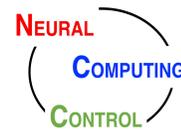




南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



生物医学工程系
Department of Biomedical Engineering



神经计算与控制实验室
NCC lab

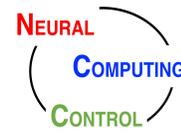
Best paper of 2021

Line graph neural networks for link prediction

Author: Lei Cai, Jundong Li, Jie Wang, and Shuiwang Ji (姬水旺)

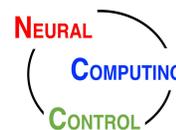
Presenter: Ziyuan Ye (叶梓元)

Content



1. Brief Introduction to Shuiwang Ji
2. Background of link prediction
3. Proposed Method
4. Experiments & Result
5. Overview of his paper in 2021

Introduction



➤ 2021年共16篇 (10见刊)

➤ 期刊:

- 2篇 IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell
- 1篇 IEEE Transactions on Medical Imaging
- 1篇 Journal of Machine Learning Research
- 1篇 Nature Machine Intelligence
- 1篇 Data Mining and Knowledge Discovery

➤ 会议:

- 2篇 International Conference on Machine Learning (ICML)
- 1篇 ICLR 2021 Workshop
- 1篇 NeurIPS 2021 Workshop



Shuiwang Ji, Professor

已关注

Department of Computer Science & Engineering, Texas A&M University

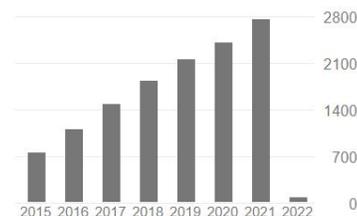
在 tamu.edu 的电子邮件经过验证 - 首页

Machine Learning Deep Learning Graph and Image Analysis Quantum Systems

标题	引用次数	年份
3D convolutional neural networks for human action recognition S Ji, W Xu, M Yang, K Yu IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence 35 (1), 221-231	5131	2013
SLEP: Sparse learning with efficient projections J Liu, S Ji, J Ye Arizona State University 6 (491), 7	738 *	2009
Deep convolutional neural networks for multi-modality isointense infant brain image segmentation W Zhang, R Li, H Deng, L Wang, W Lin, S Ji, D Shen NeuroImage 108, 214-224	699	2015
Multi-task feature learning via efficient l2, 1-norm minimization J Liu, S Ji, J Ye arXiv preprint arXiv:1205.2631	667	2012
An accelerated gradient method for trace norm minimization S Ji, J Ye Proceedings of the 26th annual international conference on machine learning ...	502	2009

引用次数 [查看全部](#)

	总计	2017 年至今
引用	14642	10718
h 指数	48	41
i10 指数	103	86



可公开访问的出版物数量 [查看全部](#)



Why I select this paper?

Cai, L., Li, J., Wang, J., & Ji, S. (2021). Line graph neural networks for link prediction. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*.

研究问题: 如何克服传统方法的局限性 (启发式方法泛化能力弱; 学习节点嵌入式方法在稀疏图表现差; 将链路预测转换成子图分类方法依赖图池化操作, 可能会丢失重要信息), 设计泛化能力好, 高性能的链路预测方法?

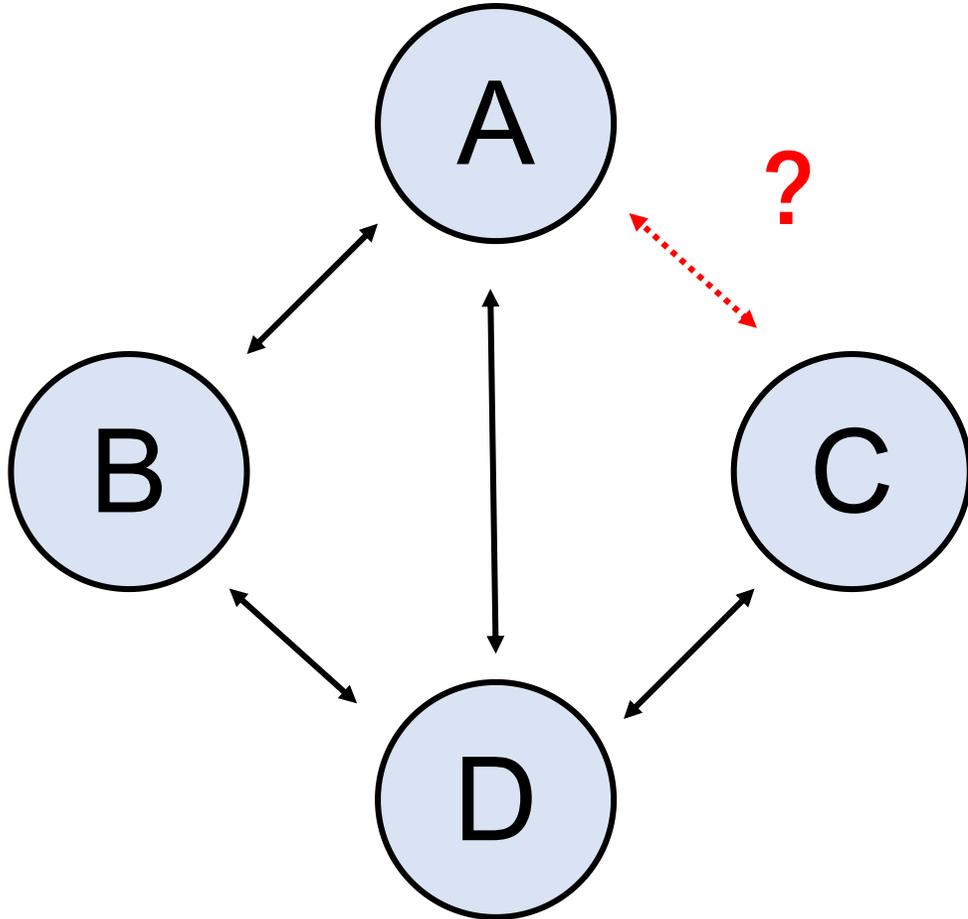
解决方案: 作者引入图论中的线图 (Line Graph), 将链路预测问题转换成节点分类问题。

模型性能: 在14个不同任务的数据集上均达到了与SOTA相仿的效果, 并且模型参数更少, 训练时间更短。

选择的原因:

- ✓ 模型**创新性强**, 引入图论中的线图为链路预测提供新思路;
- ✓ 模型**效率高**, 模型在更短的时间内能获得更好的效果;
- ✓ 模型在多个数据集上得到**广泛验证**.

