

這段程式碼實作了圖神經網絡（GNN）的基本框架，並展示了如何在 PyTorch 中從頭開始實現一個簡單的圖神經網絡模型。以下是這段程式碼的主要步驟和意義：

1. **導入必要的庫**：

程式碼首先導入了處理圖數據和 PyTorch 的相關庫，如 ``networkx`` 和 ``torch``。

2. **定義圖數據**：

- 使用 ``networkx`` 庫建立了一個圖 ``G``，並為每個節點指定了顏色屬性。
- 計算了圖的鄰接矩陣 ``A`` 和節點的顏色編碼表示 ``X``，以用於後續的模型訓練。

3. **定義基本的圖卷積層**：

- ``BasicGraphConvolutionLayer`` 類實現了圖卷積層，這個層會計算節點間的消息傳遞和更新，並進行矩陣運算。

4. **定義 NodeNetwork 模型**：

- ``NodeNetwork`` 類繼承自 ``torch.nn.Module``，並定義了圖神經網絡的結構，包括兩層圖卷積層和幾個全連接層。

5. **實現全局池化層**：

- ``global_sum_pool`` 函數用來對不同大小的圖進行全局池化操作，將節點特徵進行彙總。

6. **準備數據**：

- 定義了 `collate_graphs` 函數，用於處理批量的圖數據，將它們的特徵矩陣、鄰接矩陣和標籤合併在一起。
- 創建了一個 `ExampleDataset` 類，用於從圖數據中創建 PyTorch 數據集。

7. **訓練和預測**：

- 使用 `DataLoader` 加載數據，並將數據批量送入 `NodeNetwork` 模型進行預測。
- 比較了單個圖的預測結果和批量圖預測結果，以驗證模型的正確性。

這段程式碼展示了如何將圖數據轉換為適合進行深度學習的格式，並在 PyTorch 中構建和訓練圖神經網絡。