评论 Xu 等人 2019 年的《图神经网络有多强大?》

潘旻琦

2020 年 4 月 20 日

1. [Xu et al., 2019] 的标题发问了：图形神经网络有多强大？那么什么叫 “强大” 呢？作者的思路非常精彩，那就是把对图同构的判别能力作为图神经网络的强大的标准；可能是因为目前仍没有多项式时间的算法去判别图同构，要求图神经网络判别图同构似乎太过严苛，又因为 [Xu et al., 2019] 的引理 2 从理论上证明了图神经网络在判别图同构的能力上最多与 Weisfeiler-Lehman 同构测试一样强大，[Xu et al., 2019] 于是又降低了评价标准，把达到 Weisfeiler-Lehman 同构测试能力作为评价图神经网络的表示能力的标准；Weisfeiler-Lehman 同构测试算法可以追溯到 1968 年 [Weisfeiler and Lehman, 1968]；要当心 WL 测试只能给出 “不同构” 的结论，不能给出 “同构” 的结论，即 WH 测试无法提供确凿的证据证明两个图是同构的

2. [Xu et al., 2019] 的理论假定了图节点的输入特征向量 X 是一个可数空间 $\mathcal{X}$ 的多重子集，但是随着最近微分方程与神经网络的结合，这个可数的大前提显得很富有局限性；可以想象在不可数集合上做理论分析的难度更大，例如需要一个测度来刻画函数值域中的点的紧密程度；最近的后续工作 [Corso et al., 2020] 似乎对此进行了拓展，允许连续的特征空间

3. 这个可数性假设用在作者关于 [Xu et al., 2019] 的引理 4 的证明中用得非常繁琐，我认为此处只要引用小鲁丁 [Rudin, 1976] 的定理 2.13 就可以说明引理 4 是显然成立的，因为大小有界的多重集的全体可以看作 $\mathcal{X}^n$ 空间，其中

$$n \equiv \max_{X \subset \mathcal{X}} |X|$$

即全体多重集的大小的上界；此时 GNN 所有中间层函数都可以看做 $\mathcal{X}^n$ 空间上的一个算子；因为 [Rudin, 1976] 的定理 2.13 蕴含了 $\mathcal{X}^n$ 空间本身是可数的，所以 GNN 所有隐藏层特征空间显然是可数的

4. [Xu et al., 2019] 的理论化策略是值得借鉴的，他们把图神经网络（的第 k 层）高

度抽象为：

$$
\begin{aligned}
a_v^{(k)} &= \mathrm{AGGREGTE}^{(k)}\big(\{h_u^{(k-1)} : u \in \mathcal{N}(v)\}\big) \\
h_v^{(k)} &= \mathrm{COMBINE}^{(k)}\big(h_v^{k-1}, a_v^{(k)}\big)
\end{aligned}
$$

我认为他们的理论化策略的关键是把 $\mathrm{AGGREGTE}^{(k)}$ 和 $\mathrm{COMBINE}^{(k)}$ 两个被神经网络参数化了的函数包装成了黑盒，不去碰各种具体 GNN 变种的这两者内部的结构，于是实现了更高层次的理论上的分析的可能性；如果打开 AGGREGATE 和 COMBINE 这两个黑盒，鉴于各种 GNN 变体的神经网络参数化的复杂性，我想可能很难做理论上的分析

5. 从 [Xu et al., 2019] 的整体成果来看，基于邻域聚合（或消息传递）的 GNN 的图同构测试方面的能力是有限的，因为 [Xu et al., 2019] 已经构造了 "能力最强" 的 GNN，而且这个构造里面根本都没有使用图拉普拉斯算子，说明在表达能力方面图拉普拉斯算子这个设计（这个设计可能主要是为了把计算机视觉的傅里叶变换移植到图上）不是必须的，以下这个式子总结了他们的核心构造：

$$
h_v^{(k)} = \mathrm{MLP}^{(k)}\Big((1+\epsilon^{(k)}) \cdot h_v^{(k-1)} + \sum_{u \in \mathcal{N}(v)} h_u^{(k-1)}\Big)
$$

   看来未来工作如果想在图同构判别能力方面突破这个能力上限，必须设计能超越邻域聚合（或消息传递）的新架构

6. 虽然 [Xu et al., 2019] 的引理 2 貌似把 GNN 的同构判别能力贬低到 WL 测试之下，但作者也指出 GNN 一个优于 WL 测试的地方，即可以捕获图结构的相似性；WL 测试中的节点特征向量本质上是独热编码，因此无法捕获子树之间的相似性；相反，同等判别能力的 GNN 通过学习将子树嵌入到低维空间中可以弥补 WL 测试的这个不足；这使得 GNN 不仅可以区分不同的结构，而且还可以学习将相似的图结构映射到相似的嵌入，获得捕获图的结构相似性的能力

7. 因此，最后也必须意识到，判别同构能力并不是我们唯一关心的问题，在很多 GNN 应用中我们并不追求图形同构测试方面的性能；例如上述 GNN 捕获图的结构相似性的能力也很重要；所以对该文的结论也不必过于悲观

参考文献

[Corso et al., 2020] Corso, G., Cavalleri, L., Beaini, D., Liò, P., and Veličković, P. (2020). Principal neighbourhood aggregation for graph nets.

[Rudin, 1976] Rudin, W. (1976). *Principles of Mathematical Analysis*. International series in pure and applied mathematics. McGraw-Hill.

[Weisfeiler and Lehman, 1968] Weisfeiler, B. and Lehman, A. A. (1968). A reduction of a graph to a canonical form and an algebra arising during this reduction. *Nauchno-Technicheskaya Informatsia*, 2(9):12–16.

[Xu et al., 2019] Xu, K., Hu, W., Leskovec, J., and Jegelka, S. (2019). How powerful are graph neural networks? In *International Conference on Learning Representations*.