《SEMI-SUPERVISED CLASSIFICATION WITH GRAPH CONVOLUTIONAL NETWORKS》

《基于图卷积网络的半监督分类》

**摘要：**

1. **本文的背景：**由于卷积神经网络（convolutional neural network, CNN）在深度学习领域取得了很大成功，因此研究者们迫切希望也能够在图上定义卷积运算。而在本文此之前，已经有大量图卷积处理的方法被提出，如Spectral Network、ChebNet，它们为本文提供了坚实的理论基础。
2. **本文的贡献：**进一步简化了基于谱分解相关方法的图卷积公式，使其能够更好地与神经网络结合，并且本篇论文正式开启了基于图卷积神经网络的应用潮。
3. **主要创新点：**1）GCN通过谱图卷积（spectral graph convolutions）的局部一阶近似来确定卷积网络的结构；2）GCN模型能够学习隐藏层表示，而这些表示既编码了局部图结构，也编码了节点特征；3）通过图结构数据中部分有标签的节点数据对GCN模型的训练，使模型能够对其余无标签的数据进行进一步分类。
4. **实验结果：**在对大量关于引用网络和知识图谱网络数据集进行对比实验后，研究者发现GCN模型的有效性显著优于其他图学习方法。

**背景知识——谱图卷积：**

（1）Spectral graph convolutions(第一代卷积公式)：

其中，为图节点的特征向量，；，为图卷积核；为待训练参数；为图的归一化拉普拉斯矩阵的特征向量矩阵，而归一化拉普拉斯矩阵。【其中，为单位矩阵，和分别为图的度矩阵、邻接矩阵和特征值的对角矩阵。】

**但由于这个公式的计算太过复杂，且卷积核的选取并不合适，需要改进。**

（2）Chebyshev polynomials(第二代卷积公式)：

2011年，David Hammond等人提出可以用切比雪夫多项式的前K阶来逼近，因此有了如上公式。【<https://zhuanlan.zhihu.com/p/106687580> 相关公式推导参考】其中，，是的最大特征值，是切比雪夫多项式系数组成的向量。而切比雪夫多项式的定义为：

其中，，。而由于上述公式是拉普拉斯矩阵的K阶多项式，所以上述的卷积公式运算也是K阶局部化的。

**该方法的好处在于省去了计算拉普拉斯矩阵特征向量的过程。**

**基于图的卷积公式：**

本文在上述理论的基础上做出了进一步优化，主要改进有：

1. 将层级卷积运算的限制为1，以此来缓解模型在节点的度分布范围较大的图上存在的局部结构过拟合问题；
2. 进一步假定来简化公式。因此，可将上述公式化简为：

其中，和为可调节参数。

1. 对参数和做出进一步限制，使得，因此上述公式又可简化为：
2. 注意，在节点上迭代执行上述运算时可能会导致数值不稳定和梯度爆炸或梯度消失问题，因此为了解决这些问题，进一步引入**重归一化操作**，使得：

其中，，。

1. 最后，将该定义推广到具有个输入通道（即每个节点的维特征向量）的信号和个滤波器上，则特征映射（feature maps）如下：

其中，是卷积核参数矩阵，是卷积后的信号矩阵。

**Graph中的快速近似卷积：**

在定义了上述卷积运算后，我们就能构造出具有以下分层传播规则的**多层图形卷积网络（GCN）**：

其中，为无向图G的带自环邻接矩阵，为单位矩阵，，为layer-specific的可训练权重向量，为激活函数，为第层的激活矩阵，而。

**半监督节点分类**

**对于本文的感悟：**

总的来说，Node2Vec是在DeepWalk的基础上发展出来的，并且成功地解决了DeepWalk所存在的一些缺陷，而这些有效的改进离不开作者们敏锐的洞察力和深入浅出的思考。从整体来看，Node2Vec仅仅是对DeepWalk做出了一点优化，但优化的效果却好的出人意料。或许论文的创新点就是这样，不断地在前人的基础上发掘问题，解决问题，乃至更近一步、产生质变。