

Lab4 GCN

和泳毅 PB19010450

一、实验目标

- 1. 熟悉图卷积神经网络的基本原理
- 2. 了解网络层数对图卷积神经网络性能的影响
- 3. 了解不同激活函数，self loop, DropEdge, PairNorm等技术对图卷积神经网络性能的影响。

二、数据集介绍

Dataset	Nodes	Edges	Classes	Features
Citeseer	3327	4732	6	3703
Cora	2708	5429	7	1433

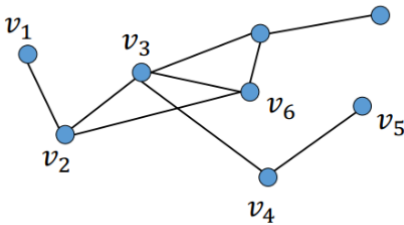
PPI数据集共24张图，平均每张图有2371个节点，共56944个节点818716条边，每个节点特征长度为50，基因本体基作为label(总共121个)，label不是one-hot编码。

三、实验原理

1.图的基本概念

图的矩阵A表示：

- 邻接矩阵 $A_{ij} = 1$ ，如果 v_i 和 v_j 相邻；
- 度矩阵 $D = diag(d(v_1), \dots, d(v_N))$, $d(v_i) = \sum_{v_j \in N_{v_i}} A_{ij}$ 。



度矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

D

邻接矩阵

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

A

拉普拉斯矩阵的性质 $L = D - A$:

- $LI = DI - AI = d - d = 0$
- $IL = 0$
- L 是半正定的, 最小特征值为0, 其特征向量为1

归一化后的拉普拉斯矩阵:

- 对称归一化: $L^{sym} = D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}$
- 随机游走归一化: $L^{rw} = D^{-1} L$

$$\begin{array}{ccc}
 \text{度矩阵} & \text{邻接矩阵} & \text{拉普拉斯矩阵} \\
 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{D} & \mathbf{A} & \mathbf{L}
 \end{array}$$

2.图傅里叶变换

$L = U \Lambda U^T$ 为其特征值分解, U 的列向量类比于傅里叶变换中的基。

对图上信号 z 的图傅里叶变换:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}(\lambda_l) = \hat{f}(\lambda_l) &= \sum_{i=1}^n f(i) u_l(i) = \mathbf{u}_l^T \mathbf{f} \\
 \begin{pmatrix} \hat{f}(\lambda_1) \\ \hat{f}(\lambda_2) \\ \vdots \\ \hat{f}(\lambda_N) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1(1) & \mathbf{u}_1(2) & \dots & \mathbf{u}_1(N) \\ \mathbf{u}_2(1) & \mathbf{u}_2(2) & \dots & \mathbf{u}_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{u}_N(1) & \mathbf{u}_N(2) & \dots & \mathbf{u}_N(N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(1) \\ f(2) \\ \vdots \\ f(N) \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{f}} = \mathbf{U}^T \mathbf{f}
 \end{aligned}$$

3.图傅里叶逆变换

$L = U \Lambda U^T$ 为其特征值分解, U 的列向量类比于傅里叶变换中的基。

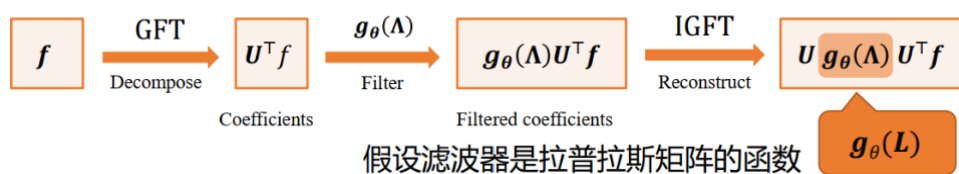
对图上信号 z 的图傅里叶逆变换:

