P^{*T}\|_F + \mathcal{O}(\|A_1 - P^*A_2P^{*T}\|_F^2)$$

+ $\max\{|S(\Lambda_2)|\}\|X_1 - P^*X_2\|_F$,

修正高阶误差

通过邻接矩阵的 Frobenius 范数量边扰动

如果光谱平滑性不好，即 Lipschitz 常数较大，那么即使有边扰动很小，对整个图信号的影响也会被放大

f是图特征提取器

G_1 、 G_2 是节点为 N_G 的两个图

A_1 、 A_2 是图对应的邻接矩阵

Λ_1 、 Λ_2 是图对应的特征值

C_λ 光谱 Lipschitz 常数

$\max\{|S(\Lambda_2)|\}$:最大频率响应

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

怎样准确的表示图的稳定性？这种稳定性如果写成数学表达式，则可以表示为：

$$\|f(G_1) - f(G_2)\|_2 \leq C_\lambda(1 + \tau\sqrt{N_G})\|A_1 - P^*A_2P^{*T}\|_F + \mathcal{O}(\|A_1 - P^*A_2P^{*T}\|_F^2)$$

$$+ \max\{|\mathcal{S}(\Lambda_2)|\}\|X_1 - P^*X_2\|_F,$$

如果频率响应较大，节点特征的微小变化将在图谱下被放大

通过节点特征矩阵反应节点特征扰动带来的影响

f是图特征提取器

G_1 、 G_2 是节点为 N_G 的两个图

A_1 、 A_2 是图对应的拉普拉斯矩阵

Λ_1 、 Λ_2 是图对应的特征值

C_λ 光谱 Lipschitz 常数

$\max\{|\mathcal{S}(\Lambda_2)|\}$:最大频率响应

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

怎样准确的表示图的稳定性？这种稳定性如果写成数学表达式，则可以表示为：

$$\|f(G_1) - f(G_2)\|_2 \leq C_\lambda(1 + \tau\sqrt{N_G})\|A_1 - P^*A_2P^{*T}\|_F + \mathcal{O}(\|A_1 - P^*A_2P^{*T}\|_F^2) \\ + \max\{|S(\Lambda_2)|\}\|X_1 - P^*X_2\|_F,$$

最大频率响应与节点特征扰动相关

光谱平滑性与边扰动相关

f 是图特征提取器

G_1 、 G_2 是节点为 N_G 的两个图

A_1 、 A_2 是图对应的拉普拉斯矩阵

Λ_1 、 Λ_2 是图对应的特征值

C_λ 光谱 Lipschitz 常数

$\max\{|S(\Lambda_2)|\}$:最大频率响应

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

可以使用具有**较强的频谱平滑性**和**较小的最大频率**响应的图滤波器来实现更强的稳定性。

是否稳定性更好的模型在节点特征和结构方面表现出更强的可迁移性?

Table 2: Unsupervised transfer of cross-species protein-protein physical interaction prediction.

