图表示学习实验

一、 图节点表示实验

（1） karate club network 的 average degree(平均度)是多少(5 分)

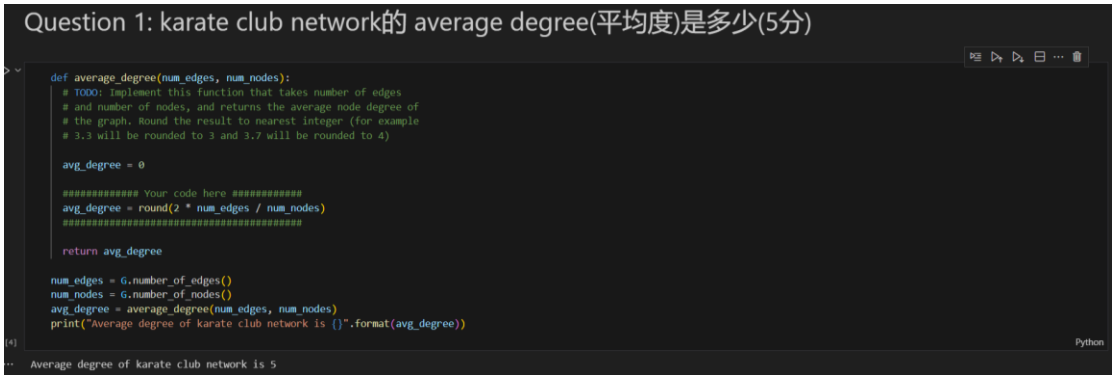
给定空间中的一个完整网络的平均度可以通过以下公式计算：

$$\text{Average Degree} = \frac{2 \times \text{Number of Edges}}{\text{Number of Nodes}}$$

而 karate club network 是一个由 34 个节点和 78 条边组成的网络。因此，通过将这些值代入上述公式，我们可以得到 karate club network 的平均度。

$$\text{Average Degree} = \frac{2 \times 78}{34} \approx 4.59 \approx 5$$

所以 karate club network 的平均度是约为 5。



（2） karate club 网络的平均聚类系数是多少 k? (5 分)

平均聚类系数是指网络中所有节点的聚类系数的平均值。聚类系数衡量了一个节点的邻居节点之间连接的密集程度。 对于每个节点u，其聚类系数C_u被定义为实际连接数量与可能连接数量的比值，也可以表述为：

$$c_u = \frac{|(v_1, v_2) \in \mathcal{E}: v_1, v_2 \in \mathcal{N}(u)|}{\binom{d_u}{2}}$$

这个方程中的分子统计了节点u的邻居节点之间的边的数量，$\mathcal{N}(u) = \{v \in \mathcal{V}: (u, v) \in \mathcal{E}\}$来表示节点的邻居节点。分母计算了$u$的邻居节点中有多少对节点。

对应到包含结点集合V的图来说，平均聚类系数可以计算为：

$$\text{Average Clustering Coefficient} = \frac{\sum_{v \in V} C_v}{|V|}$$

使用 NetworkX 库中的 nx.average_clustering 函数来计算给定图 G 的平均聚类系数。

（3） 在一次 PageRank 迭代之后，节点 0(id 为 0 节点)的 PageRank 值是多少? (5 分)

PageRank 使用网络的链接结构来衡量图中节点的重要性。来自重要页面的“vote”更有价值。特殊的，当一个重要程度为r_i的页面i具有d_i个外部链接,那么每个链接将会得到$\frac{r_i}{d_i}$的“vote”。因此一个页面j的重要程度,记为r_j，是他所有链接的总和$r_j = \sum_{i \to j} \frac{r_i}{d_i}$，其中$d_i$是节点$i$的出度。

PageRank 算法(由 Google 使用)输出一个概率分布，表示随机浏览者点击链接到达任何特定页面的可能性。在每个时间步，随机的冲浪者有两个选择：

- β 的概率随机跟随一个页面
- $1-\beta$ 的概率随机跳转到一个页面

因此，一个特定页面的重要性可以计算为：$r_j = \sum_{i \to j} \beta \frac{r_i}{d_i} + (1-\beta)\frac{1}{N}$

