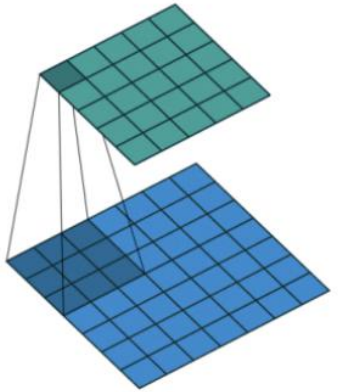
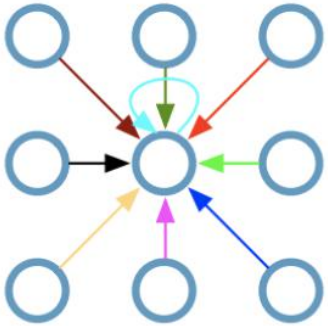
# GCN

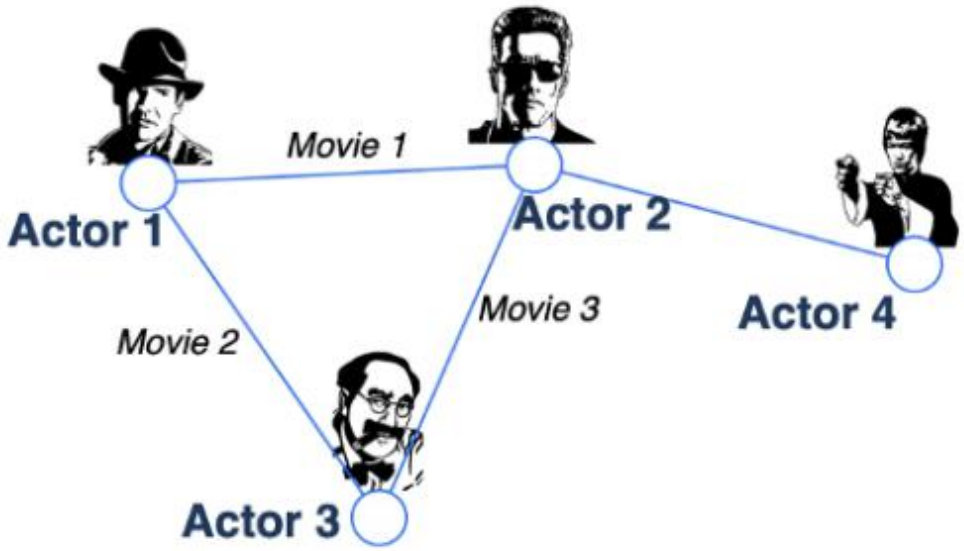
- 第一件事，图卷积与卷积有啥不同？
  - 看起来好像都是利用周围的特征
  - 但是在图中每个点的邻居是不确定的