$$\begin{aligned}
 f(i) &= \sum_{l=1}^n \hat{f}(\lambda_l) u_l(i) = \mathbf{u}(i)^T \hat{\mathbf{f}} \\
 \begin{pmatrix} f(1) \\ f(2) \\ \vdots \\ f(N) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1(1) & \mathbf{u}_2(1) & \dots & \mathbf{u}_N(1) \\ \mathbf{u}_1(2) & \mathbf{u}_2(2) & \dots & \mathbf{u}_N(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{u}_1(N) & \mathbf{u}_2(N) & \dots & \mathbf{u}_N(N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{f}(\lambda_1) \\ \hat{f}(\lambda_2) \\ \vdots \\ \hat{f}(\lambda_N) \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{f} = \mathbf{U} \hat{\mathbf{f}}
 \end{aligned}$$

任一信号 \mathbf{f} 是不同频率的特征向量的组合

4. 多项式卷积核

局部化：\$L\$ 对图信号 \$f\$ 的操作 \$L f\$ 相当于在图上传播一步



多项式卷积核：

$$g_\theta(\Lambda) = \sum_{k=0}^K \theta_k \Lambda^k$$

$$\hat{g}(\Lambda) = \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^K \theta_k \lambda_1^k & & & \\ & \sum_{k=0}^K \theta_k \lambda_2^k & & \\ & & \dots & \\ & & & \sum_{k=0}^K \theta_k \lambda_N^k \end{bmatrix}$$

切比雪夫多项式，通过如下递归定义：

- $T_0(x) = 1; T_1(x) = x$
- $T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x)$

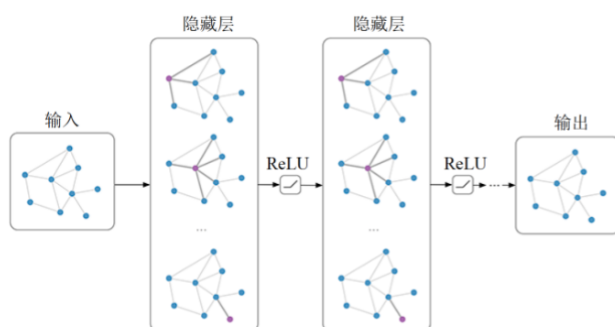
$$\hat{g}(\Lambda) = \sum_{k=0}^K \theta_k T_k(\tilde{\Lambda}) \quad \text{其中 } \tilde{\Lambda} = \frac{2\Lambda}{\lambda_{\max}} - I$$

$$U \hat{g}(\Lambda) U^T f = \sum_{k=0}^K \theta_k T_k(\tilde{L}) f, \quad \text{其中 } \tilde{L} = \frac{2L}{\lambda_{\max}} - I$$

5. GCN

叠加多层GCN得到最终的模型(常取两层)：

$$\hat{Y} = f(X, A) = \text{Softmax} \left(\hat{A} \text{ReLU}(\hat{A} X W^0) W^1 \right)$$