Question 3: 在一次PageRank迭代之后，节点0 (id为0的节点)的PageRank值是多少? (5 Points)

```python
def one_iter_pagerank(G, beta, r0, node_id):
    # TODO: Implement this function that takes a nx.Graph, beta, r0 and node id.
    # The return value r1 is one interation PageRank value for the input node.
    # Please round r1 to 2 decimal places.

    r1 = 0

    ############ Your code here ############
    ## Note:
    ## 1: You should not use nx.pagerank
    part_1 = sum([r0 / G.degree[neighbor] for neighbor in G.neighbors(node_id)])
    part_2 = (1 - beta) / G.number_of_nodes()
    r1 = beta * part_1 + part_2
    r1 = round(r1, 2)
    ########################################

    return r1

beta = 0.8
r0 = 1 / G.number_of_nodes()
node = 0
r1 = one_iter_pagerank(G, beta, r0, node)
print("The PageRank value for node 0 after one iteration is {}".format(r1))
```

```
[6]
Python
... The PageRank value for node 0 after one iteration is 0.13
```

（4） 获取 karate club network 的边列表并将其转换为 torch.LongTensor.pos_edge_index tensor 的 torch.sum 值是多少? (10 分)

Question 5: 获取karate club network的边列表并将其转换为 `torch.LongTensor`. `pos_edge_index` tensor的 `torch.sum` 值是多少? (10 分)

```python
def graph_to_edge_list(G):
    # TODO: Implement the function that returns the edge list of
    # an nx.Graph. The returned edge_list should be a list of tuples
    # where each tuple is a tuple representing an edge connected
    # by two nodes.

    edge_list = []

    ############ Your code here ############
    edge_list = [edge for edge in G.edges()]
    ########################################

    return edge_list

def edge_list_to_tensor(edge_list):
    # TODO: Implement the function that transforms the edge list to
    # tensor. The input edge_list is a list of tuples and the resulting
    # tensor should have the shape [2, len(edge_list)].

    edge_index = torch.tensor([])

    ############ Your code here ############
    edge_index = torch.tensor(edge_list).t
    ########################################

    return edge_index

pos_edge_list = graph_to_edge_list(G)
pos_edge_index = edge_list_to_tensor(pos_edge_list)
print("The pos_edge_index tensor has shape {}".format(pos_edge_index.shape))
print("The pos_edge_index tensor has sum value {}".format(torch.sum(pos_edge_index)))
```

```
[10]
Python
... The pos_edge_index tensor has shape torch.Size([2, 78])
The pos_edge_index tensor has sum value 2535
```

实现两个函数：graph_to_edge_list 和 edge_list_to_tensor。然后使用这些函数获取 karate club 网络的边列表，并将其转换为 torch.LongTensor 格式的张量。

a) graph_to_edge_list 函数将给定图 G 转换为一个边列表。这个边列表是由图中所有的边组成的，每个边表示为一个包含两个节点的元组。此函数使用 NetworkX 库的 edges() 方法获取图 G 中所有的边，并存储在一个列表中并返回。