Methods	Physical: Node transfer \Rightarrow SSReg				Mean \uparrow	Rank \downarrow
	Mouse	Zebrafish	Fruit fly	Yeast		
Mashup	51.54 \pm 3.82 (5.58 \pm 0.35)	37.82 \pm 3.43 (3.98 \pm 0.12)	46.88 \pm 6.87 (7.19 \pm 3.93)	57.99 \pm 2.28 (6.78 \pm 0.92)	48.55 (5.88)	9.0
D-SCRIPT	58.22 \pm 6.97 (7.03 \pm 1.09)	49.58 \pm 1.12 (5.02 \pm 0.76)	62.97 \pm 0.78 (9.61 \pm 0.21)	62.43 \pm 0.59 (8.56 \pm 0.15)	58.30 (7.55)	8.0
GraphCL	76.88 \pm 0.42 (31.16 \pm 1.43)	79.11 \pm 1.14 (41.80 \pm 3.20)	81.02 \pm 0.98 (38.63 \pm 2.30)	71.03 \pm 0.30 (14.58 \pm 1.16)	77.01 (31.54)	6.0
Transformer	77.65 \pm 0.84 (35.05 \pm 0.92)	75.61 \pm 1.86 (45.13 \pm 3.15)	76.90 \pm 1.64 (32.72 \pm 2.34)	67.86 \pm 0.61 (12.46 \pm 1.08)	74.50 (31.34)	5.6
Transformer +GIN	79.77 \pm 0.92 (31.23 \pm 1.94)	80.85 \pm 2.41 (34.29 \pm 12.42)	82.38 \pm 1.13 (42.40 \pm 2.04)	71.54 \pm 0.36 (15.73 \pm 0.79)	78.63 (30.91)	4.3
Transformer +GIN+DA-C	80.14 \pm 1.86 (34.29 \pm 4.12)	83.58 \pm 1.15 (44.01 \pm 4.00)	81.49 \pm 1.27 (38.94 \pm 2.36)	71.30 \pm 0.61 (16.80 \pm 0.65)	79.12 (33.51)	3.3
Transformer +GIN+DA-W	80.18 \pm 1.38 (34.14 \pm 0.85)	80.88 \pm 3.08 (41.88 \pm 2.15)	81.51 \pm 0.36 (42.02 \pm 0.69)	72.66 \pm 0.36 (16.18 \pm 2.67)	78.80 (33.55)	3.6
Transformer+GIN +DA-W+SSReg	81.20 \pm 0.25 (35.99 \pm 1.51)	81.69 \pm 1.55 (45.15 \pm 2.07)	81.79 \pm 0.74 (43.44 \pm 1.16)	73.07 \pm 0.30 (17.39 \pm 1.01)	79.43 (35.49)	1.3
Transformer+GIN +DA-W+MFRReg	80.93 \pm 1.11 (34.63 \pm 3.71)	81.95 \pm 1.77 (43.09 \pm 4.19)	80.15 \pm 1.07 (35.43 \pm 1.60)	72.22 \pm 0.67 (16.40 \pm 1.12)	78.81 (32.38)	3.6

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

节点分类:

可以使用具有**较强的频谱平滑性**

和**较大的最大频率响应**的图神经网络。

是否**稳定性更好的模型的可迁移性更好**？
表征和可迁移性？

Table 2: Unsupervised transfer of cross-species protein-protein physical interaction prediction.

Methods	Physical: Node transfer \Rightarrow SSReg				Mean \uparrow	Rank \downarrow
	Mouse	Zebrafish	Fruit fly	Yeast		
Mashup	51.54 \pm 3.82 (5.58 \pm 0.35)	37.82 \pm 3.43 (3.08 \pm 0.13)	46.88 \pm 6.87 (7.10 \pm 2.03)	57.99 \pm 2.28 (6.78 \pm 0.03)	48.55 (5.88)	9.0
+GIN+DA-C	(54.29 \pm 4.12)	(44.01 \pm 4.00)	(58.94 \pm 2.30)	(16.80 \pm 0.63)	(55.51)	8.0
Transformer	80.18 \pm 1.38	80.88 \pm 3.08	81.51 \pm 0.36	72.66 \pm 0.36	78.80	6.0
+GIN+DA-W	(34.14 \pm 0.85)	(41.88 \pm 2.15)	(42.02 \pm 0.69)	(16.18 \pm 2.67)	(33.55)	5.6
Transformer+GIN	81.20 \pm 0.25	81.69 \pm 1.55	81.79 \pm 0.74	73.07 \pm 0.30	79.43	4.3
+DA-W+SSReg	(35.99 \pm 1.51)	(45.15 \pm 2.07)	(43.44 \pm 1.16)	(17.39 \pm 1.01)	(35.49)	3.3
Transformer+GIN	80.93 \pm 1.11	81.95 \pm 1.77	80.15 \pm 1.07	72.22 \pm 0.67	78.81	3.6
+DA-W+MFRReg	(34.63 \pm 3.71)	(43.09 \pm 4.19)	(35.43 \pm 1.60)	(16.40 \pm 1.12)	(32.38)	3.6