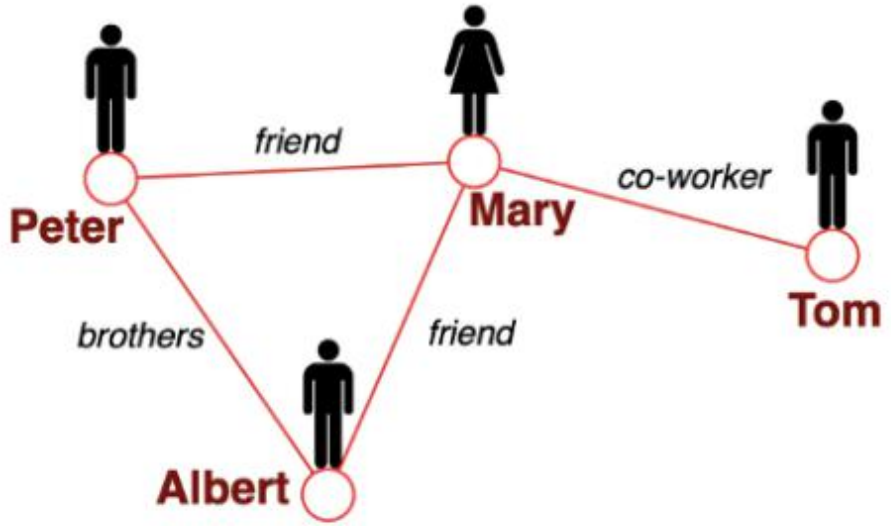


Image



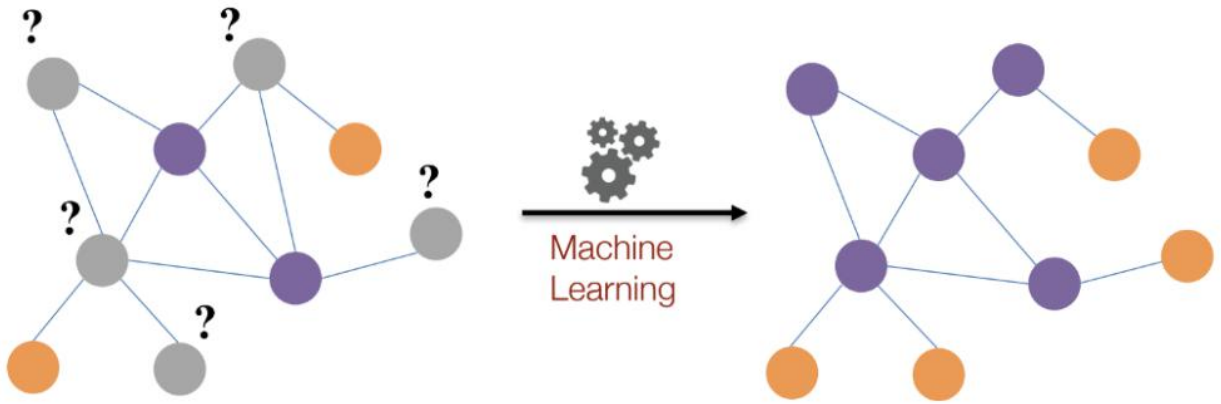
Graph



# GCN

- 图中常见任务
  - 节点分类，对每个节点进行预测，不同点是否有连接预测
  - 整个图分类，部分图分类等，不同子图是否相似，异常检测等
  - GCN归根到底还是要完成特征提取操作，只不过输入对象不是固定格式

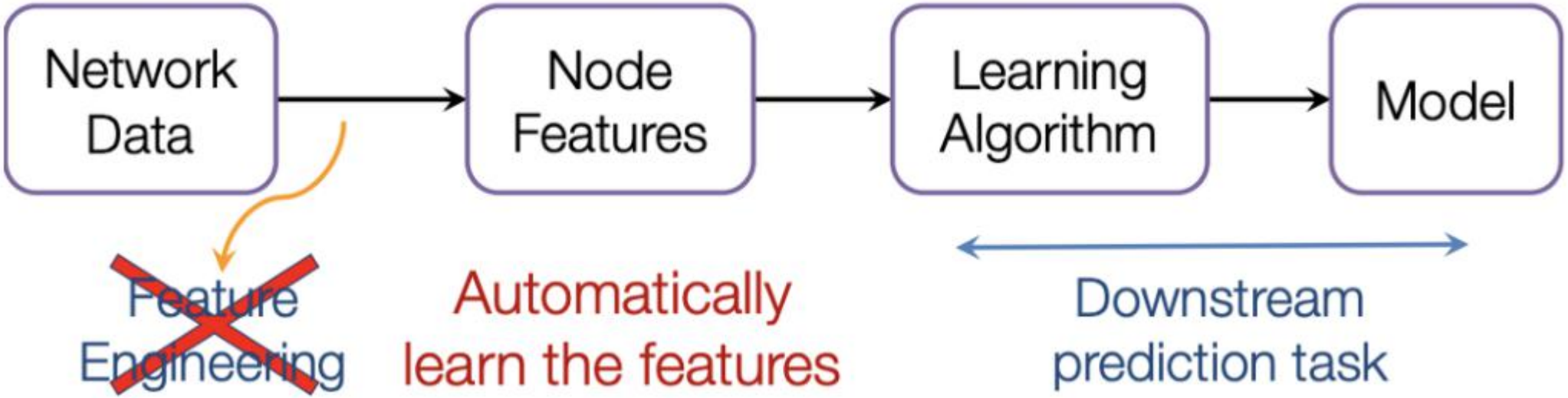


# GCN

- 如何获取特征呢?