b) edge_list_to_tensor 函数将给定的边列表转换为一个 PyTorch 张量。这个函数

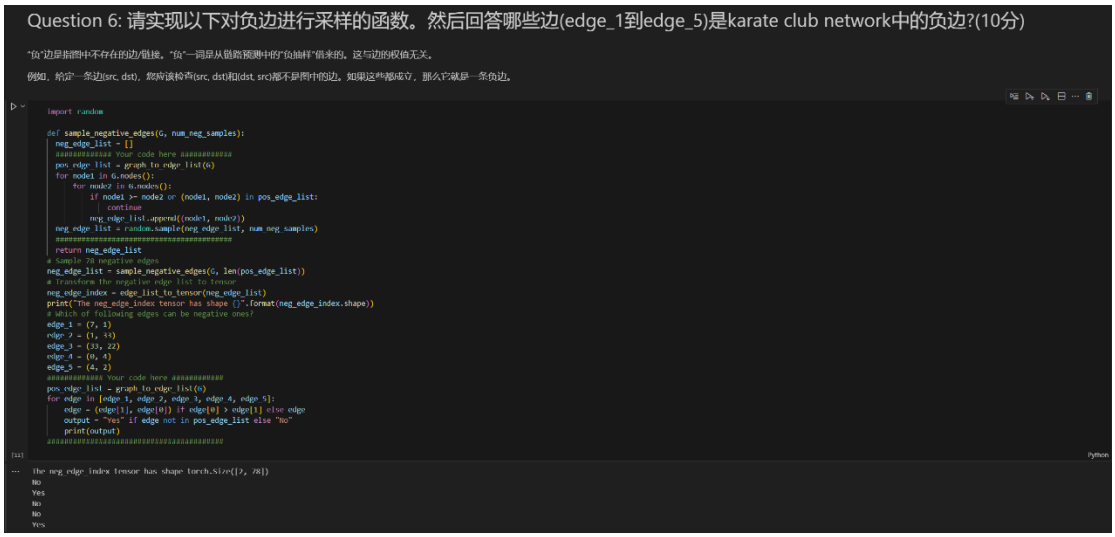
首先创建一个空的张量 edge_index，然后使用 PyTorch 提供的 torch.tensor() 方法将边列表转换为张量。而后使用 .T 方法来转置张量，使得每一列代表一个边，然后每一行代表边的两个节点。最后返回这个转换后的张量。

（5） 请实现以下对负边进行采样的函数。然后回答哪些边(edge_1 到 edge_5)是 karate club network 中的负边?(10 分)

“负”边是指图中不存在的边/链接。“负”一词是从链路预测中的“负抽样”借来的。这与边的权值无关。函数 sample_negative_edges 用于从图中采样负边：

1. 首先通过调用 graph_to_edge_list 函数获取 karate club 网络边列表 pos_edge_list；
2. 接着使用两个嵌套的循环遍历所有节点对，对于每一对节点 (node1, node2)：
   - 如果节点 1 大于等于节点 2，或者边 (node1, node2) 已经存在于正边列表中，则跳过该边；
   - 否则将其添加到负边列表 neg_edge_list 中；
3. 最后，使用 random.sample 方法从负边列表中随机抽样出指定数量的负边。

接下来，对于给定的五个边 (edge_1, edge_2, edge_3, edge_4, edge_5)，我们将它们转换成规范形式，即保证第一个节点的编号小于第二个节点的编号。然后，我们检查它们是否在正边列表中。如果不在正边列表中，则它们就是负边，输出为 "Yes"；否则，输出为 "No"。

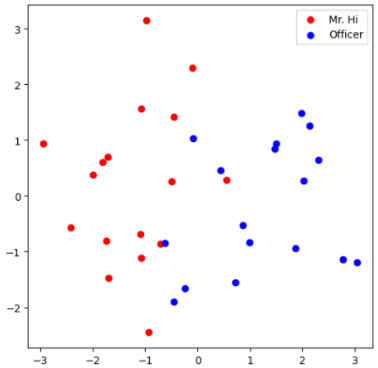


（6） 你能得到的最好表示是什么?请在实验报告上记录最佳损失和准确性。(20 分)

训练 500 个 epochs，训练结果如下：

```
Epoch: 500, Loss: 0.016031766310334206, Acc: 1.0
```

可视化结果如下：



二、 LSTM 搭建与训练

（1） ENZYMES 数据集中的类和特征的数量是多少?(5 分)