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则- 稳定性

评估表征对图扰动的敏感性。它的目的是在微小扰动下保持对预测的有界间隙，而不是仅区分同构和非同构情况的表达能力。

链路预测/图分类:

稳定位置编码可以增强泛化能力。

满足置换等变性

你喜欢我

我喜欢你

Table 1: Performance on the traditional link prediction tasks, measured in ROC AUC (mean±std%).

Method	Feature	Cora	Citeseer	Pubmed	Twitch-RU	Twitch-PT	Chameleon
VGAE	N.	89.89 ± 0.06	90.11 ± 0.08	94.62 ± 0.02	83.13 ± 0.07	82.89 ± 0.08	97.98 ± 0.01
	C.	55.68 ± 0.05	61.45 ± 0.36	69.03 ± 0.03	85.37 ± 0.02	85.69 ± 0.09	83.13 ± 0.04
	O.	83.97 ± 0.05	77.22 ± 0.04	82.54 ± 0.04	84.76 ± 0.09	87.91 ± 0.05	97.67 ± 0.04
	P.	83.82 ± 0.12	78.68 ± 0.25	81.74 ± 0.15	85.06 ± 0.14	85.06 ± 0.14	97.91 ± 0.03
	R.	68.43 ± 0.42	71.21 ± 0.78	69.31 ± 0.23	68.42 ± 0.43	68.49 ± 0.73	73.44 ± 0.53
	N. + P.	87.96 ± 0.29	80.04 ± 0.60	85.26 ± 0.17	84.59 ± 0.37	88.27 ± 0.19	98.01 ± 0.12
PGNN	N. + P.	86.92 ± 0.02	90.26 ± 0.02	88.12 ± 0.06	83.21 ± 0.00	82.37 ± 0.02	94.25 ± 0.01
GNN-Trans.	N. + P.	79.31 ± 0.09	77.49 ± 0.02	81.23 ± 0.12	79.24 ± 0.33	75.44 ± 0.14	86.23 ± 0.12
SEAL	N. + D.	91.32 ± 0.01	89.49 ± 0.43	97.16 ± 0.28	92.12 ± 0.10	93.21 ± 0.06†	99.31 ± 0.18†
LE	P.	84.43 ± 0.02	78.36 ± 0.08	84.35 ± 0.04	78.80 ± 0.10	67.56 ± 0.02	88.47 ± 0.03
DW	P.	86.82 ± 0.18	87.93 ± 0.11	85.79 ± 0.06	83.10 ± 0.05	83.47 ± 0.03	92.15 ± 0.02
PEG-DW	N. + P.	89.51 ± 0.08	91.67 ± 0.12	87.68 ± 0.29	90.21 ± 0.04	89.67 ± 0.03	98.33 ± 0.01
PEG-DW	C. + P.	88.36 ± 0.10	88.48 ± 0.10	88.80 ± 0.11	90.32 ± 0.09	90.88 ± 0.05	97.30 ± 0.03
PEG-LE	N. + P.	94.20 ± 0.04†	92.53 ± 0.09	87.70 ± 0.31	92.14 ± 0.05	92.28 ± 0.02	98.78 ± 0.02
PEG-LE	C. + P.	86.88 ± 0.03	76.96 ± 0.23	91.65 ± 0.02	90.21 ± 0.18	91.15 ± 0.13	98.73 ± 0.04
PEG-DW+	N. + P.	93.32 ± 0.08	94.11 ± 0.14	97.88 ± 0.05	91.68 ± 0.01	92.15 ± 0.02	98.20 ± 0.01
PEG-DW+	C. + P.	90.78 ± 0.09	91.22 ± 0.12	93.44 ± 0.05	90.22 ± 0.04	91.37 ± 0.05	97.50 ± 0.03
PEG-LE+	N. + P.	93.78 ± 0.03	95.73 ± 0.09†	97.92 ± 0.11†	92.29 ± 0.11	92.37 ± 0.06	98.18 ± 0.02
PEG-LE+	C. + P.	88.98 ± 0.14	78.61 ± 0.27	94.28 ± 0.05	92.35 ± 0.02†	92.50 ± 0.06	97.79 ± 0.01