其中

$$\hat{A} = \tilde{D}^{-\frac{1}{2}} \tilde{A} \tilde{D}^{-\frac{1}{2}}$$

$$\tilde{A} = A + I_n$$

$$\tilde{D}_{ii} = \sum_j \tilde{A}_{ij}$$

四、核心代码

网络用多层GCN模块堆叠而成：

```
1 class GCNBlock(nn.Module):
2     def __init__(self, in_feats, out_feats, activation=None,
3 pair_norm=False, add_self_loops=False, drop_edge=0):
4         super(GCNBlock, self).__init__()
5         # self.conv = SAGEConv(in_feats, out_feats, 'mean')
6         self.conv = GraphConv(in_feats, out_feats)
7         self.droptedge = DropEdge(p=drop_edge)
8         self.self_loops = AddSelfLoop()
9         self.norm = PairNorm()
10        self.activation = activation
11        self.pair_norm = pair_norm
12        self.add_self_loops = add_self_loops
13        self.drop_edge = drop_edge
14
15    def forward(self, g, in_feat):
16        if self.drop_edge:
17            g = self.droptedge(g)
18            self.add_self_loops = True
19        if self.add_self_loops:
20            g = self.self_loops(g)
21        h = self.conv(g, in_feat)
22        if self.pair_norm:
23            h = self.norm(h)
24        if self.activation:
25            h = self.activation(h)
26        return h
27
28 class GCN(nn.Module):
29     def __init__(self, in_feats, n_hidden, n_classes, n_layers,
30 activation, dropout=0.,
31 pair_norm=False, add_self_loops=False,
32 drop_edge=0):
33         super(GCN, self).__init__()
34         if dropout:
35             self.dropout = nn.Dropout(p=dropout)
36         else:
37             self.dropout = 0.
38         self.layers = nn.ModuleList()
39         # input layer
40         self.layer1 = GCNBlock(in_feats, n_hidden, activation,
41 pair_norm=pair_norm, add_self_loops=add_self_loops,
42 drop_edge=drop_edge)
43         self.layers = nn.ModuleList()
44         # hidden layers
45         for i in range(n_layers - 1):
```

```

41         self.layers.append(GCNBlock(n_hidden, n_hidden,
activation, pair_norm=pair_norm, add_self_loops=add_self_loops,
drop_edge=drop_edge))
42         # output layer
43         self.layers.append(GCNBlock(n_hidden, n_classes,
activation=None,
pair_norm=pair_norm, add_self_loops=add_self_loops, drop_edge=drop_e
dge))
44
45     def forward(self, g, features):
46         h = self.layer1(g, features)
47         for idx, layer in enumerate(self.layers):
48             if idx > 0 and self.dropout:
49                 h = self.dropout(h)
50                 h = layer(g, h)
51             if self.dropout:
52                 h = self.dropout(h)
53         return h

```

五、实验结果

1. Node Classification

节点分类任务中，cora数据集和citeseer数据集是multi-class，用正确率作为评价指标，ppi数据集为multi-label，用F1指标作为评价指标。并且对于ppi数据集，采用20张图片作训练，2张图片作验证，2张图片作测试。

add_self_loop

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.836
cora	False	1	0.0	False	relu	0.811
cora	True	3	0.0	False	relu	0.817
cora	False	3	0.0	False	relu	0.798
cora	True	5	0.0	False	relu	0.807
cora	False	5	0.0	False	relu	0.791

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.703
citeseer	False	1	0.0	False	relu	0.660
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.692
citeseer	False	3	0.0	False	relu	0.674
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.676
citeseer	False	5	0.0	False	relu	0.624

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_f1
ppi	True	1	0.0	False	relu	0.895
ppi	False	1	0.0	False	relu	0.894
ppi	True	3	0.0	False	relu	0.923
ppi	False	3	0.0	False	relu	0.921
ppi	True	5	0.0	False	relu	0.962
ppi	False	5	0.0	False	relu	0.958

对于三个数据集，添加self_loop后的效果都要更好。

网络层数

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.836
cora	True	2	0.0	False	relu	0.823
cora	True	3	0.0	False	relu	0.817
cora	True	5	0.0	False	relu	0.807
cora	True	10	0.0	False	relu	0.707

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.703
citeseer	True	2	0.0	False	relu	0.696
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.688
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.676
citeseer	True	10	0.0	False	relu	0.551

对cora和citeseer数据集来说，浅层的网络效果要略好。

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_f1
ppi	True	1	0.0	False	relu	0.895
ppi	True	2	0.0	False	relu	0.870
ppi	True	3	0.0	False	relu	0.923
ppi	True	5	0.0	False	relu	0.962
ppi	True	10	0.0	False	relu	0.944

对ppi数据集来说，5层的效果要显著更好。

drop edge

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.836
cora	True	1	0.1	False	relu	0.728
cora	True	1	0.2	False	relu	0.666
cora	True	1	0.5	False	relu	0.619
cora	True	3	0.0	False	relu	0.817
cora	True	3	0.1	False	relu	0.648
cora	True	3	0.2	False	relu	0.640
cora	True	3	0.5	False	relu	0.575