Importance of Link Prediction



链路预测模型的应用

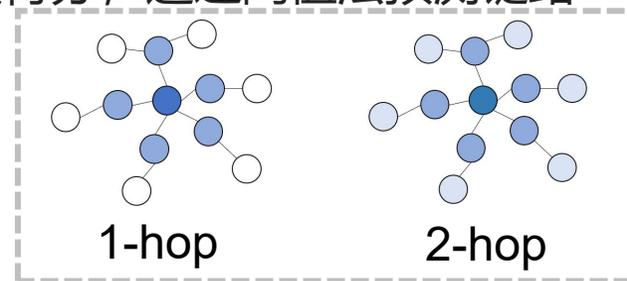
- 社交网络朋友推荐
- 电子商务中的产品推荐
- 蛋白质相互作用分析
- 代谢网络重构
- 知识补全

...

Background

基于启发式的方法 (Heuristic Method): 根据两个目标节点的邻域计算相似度得分, 通过阈值法预测链路

- ✓ first-order: 仅使用1-hop的邻居来计算相似度;
- ✓ second-order: 使用2-hop的邻居来计算相似度;
- ✓ high-order heuristics: 利用整个图来计算节点对之间的相似度得分.



缺陷: 由于许多启发式方法被提出来处理不同的图, **方法缺乏普适性**, 因此选择一种对任务有利的启发式方法成为一个具有挑战性的问题。

基于向量映射的方法 (Embedding Method): 根据两个目标节点的向量映射计算相似度得分

- ✓ deepwalk ;
- ✓ LINE ;
- ✓ node2vec;
- ✓ Variational graph autoencoder (GAE).

缺陷: 如果**图非常稀疏**, 则基于向量映射方法的**性能**可能会受到影响。

Background

基于深度学习的方法(Heuristic Method):一般方法考虑到不同图的尺度变化, 会利用图的卷积和图的池化来获得固定大小的特征向量, 进而预测链路的存在。

- ✓ Weisfeiler-Lehman Neural Machine: 基于以两个目标节点为中心的固定大小的封闭子图, 利用全连接神经网络来预测链路的存在;
- ✓ SEAL: 将链接预测任务转化为子图分类问题, 并使用图神经网络进行求解。

缺陷: 由于当前的SOTA方法需要用到图池化操作, 因此只能保留部分图的信息以供进一步链路预测。同时, 带池化操作的GNN通常都需要更长的训练时间使模型收敛。

本文的技术问题: 如何克服传统方法的局限性 (启发式方法泛化能力弱; 学习节点嵌入式方法在稀疏图表现差; 将链路预测转换成子图分类方法依赖图池化操作, 可能会丢失重要信息), 设计泛化能力好, 高性能的链路预测方法?

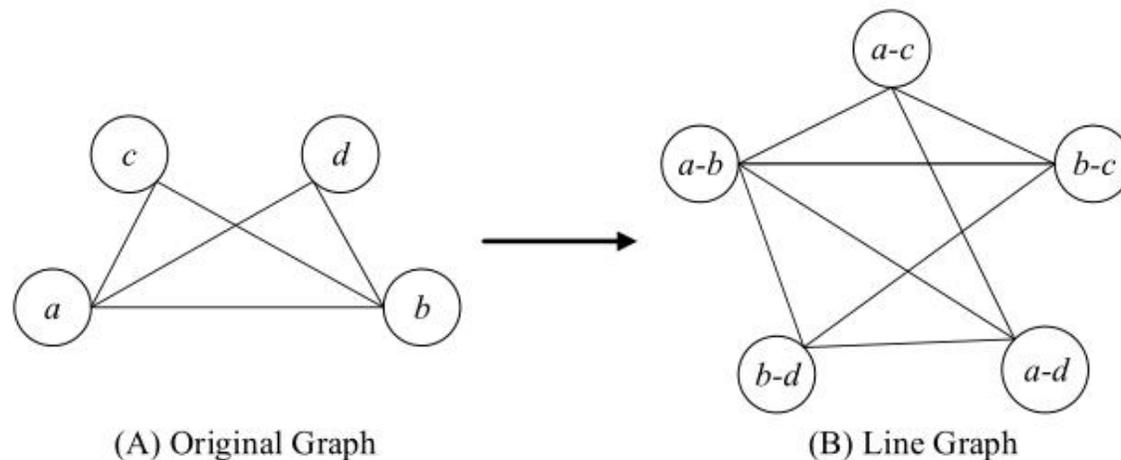
Proposed Method

线图 $L(G)$ 的定义: 将原始图 G 中的边视为线图 $L(G)$ 中的节点。 $L(G)$ 中的两个节点是连通的, 当且仅当两个相应的链路共享同一个节点。

线图的性质: 给定一个有 m 个结点和 n 条边的图 G , 其线图 $L(G)$ 的结点数等于 n , $L(G)$ 中的边数为 $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m d_i^2 - n$, 其中 d_i 是图 G 中结点 i 的度。