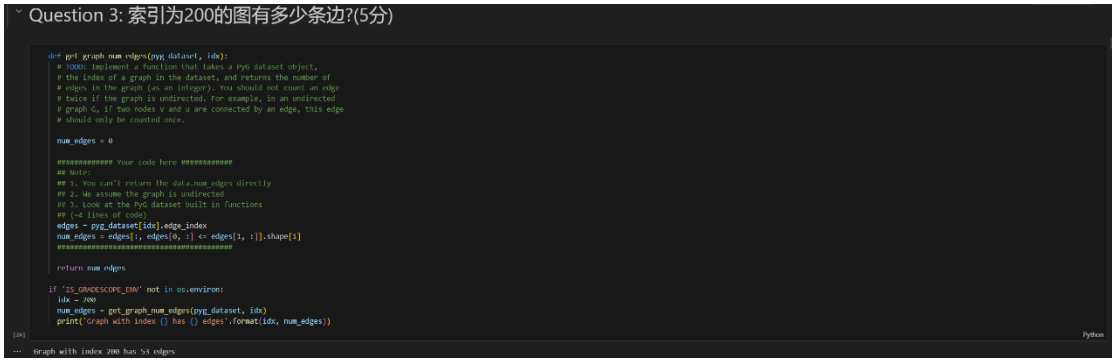
使用 torch_geometric.datasets 的 num_classes 和 num_features 方法查看数据集中的类和特征的数量如下：

（2） 在 ENZYMES 数据集中索引为 100 的图的标签是什么?(5 分)

每个 PyG dataset 都存储一个 torch_geometric.data.Data 列表中的 objects，其中每个 torch_geometric.data.Data object 都表示一个图，我们能轻松通过 dataset 的 index 找到其中的 Data object：

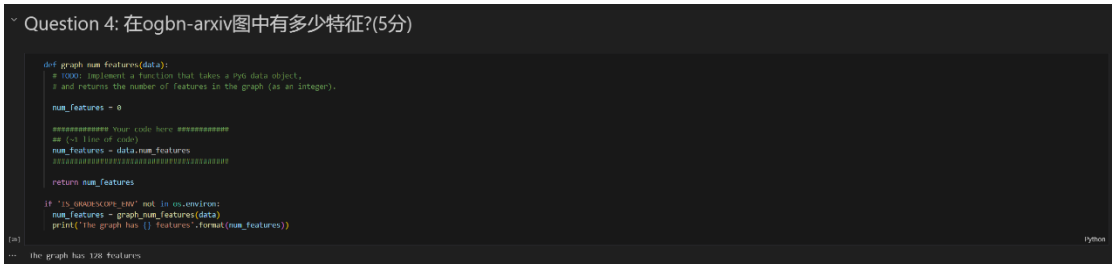
（3） 索引为 200 的图有多少条边?(5 分)

对于无向图而言，我们只需要考虑边索引矩阵中的一半。因此，我们只计算满足 edges[0, :] <= edges[1, :] 条件的边，并将其数量作为图的边数。



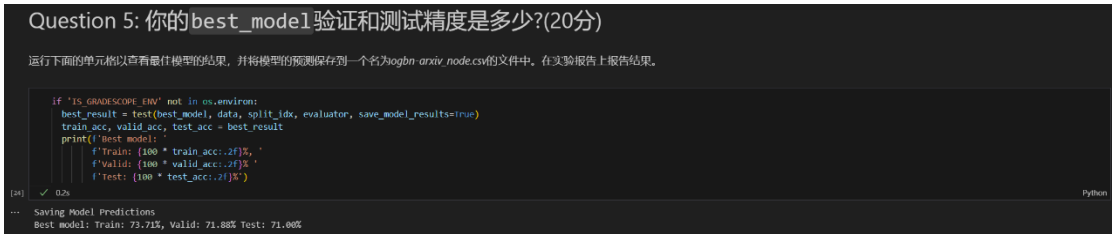
（4） 在 ogbn-arxiv 图中有多少特征?(5 分)

同样使用 torch_geometric.datasets 的 num_features 方法查看数据集中特征数量如下：



（5） 你的 best_model 验证和测试精度是多少?(20 分)

将输出结果与对应标签在验证和测试集上计算正确率如下：



（6） 你的 best_model 验证和测试 ROC-AUC 分数是多少?(20 分)

（7） 在 Pytorch Geometric 中使用另外两个全局池化层进行实验。

修改 self.pool 为 global_max_pool 和 global_add_pool 再进行测试，结果无明显差异，具体准确率如下：

池化层	Train	Valid	Test
global_mean_pool	84.06%	79.56%	75.25%
global_max_pool	85.55%	78.59%	76.10%
global_add_pool	82.30%	80.14%	75.18%

详细训练过程见附件.ipynb 文件