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.703
citeseer	True	1	0.1	False	relu	0.652
citeseer	True	1	0.2	False	relu	0.605
citeseer	True	1	0.5	False	relu	0.585
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.688
citeseer	True	3	0.1	False	relu	0.604
citeseer	True	3	0.2	False	relu	0.581
citeseer	True	3	0.5	False	relu	0.562

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_f1
ppi	True	1	0.0	False	relu	0.895
ppi	True	1	0.1	False	relu	0.844
ppi	True	1	0.2	False	relu	0.808
ppi	True	1	0.5	False	relu	0.731
ppi	True	3	0.0	False	relu	0.923
ppi	True	3	0.1	False	relu	0.866
ppi	True	3	0.2	False	relu	0.827
ppi	True	3	0.5	False	relu	0.758

drop_edge在三个数据集上都没有明显的效果。

PairNorm

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.836
cora	True	1	0.0	True	relu	0.779
cora	True	3	0.0	False	relu	0.817
cora	True	3	0.0	True	relu	0.761
cora	True	5	0.0	False	relu	0.807
cora	True	5	0.0	True	relu	0.772

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.703
citeseer	True	1	0.0	True	relu	0.691
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.688
citeseer	True	3	0.0	True	relu	0.682
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.676
citeseer	True	5	0.0	True	relu	0.678

在cora和citeseer数据集上，pair_norm没有提升模型效果。

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_f1
ppi	True	1	0.0	False	relu	0.895
ppi	True	1	0.0	True	relu	0.732
ppi	True	3	0.0	False	relu	0.923
ppi	True	3	0.0	True	relu	0.919
ppi	True	5	0.0	False	relu	0.962
ppi	True	5	0.0	True	relu	0.966

在ppi数据集上，pair_norm使得模型效果有了一定的提升。

激活函数

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.836
cora	True	1	0.0	False	tanh	0.823
cora	True	1	0.0	False	sigmoid	0.751
cora	True	3	0.0	False	relu	0.817
cora	True	3	0.0	False	tanh	0.815
cora	True	3	0.0	False	sigmoid	0.319
cora	True	5	0.0	False	relu	0.807
cora	True	5	0.0	False	tanh	0.798
cora	True	5	0.0	False	sigmoid	0.319

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.703
citeseer	True	1	0.0	False	tanh	0.690
citeseer	True	1	0.0	False	sigmoid	0.677
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.688
citeseer	True	3	0.0	False	tanh	0.695
citeseer	True	3	0.0	False	sigmoid	0.275
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.676
citeseer	True	5	0.0	False	tanh	0.663
citeseer	True	5	0.0	False	sigmoid	0.253

在cora和citeseer数据集上， $\text{relu} \approx \text{tanh} > \text{sigmoid}$ 。

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
ppi	True	1	0.0	False	relu	0.895
ppi	True	1	0.0	False	tanh	0.900
ppi	True	1	0.0	False	sigmoid	0.890
ppi	True	3	0.0	False	relu	0.923
ppi	True	3	0.0	False	tanh	0.940
ppi	True	3	0.0	False	sigmoid	0.750
ppi	True	5	0.0	False	relu	0.958
ppi	True	5	0.0	False	tanh	0.984
ppi	True	5	0.0	False	sigmoid	0.424

但在ppi数据集上， $\text{tanh} > \text{relu} > \text{sigmoid}$ 。

best result

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_acc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.836
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.703

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_f1
ppi	True	5	0.0	False	tanh	0.984

2.Link Prediction

链路预测任务中，采用AUC作为评价指标。由于ppi数据集训练时间过长，仅采用cora和citeseer对比不同技术的效果，并且对于ppi数据集取5张图片来测试效果。

add_self_loop

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.939
cora	False	1	0.0	False	relu	0.945
cora	True	3	0.0	False	relu	0.943
cora	False	3	0.0	False	relu	0.960
cora	True	5	0.0	False	relu	0.937
cora	False	5	0.0	False	relu	0.953