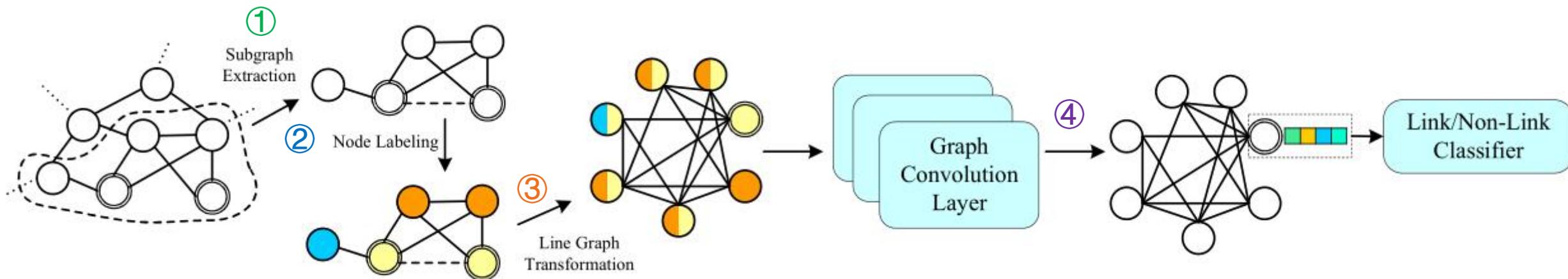


模型优势: 线图转化的过程不会很复杂, 只跟节点的度的平方相关。线图上的**单次图卷积**可以聚合来自**2-hop邻居**的节点向量映射, 效率更高。



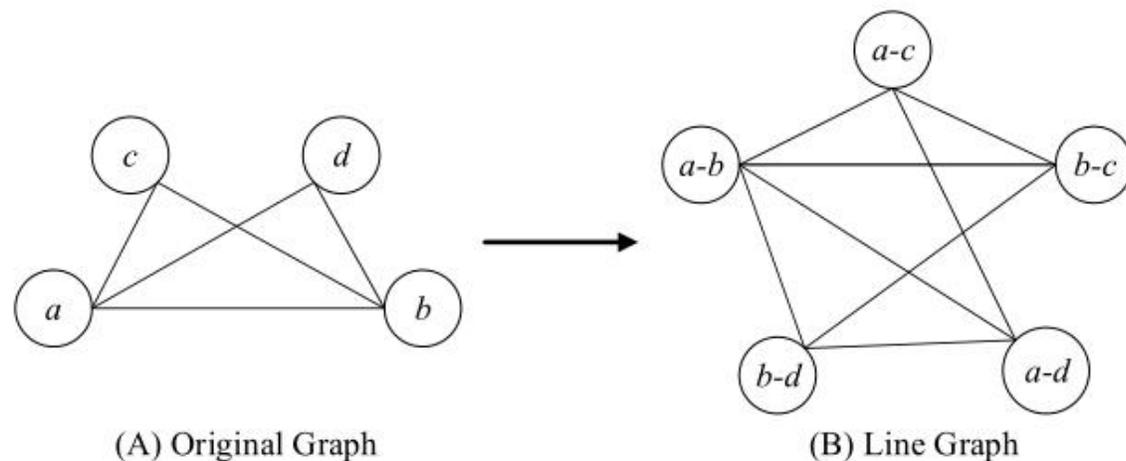
将点图转换成线图的示意图

Proposed Method



基于线图的链路预测流程:

- **子图获取:** 提取想要预测的链路所属的两个节点的h-hop封闭子图
- **节点标注:** 采用节点标签函数(Labeling function)为每个节点分配标签, 以表示对目标链路的结构重要性。
- **线图转换:** 将的节点子图转换为相应的线图
- **链路预测:** 用GNN做线图上的节点二分类, 预测链路是否存在。



将点图转换成线图的示意图

Result

TABLE 2
AUC comparison with baseline methods (80% training links)

Model	BUP	C.ele	USAir	SMG	EML	NSC	YST
Katz	87.10(± 2.73)	84.84(± 2.05)	92.01(± 0.88)	86.09(± 1.06)	88.45(± 0.68)	98.00(± 0.31)	80.56(± 0.78)
PR	90.13(± 2.45)	89.14(± 1.35)	93.74(± 1.01)	89.13(± 0.90)	89.46(± 0.63)	98.05(± 0.29)	81.40(± 0.75)
SR	85.47(± 2.75)	75.65(± 2.24)	79.21(± 1.50)	78.39(± 1.14)	86.90(± 0.71)	97.19(± 0.48)	73.93(± 0.95)
N2V	80.25(± 5.55)	80.08(± 1.52)	85.40(± 0.96)	78.30(± 1.22)	83.06(± 1.42)	96.23(± 0.95)	77.07(± 0.36)
GAE	90.16(± 1.65)	83.73(± 0.75)	91.80(± 0.86)	85.88(± 0.90)	86.78(± 1.07)	98.83(± 0.33)	77.07(± 0.36)
SEAL	93.32(± 0.84)	87.44(± 1.21)	95.21(± 0.77)	91.53(± 0.46)	92.01(± 0.38)	99.55(± 0.01)	82.07(± 0.96)
NRI	94.77(± 0.60)	90.13(± 0.82)	96.44(± 0.38)	91.18(± 0.35)	91.83(± 0.30)	99.80(± 0.01)	91.63(± 0.25)
LGLP	95.24 (± 0.53)	90.16 (± 0.76)	97.44 (± 0.32)	92.53 (± 0.29)	92.03 (± 0.28)	99.82 (± 0.01)	91.97 (± 0.12)
Model	Power	KHN	ADV	LDG	HPD	GRQ	ZWL
Katz	59.59(± 1.51)	84.60(± 0.79)	92.13(± 0.21)	92.96(± 0.19)	85.47(± 0.35)	89.81(± 0.59)	96.42(± 0.12)
PR	59.88(± 1.51)	88.43(± 0.80)	92.78(± 0.18)	94.46(± 0.19)	87.19(± 0.34)	89.98(± 0.57)	97.20(± 0.12)
SR	70.18(± 0.75)	79.55(± 0.90)	86.18(± 0.22)	90.95(± 0.14)	81.73(± 0.37)	89.81(± 0.58)	95.97(± 0.16)
N2V	70.37(± 1.15)	82.21(± 1.19)	77.70(± 0.83)	91.88(± 0.56)	79.61(± 1.14)	91.33(± 0.53)	94.38(± 0.51)
GAE	69.84(± 0.96)	84.37(± 0.39)	90.55(± 0.23)	93.84(± 0.21)	85.21(± 0.45)	91.15(± 0.45)	95.46(± 0.30)
SEAL	81.37(± 0.93)	92.69(± 0.14)	95.07(± 0.13)	96.44(± 0.13)	92.26(± 0.09)	97.10(± 0.12)	97.46(± 0.02)
NRI	82.15(± 0.50)	92.63(± 0.11)	94.53(± 0.10)	96.49(± 0.08)	91.63(± 0.08)	97.21(± 0.11)	97.44(± 0.01)
LGLP	82.17 (± 0.57)	93.30 (± 0.09)	95.40 (± 0.10)	96.70 (± 0.07)	92.58 (± 0.08)	97.68 (± 0.10)	97.76 (± 0.01)

Result

TABLE 3
AP comparison with baseline methods (80% training links)

