

這段程式碼展示了如何使用 `PyTorch Geometric` 庫來實現圖神經網絡（GNN）模型。以下是主要步驟和意義：

1. **數據集與環境設置**：

- 程式碼使用了 `torch_geometric.datasets` 中的 `QM9` 數據集，該數據集包含了化學分子的結構數據。
- 設定計算設備為 `GPU`（如果可用）以提高計算效率。

2. **模型定義**：

- `ExampleNet` 類定義了一個圖神經網絡模型，使用了 `NNConv` 層來進行圖卷積操作。這些卷積層通過學習節點和邊的特徵來更新節點表示。
- 模型包括了兩層卷積層和兩層全連接層，最終輸出一個預測值。

3. **數據準備**：

- 將 `QM9` 數據集分為訓練集、驗證集和測試集，並使用 `DataLoader` 進行批量處理。

4. **模型訓練與評估**：

- 定義了訓練和驗證的過程，計算每個 `epoch` 的損失值，並進行模型的更新。
- 在訓練過程中，計算模型在驗證集上的表現，並記錄訓練和驗證損失。

5. **模型預測與結果可視化**：

- 使用訓練好的模型在測試集上進行預測，並將預測值與實際值進行比較。
- 使用 `matplotlib` 繪製預測值與實際值之間的散點圖，以評估模型的性能。

6. **進階討論**：

- 提到了一些關於 **GNN** 的進階話題，如頻譜圖卷積、池化技術和正則化，這些可以進一步研究和應用。

這段程式碼展示了如何利用 **PyTorch Geometric** 庫來建立和訓練圖神經網絡，並用於化學分子數據的預測。這為處理複雜的圖結構數據提供了一個實用的範例。