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.962
citeseer	False	1	0.0	False	relu	0.920
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.958
citeseer	False	3	0.0	False	relu	0.924
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.964
citeseer	False	5	0.0	False	relu	0.962

对于两个数据集，添加self_loop后的效果都要更好。

网络层数

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.945
cora	True	2	0.0	False	relu	0.945
cora	True	3	0.0	False	relu	0.960
cora	True	5	0.0	False	relu	0.953
cora	True	10	0.0	False	relu	0.896

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.962
citeseer	True	2	0.0	False	relu	0.957
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.958
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.964
citeseer	True	10	0.0	False	relu	0.963

对于两个数据集，中浅层的网络效果不错。

drop edge

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.945
cora	True	1	0.1	False	relu	0.892
cora	True	1	0.2	False	relu	0.900
cora	True	1	0.5	False	relu	0.896
cora	True	3	0.0	False	relu	0.960
cora	True	3	0.1	False	relu	0.909
cora	True	3	0.2	False	relu	0.896
cora	True	3	0.5	False	relu	0.894

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.962
citeseer	True	1	0.1	False	relu	0.950
citeseer	True	1	0.2	False	relu	0.932
citeseer	True	1	0.5	False	relu	0.917
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.958
citeseer	True	3	0.1	False	relu	0.919
citeseer	True	3	0.2	False	relu	0.899
citeseer	True	3	0.5	False	relu	0.901

对于两个数据集，drop edge都没有起到很好的效果。

PairNorm

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.945
cora	True	1	0.0	True	relu	0.953
cora	True	3	0.0	False	relu	0.960
cora	True	3	0.0	True	relu	0.954
cora	True	5	0.0	False	relu	0.953
cora	True	5	0.0	True	relu	0.946

对于cora数据集，pair_norm的效果一般。

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
citeseer	True	1	0.0	False	relu	0.962
citeseer	True	1	0.0	True	relu	0.966
citeseer	True	3	0.0	False	relu	0.958
citeseer	True	3	0.0	True	relu	0.971
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.964
citeseer	True	5	0.0	True	relu	0.958

而对于citeseer数据集，pair_norm的添加使得模型有了明显的提升。

激活函数

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
cora	True	1	0.0	False	relu	0.945
cora	True	1	0.0	False	tanh	0.952
cora	True	1	0.0	False	sigmoid	0.755
cora	True	3	0.0	False	relu	0.960
cora	True	3	0.0	False	tanh	0.963
cora	True	3	0.0	False	sigmoid	0.603
cora	True	5	0.0	False	relu	0.953
cora	True	5	0.0	False	tanh	0.951
cora	True	5	0.0	False	sigmoid	0.584

在cora数据集上，relu≈tanh>sigmoid。

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
citeseer	True	1	0.0	True	relu	0.966
citeseer	True	1	0.0	True	tanh	0.990
citeseer	True	1	0.0	True	sigmoid	0.988
citeseer	True	3	0.0	True	relu	0.971
citeseer	True	3	0.0	True	tanh	0.981
citeseer	True	3	0.0	True	sigmoid	0.980
citeseer	True	5	0.0	False	relu	0.964
citeseer	True	5	0.0	False	tanh	0.969
citeseer	True	5	0.0	False	sigmoid	0.973

在citeseer数据集上, tanh>relu>sigmoid。

best result

data_name	add_self_loop	n_layers	drop_edge	pair_norm	activations	test_auc
cora	True	3	0.0	False	tanh	0.963
citeseer	True	1	0.0	True	tanh	0.990
ppi	True	3	0.0	False	relu	0.871

六、实验总结

本次实验了解的图神经网络的原理，以及学会了使用DGL，并对比了不同激活函数，self loop, DropEdge, PairNorm等技术对图卷积神经网络性能的影响。