Model	BUP	C.ele	USAir	SMG	EML	NSC	YST
Katz	85.94(± 3.46)	85.94(± 3.46)	93.51(± 0.79)	87.68(± 0.90)	90.54(± 0.53)	98.02(± 0.43)	85.76(± 0.64)
PR	89.53(± 3.11)	87.96(± 1.69)	94.30(± 1.27)	91.07(± 0.59)	91.01(± 0.67)	98.08(± 0.34)	86.34(± 0.72)
SR	81.10(± 3.31)	66.43(± 2.39)	69.80(± 1.99)	70.39(± 1.67)	87.24(± 0.84)	96.55(± 1.14)	77.56(± 1.09)
N2V	81.47(± 4.48)	77.98(± 1.54)	82.53(± 1.12)	77.01(± 1.79)	83.08(± 1.36)	96.81(± 0.86)	78.48(± 1.03)
GAE	89.26(± 2.10)	82.53(± 1.51)	93.41(± 0.67)	85.95(± 0.67)	88.73(± 0.92)	98.93(± 0.31)	82.65(± 0.86)
SEAL	93.58(± 0.68)	86.49(± 1.08)	95.46(± 0.59)	91.90(± 0.31)	91.93(± 0.31)	99.51(± 0.01)	91.85(± 0.20)
NRI	94.88(± 0.50)	89.58(± 0.65)	96.68(± 0.31)	91.23(± 0.26)	92.28(± 0.28)	99.80(± 0.01)	92.57(± 0.23)
LGLP	95.46 (± 0.43)	89.70 (± 0.53)	97.37 (± 0.25)	92.92 (± 0.21)	92.61 (± 0.23)	99.82 (± 0.01)	92.98 (± 0.10)
Model	Power	KHN	ADV	LDG	HPD	GRQ	ZWL
Katz	74.29(± 0.83)	88.27(± 0.32)	93.72(± 0.16)	94.91(± 0.27)	89.52(± 0.32)	93.08(± 0.29)	97.08(± 0.09)
PR	74.74(± 0.81)	92.17(± 0.24)	94.03(± 0.24)	96.26(± 0.22)	91.01(± 0.23)	93.18(± 0.34)	97.69(± 0.08)
SR	70.69(± 0.67)	77.16(± 0.81)	83.31(± 0.35)	88.71(± 0.79)	84.16(± 0.42)	92.97(± 0.31)	95.44(± 0.15)
N2V	76.55(± 0.75)	83.26(± 0.79)	79.02(± 0.65)	92.12(± 0.50)	80.57(± 0.81)	93.92(± 0.31)	93.82(± 0.39)
GAE	75.04(± 0.87)	87.52(± 1.17)	90.87(± 0.26)	95.24(± 0.19)	86.62(± 0.39)	93.78(± 0.33)	95.79(± 0.27)
SEAL	83.91(± 0.83)	93.40(± 0.13)	95.18(± 0.12)	96.55(± 0.11)	93.41(± 0.09)	97.86(± 0.11)	97.54(± 0.02)
NRI	83.90(± 0.52)	93.52(± 1.21)	94.73(± 0.11)	96.86(± 0.07)	92.81(± 0.08)	97.76(± 0.11)	97.59(± 0.01)
LGLP	84.78 (± 0.53)	94.14 (± 0.09)	95.72 (± 0.08)	96.86 (± 0.06)	93.65 (± 0.08)	98.14 (± 0.10)	97.91 (± 0.01)

Result

TABLE 4
AUC comparison with baseline methods (50% training links)

Model	BUP	C.ele	USAir	SMG	EML	NSC	YST
Katz	81.61(± 3.40)	79.99(± 0.59)	88.91(± 0.39)	80.65(± 0.58)	84.16(± 0.64)	95.99(± 0.62)	77.28(± 0.37)
PR	84.07(± 3.39)	84.95 (± 0.58)	90.57(± 0.39)	84.59(± 0.45)	85.43(± 0.63)	96.06(± 0.60)	77.90(± 3.69)
SR	80.98(± 3.03)	76.05(± 0.80)	81.09(± 0.59)	75.28(± 0.74)	83.05(± 0.64)	95.59(± 0.68)	73.71(± 0.41)
N2V	80.94(± 2.65)	75.53(± 1.23)	84.63(± 1.58)	73.50(± 1.22)	80.15(± 1.26)	94.20(± 1.25)	73.62(± 0.74)
GAE	82.31(± 1.34)	80.34(± 0.76)	89.71(± 0.63)	84.36(± 0.71)	82.04(± 0.55)	97.79(± 0.57)	80.06(± 0.59)
SEAL	85.10(± 0.82)	81.23(± 1.52)	93.23(± 1.46)	86.56(± 0.53)	85.83(± 0.46)	99.07(± 0.02)	85.56(± 0.28)
NRI	87.88(± 0.69)	83.62(± 0.95)	94.59(± 0.82)	88.53(± 0.48)	86.53(± 0.37)	99.28(± 0.01)	87.42(± 0.26)
LGLP	88.57 (± 0.52)	84.60(± 0.82)	95.18 (± 0.33)	89.54 (± 0.36)	86.77 (± 0.26)	99.33 (± 0.01)	87.63 (± 0.15)
Model	Power	KHN	ADV	LDG	HPD	GRQ	ZWL
Katz	57.34(± 0.51)	78.99(± 0.20)	90.04(± 0.17)	88.61(± 0.19)	81.60(± 0.12)	82.50(± 0.21)	93.72(± 0.06)
PR	57.34(± 0.52)	82.34(± 0.21)	90.97(± 0.15)	90.50(± 0.19)	83.15(± 0.17)	82.64(± 0.22)	95.11(± 0.09)
SR	56.16(± 0.45)	75.87(± 0.19)	84.87(± 0.14)	87.95(± 0.14)	78.88(± 0.22)	82.68(± 0.24)	94.00(± 0.10)
N2V	55.40(± 0.84)	78.53(± 0.72)	74.67(± 0.98)	88.82(± 0.44)	75.84(± 1.03)	84.24(± 0.35)	92.06(± 0.61)
GAE	56.75(± 1.93)	82.65(± 0.38)	90.12(± 0.17)	89.95(± 0.23)	83.71(± 0.34)	83.18(± 0.44)	94.14(± 0.23)
SEAL	65.80(± 1.10)	87.43(± 0.17)	92.75(± 0.14)	92.98(± 0.16)	88.05(± 0.10)	90.07(± 0.15)	94.94(± 0.02)
NRI	66.94(± 0.61)	88.17(± 0.16)	92.86(± 0.12)	92.80(± 0.13)	88.07(± 0.09)	90.75(± 0.12)	95.10(± 0.01)
LGLP	66.94 (± 0.60)	88.88 (± 0.13)	93.28 (± 0.10)	93.43 (± 0.11)	88.65 (± 0.09)	91.31 (± 0.11)	95.51 (± 0.01)