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则-对于特定任务的设计启示

节点分类:

- (1)受网络分析启发,对同质图和异质图具有不同聚合过滤器的自适应GNN,或者使用没有固定聚合过程的图transformer。
- (2)受稳定性启发,对GFM采用谱正则化方法可能是下一步的研究方向。

链路预测:

- (1)受网络分析启发,模型主干应该分别编码成对的结构邻近性和特征邻近性。
- (2)更好的利用来自不同领域的下游图的表示,例如利用语境学习将具有表达能力的GNN表示有效地迁移到新的、看不见的图上。

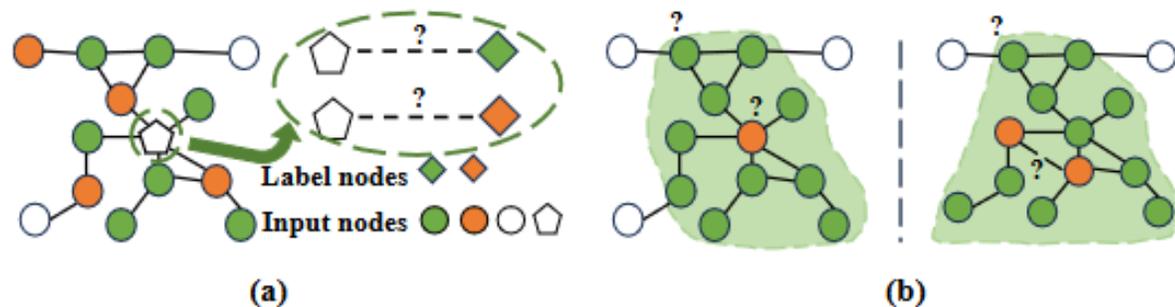
图分类:

- (1)下一步工作可以围绕如何识别频繁网络模体而展开。
- (2)使用具有更好的表达能力的GNNs作为架构。

图基础模型的可迁移性原则

可迁移性原则-对于任务间的设计启示

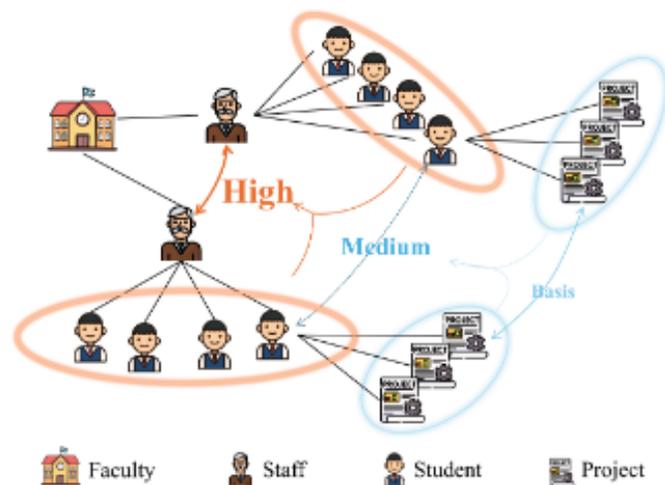
1.采用统一的任务表述，以促进节点级、链接级和图级任务之间的可迁移性。



2.节点分类和链路预测任务共享特征同质性

3.链接预测的全局结构邻近性原则可以提高非同质图上的节点分类性能。

4.链接预测中的三元闭包是图分类中使用的特殊网络模体。



Thanks

2024/09/14



中国科学院 信息工程研究所
INSTITUTE OF INFORMATION ENGINEERING, CAS