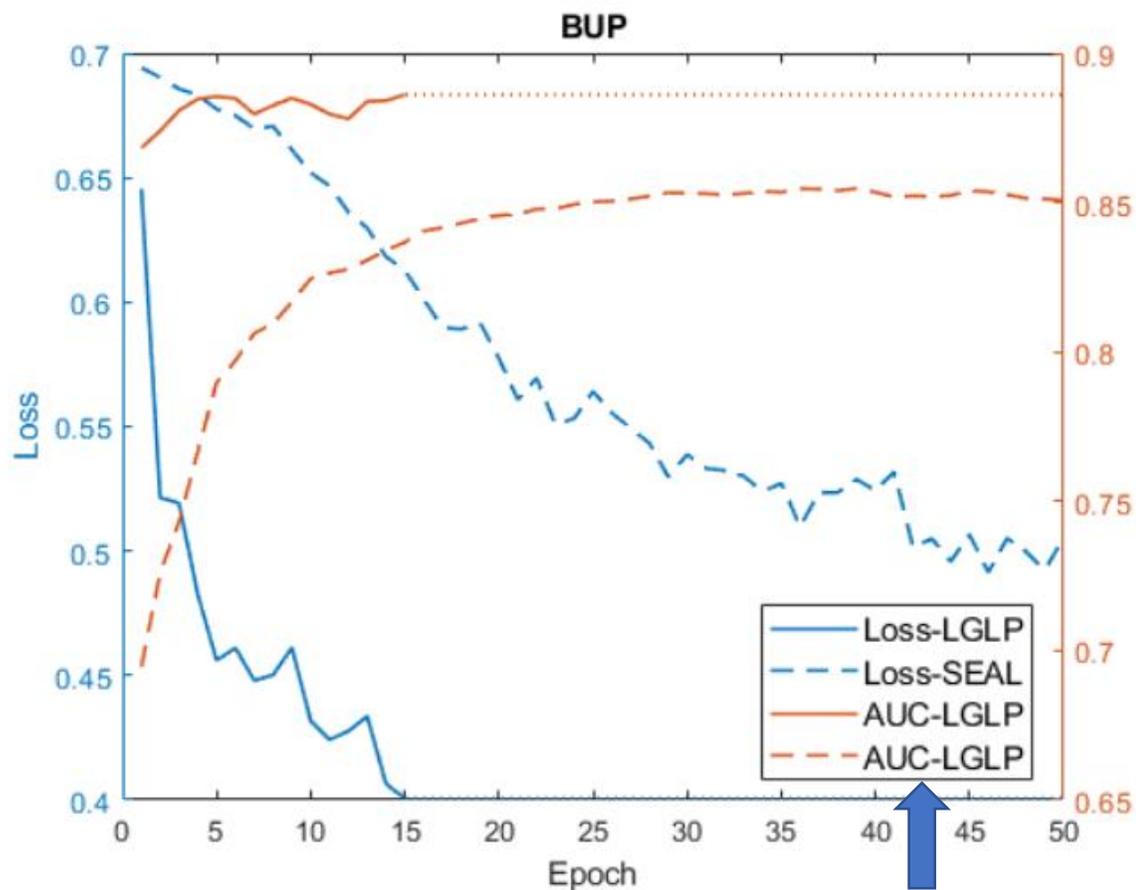
Result

TABLE 5
AP comparison with baseline methods (50% training links).

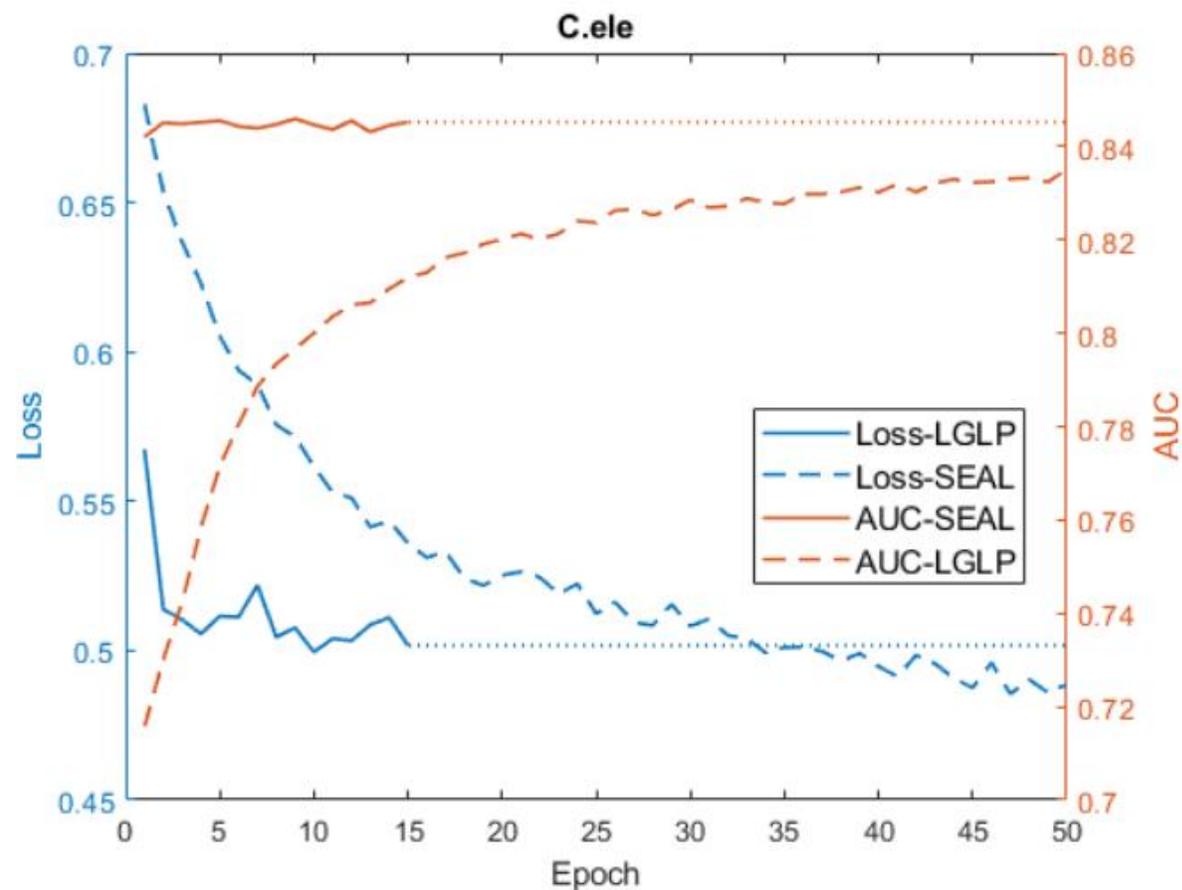
Model	BUP	C.ele	USAir	SMG	EML	NSC	YST
Katz	85.94(± 2.03)	83.99(± 0.79)	93.51(± 0.35)	87.68(± 0.79)	80.54(± 0.31)	98.02(± 0.53)	81.63(± 0.41)
PR	89.53(± 2.58)	87.96 (± 0.86)	94.30(± 0.49)	91.07(± 0.69)	91.01(± 0.52)	98.08(± 0.59)	82.08(± 0.46)
SR	81.09(± 2.57)	66.43(± 1.17)	69.78(± 0.84)	70.39(± 0.96)	87.24(± 0.52)	96.55(± 0.75)	76.02(± 0.49)
N2V	76.05(± 3.20)	73.37(± 1.23)	81.03(± 1.18)	73.32(± 1.34)	81.12(± 0.92)	95.32(± 1.08)	76.61(± 0.94)
GAE	81.30(± 2.14)	79.75(± 0.92)	91.00(± 0.59)	84.96(± 0.68)	84.58(± 1.59)	98.20(± 0.37)	81.35(± 0.68)
SEAL	84.17(± 0.62)	83.94(± 1.31)	94.31(± 1.13)	86.76(± 0.41)	87.45(± 0.41)	99.09(± 0.02)	86.45(± 0.25)
NRI	87.99(± 0.58)	83.72(± 0.92)	94.72(± 0.73)	89.02(± 0.34)	88.33(± 0.36)	99.30(± 0.01)	88.84(± 0.23)
LGLP	89.03 (± 0.41)	84.80(± 0.63)	94.89 (± 0.33)	90.23 (± 0.26)	88.49 (± 0.23)	99.38 (± 0.01)	89.22 (± 0.13)
Model	Power	KHN	ADV	LDG	HPD	GRQ	ZWL
Katz	57.63(± 0.51)	83.04(± 0.38)	91.76(± 0.15)	91.57(± 0.17)	85.73(± 0.89)	86.59(± 0.20)	95.12(± 0.05)
PR	57.61(± 0.56)	87.18(± 0.26)	92.43(± 0.17)	93.53(± 0.14)	87.20(± 0.15)	86.73(± 0.20)	96.24(± 0.05)
SR	56.19(± 0.49)	75.87(± 0.66)	83.22(± 0.20)	88.11(± 0.25)	81.07(± 0.18)	86.27(± 0.20)	94.26(± 0.11)
N2V	60.46(± 0.86)	80.60(± 0.74)	76.70(± 0.82)	89.57(± 0.64)	77.66(± 0.54)	88.70(± 0.26)	91.61(± 0.49)
GAE	60.50(± 2.26)	85.29(± 0.34)	90.60(± 0.16)	92.63(± 0.16)	85.60(± 0.28)	88.15(± 0.29)	94.95(± 0.18)
SEAL	68.67(± 0.98)	90.37(± 0.16)	93.52(± 0.13)	94.33(± 0.15)	90.25(± 0.10)	92.80(± 0.12)	95.88(± 0.02)
NRI	68.53(± 0.52)	90.42(± 0.13)	93.34(± 0.11)	94.24(± 0.12)	89.92(± 0.09)	92.41(± 0.11)	95.83(± 0.01)
LGLP	69.41 (± 0.50)	90.83 (± 0.11)	93.82 (± 0.10)	94.63 (± 0.10)	90.34 (± 0.09)	93.01 (± 0.10)	96.19 (± 0.01)

Result

提出的方法和SOTA方法在不同数据集的训练损失和测试AUC的比较



Typo correction: AUC-SEAL

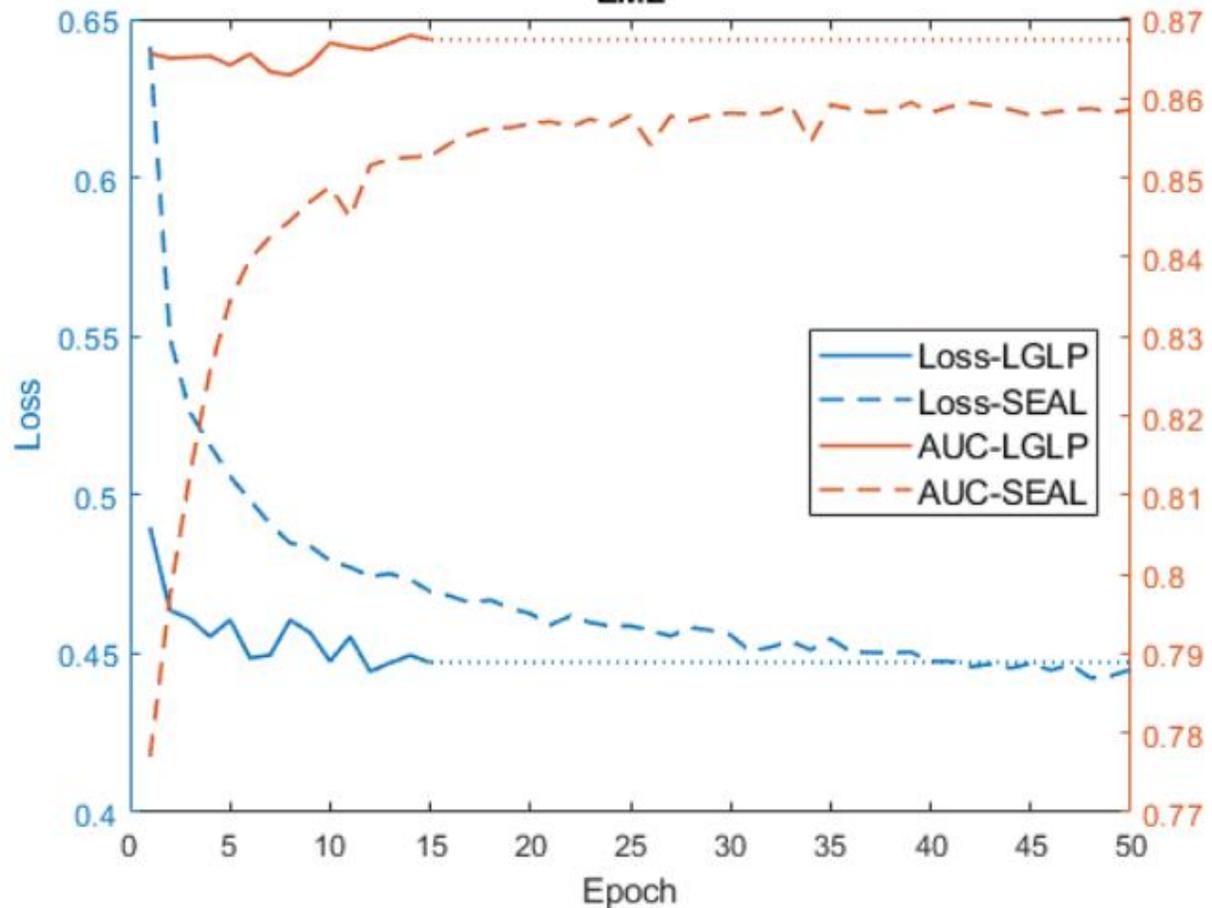


AUC: area under the curve; **SOTA:** state-of-the-art

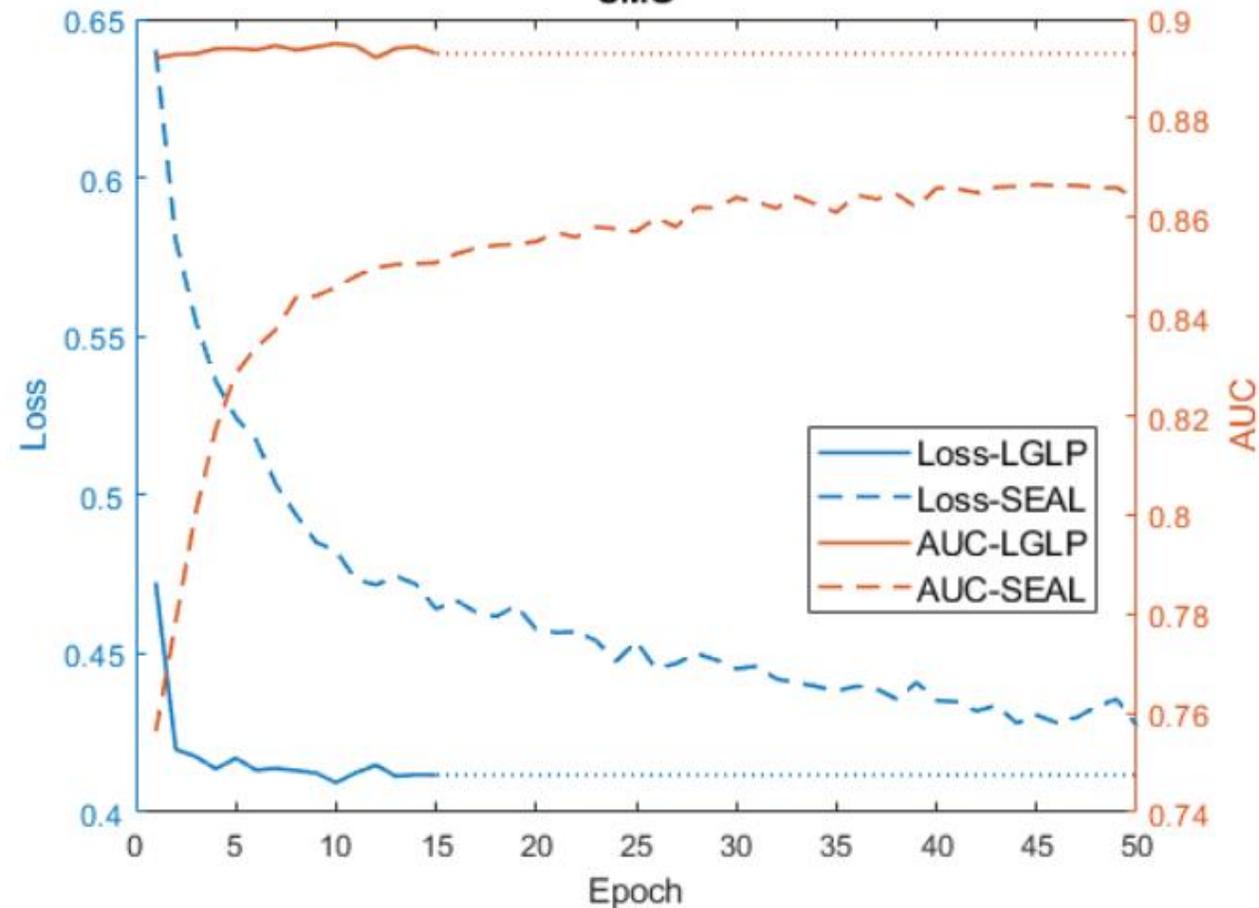
Result

提出的方法和SOTA方法在不同数据集的训练损失和测试AUC的比较

EML



SMG

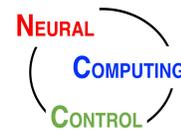


AUC: area under the curve; **SOTA:** state-of-the-art

Reference

- Adamic, L. A., & Adar, E. (2003). Friends and neighbors on the web. *Social networks*, 25(3), 211-230.
- Barabási, A. L., & Albert, R. (1999). Emergence of scaling in random networks. *science*, 286(5439), 509-512.
- Zhou, T., Lü, L., & Zhang, Y. C. (2009). Predicting missing links via local information. *The European Physical Journal B*, 71(4), 623-630.
- Jeh, G., & Widom, J. (2002, July). Simrank: a measure of structural-context similarity. In *Proceedings of the eighth ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining* (pp. 538-543).
- Ng, A. Y., Jordan, M. I., & Weiss, Y. (2002). On spectral clustering: Analysis and an algorithm. In *Advances in neural information processing systems* (pp. 849-856).
- Perozzi, B., Al-Rfou, R., & Skiena, S. (2014, August). Deepwalk: Online learning of social representations. In *Proceedings of the 20th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining* (pp. 701-710).
- Tang, J., Qu, M., Wang, M., Zhang, M., Yan, J., & Mei, Q. (2015, May). Line: Large-scale information network embedding. In *Proceedings of the 24th international conference on world wide web* (pp. 1067-1077).
- Qiu, J., Dong, Y., Ma, H., Li, J., Wang, K., & Tang, J. (2018, February). Network embedding as matrix factorization: Unifying deepwalk, line, pte, and node2vec. In *Proceedings of the eleventh ACM international conference on web search and data mining* (pp. 459-467).

Overview



Cai, L., Li, J., Wang, J., & Ji, S. (2021). Line graph neural networks for link prediction. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*.

研究问题：如何克服传统链路预测方法的局限性（启发式方法泛化能力弱；学习节点嵌入式方法在稀疏图表现差；将链路预测转换成子图分类方法依赖图池化操作，可能会丢失重要信息），设计泛化能力好，高性能的链路预测方法？

解决方案：作者引入图论中的**线图 (Line Graph)**，将**链路预测问题转换成节点分类问题**。

模型性能：在14个不同任务的数据集上均达到了**与SOTA相仿的效果**，并且**模型参数更少，训练时间更短**。

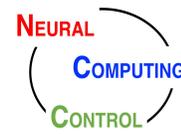
Gao, H., Liu, Y., & Ji, S. (2021). Topology-aware graph pooling networks. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*.

研究问题：如何在做图池化操作时，将输入图的拓扑信息引入池化操作内，使得池化后得到的图丢失的信息更少，保留更多有效数据？

解决方案：作者提出**Topology-aware graph pooling (TAP)** 对每个节点都分别用**Local Voting**和**Global Voting**的方式，计算节点在局部和全局的重要性。将加权后的重要性得分，与节点的度 (degree) 再做加权，作为节点的最终的重要性度量 (**引入图连通性**)。最后，保留前K个重要性最大的节点，在原始的邻接矩阵上将未被保留的节点的行和列都置位0，以此完成Topological graph pooling操作。

模型性能：作者在不同社交网络数据集和生物信息数据集上做了验证，相比传统池化方法效果良好。

Overview



Liu, Y., & Ji, S. (2021). CleftNet: Augmented Deep Learning for Synaptic Cleft Detection from Brain Electron Microscopy. *IEEE Transactions on Medical Imaging*.

研究问题: 如何引入Attention机制, 在电子显微镜的细胞成像上更准确识别突触间隙?

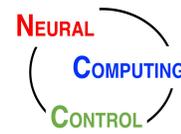
解决方案: 作者提出CleftNet, 使用两个新的网络组件: **特征增强器** (Feature Augmentor, 结合attention机制, 融合输入的全局信息, 学习突出间隙的常见形态模式, 增强突触间隙的特征) 和**标签增强器** (Label Augmentor, 将体素的标签从一个值增强到一个包含分割标签和边界标签的向量)。

模型性能: 在基于电子显微镜的突触间隙目标分割的**Online和Offline任务上均达到SOTA效果**。

Liu, M., Luo, Y., Wang, L., Xie, Y., Yuan, H., Gui, S., ... & Ji, S. (2021). DIG: A Turnkey Library for Diving into Graph Deep Learning Research. *Journal of Machine Learning Research*.

主要贡献: 作者开源了一个和**图学习相关的python工具包**, 包括了该Lab的大部分已经发表工作的代码!!!

Overview



Wang, Z., Xie, Y., & Ji, S. (2021). Global voxel transformer networks for augmented microscopy. *Nature Machine Intelligence*, 3(2), 161-171.

研究问题：如何设计能够利用图像全局信息的神经网络，将低质量的显微镜图像作为输入，通过模型将其转换成高质量的图像？

解决方案：作者提出 **Global voxel transformer networks (GVTNet)**，在U-Net上引入作者设计的考虑了**全局voxel信息**的Transformer算子。

模型性能：作者在三个不同显微镜增强任务上做了验证，相比传统方法效果良好。

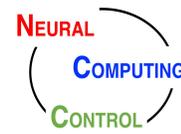
Wang, Z., & Ji, S. (2021). Smoothed dilated convolutions for improved dense prediction. *Data Mining and Knowledge Discovery*, 1-27.

研究问题：如何简化级联的膨胀卷积方式，处理网格伪影，改善密集预测任务的性能？

解决方案：作者提出一种**基于分解的膨胀卷积方式**，通过一个原始的级联式膨胀卷积。

模型性能：在语义图像分割任务上做了验证，相比传统方法而言性共享参数的卷积简化能稍好，同时**需要训练的参数量大幅削减**。

Overview



Yuan, H., Yu, H., Wang, J., Li, K., & Ji, S. (2021). On explainability of graph neural networks via subgraph explorations. In *International Conference on Machine Learning*. PMLR.

研究问题: 如何在子图水平上做图的可解释性, 避免传统方法找到的解释的点和边无法确保相互连接的问题?

解决方案: 作者提出 **SubgraphX**, 利用了 **蒙特卡洛树搜索** 做子图搜索, 引入 **博弈论中的Shapley** 值做子图的重要性度量, 从而完成子图水平的图可解释研究。

模型性能: 作者在不同图分类任务和点分类任务上分别做了实验, 以及和传统图可解释性模型的可视化对比。该方法相比于传统方法, 找到的 **子图解释更直观**。同时, 相比于传统方法, 在可解释性节点和边相同稀疏的程度下, **找到的节点和边的保真度更高**。

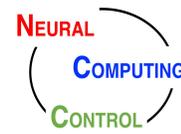
Luo Y, Yan K, Ji S. GraphDF: A discrete flow model for molecular graph generation. In *International Conference on Machine Learning*. PMLR.

研究问题: 现有的分子图生成模型都是基于连续变量。而图本身是一个离散的结构, 这使得生成过程不准确。如何通过离散的方式生成分子图?

解决方案: 作者提出提出了一种 **基于离散隐变量的分子图生成模型GraphDF**。GraphDF通过顺序采样离散的隐变量, 并通过可逆模移位变换将它们映射到新的节点和边, 从而生成分子图。

模型性能: 在各种分子生成任务中, **GraphDF的性能均达到SOTA效果**。

Overview



Liu, M., Fu, C., Zhang, X., Wang, L., Xie, Y., Yuan, H., ... & Ji, S. (2021). Fast Quantum Property Prediction via Deeper 2D and 3D Graph Networks. In *NeurIPS 2021 Workshop AI4Science Program Chair*.

研究问题: 如何预测没有三维平衡结构的量子化学性质?

解决方案: 作者设计了一个深度图神经网络, 通过**直接从2D分子图中学习**, 从而预测量子的性质。

模型性能: 作者提出的方法参加了2021年OGB large-Scale Challenge (OGB-LSC), 并且是**获胜者之一**。

Liu M, Yan K, Oztekin B, et al. GraphEBM: Molecular graph generation with energy-based models. In *ICLR 2021 Workshop EBM Program Chairs*.

研究问题: 如何在分子图生成模型中保证排列不变性?

解决方案: 作者提出**GraphEBM**, 以**排列不变的方式将能量函数参数化**, 从而使GraphEBM排列不变。作者使用朗之万动力学通过近似最大化似然来训练能量函数, 并产生低能量的样本。GraphEBM最后会**根据相应分子的性质灵活地压低能量**, 以组合的方式生成具有多个目标的分子。

模型性能: GraphEBM在随机生成任务、目标生成任务和成分生成任务上验证该方法的有效性。

Thanks for your attention!