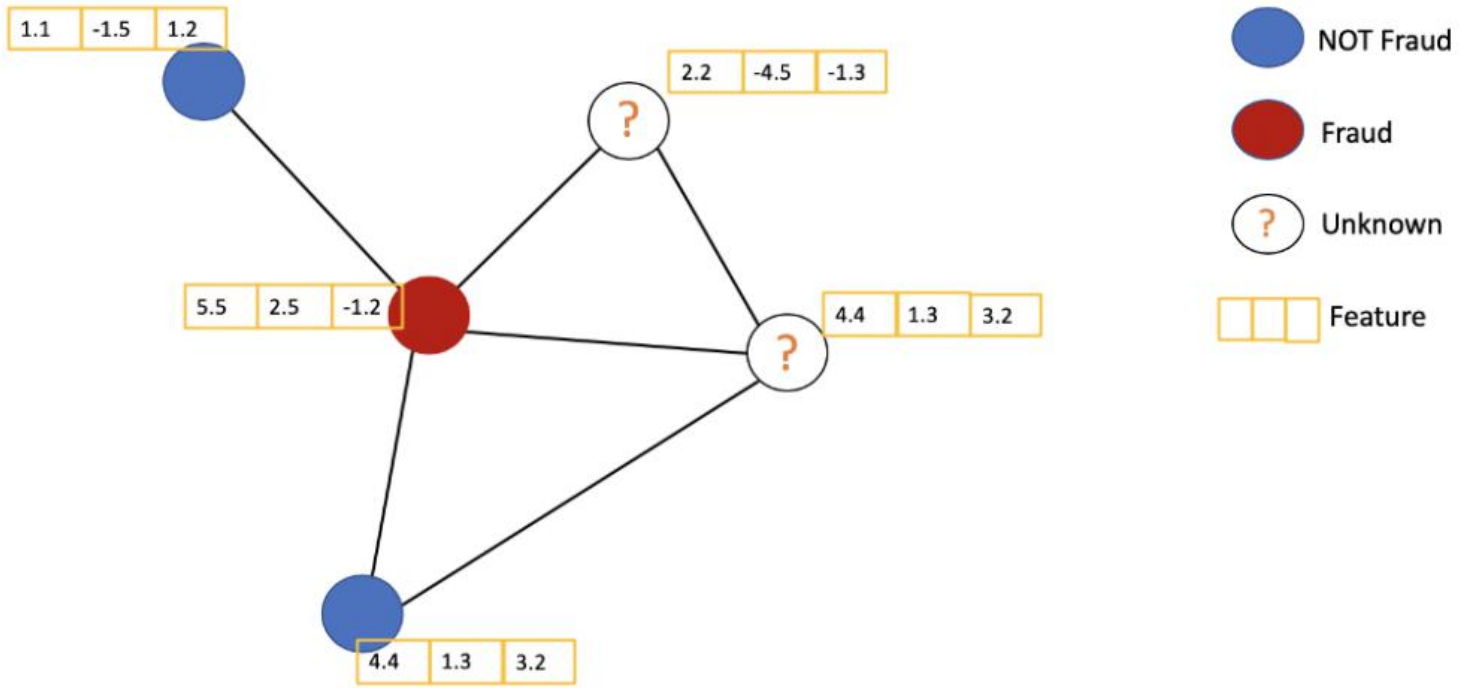
- 别再绞尽脑汁各种套路一顿想了，交给神经网络神经网络就得了

- 通常交给GCN两个东西就行：1.各节点输入特征；2.网络结构图



# GCN

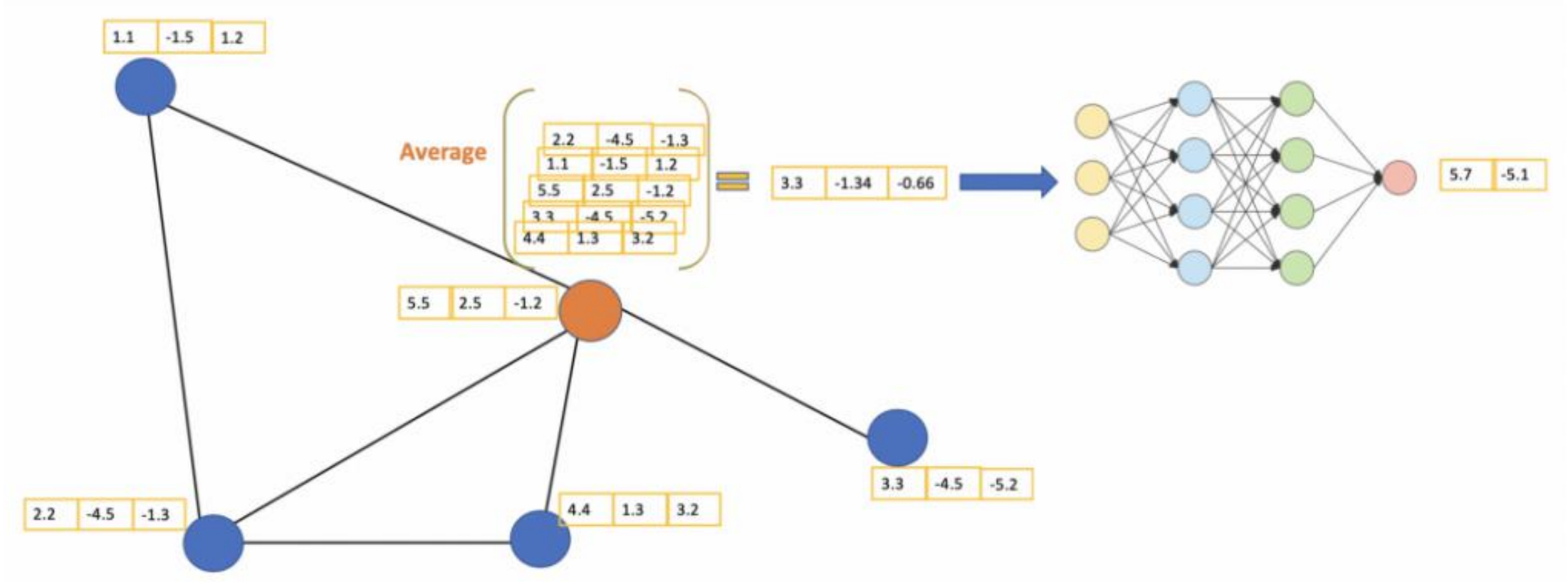
- Semi-supervised learning
  - 这个也是GCN优势
  - 不需要全部标签
  - 用少量标签也能训练
  - 计算损失时只用有标签的



# GCN

## GCN的基本思想

针对橙色节点，计算它的特征：平均其邻居特征(包括自身)后传入神经网络

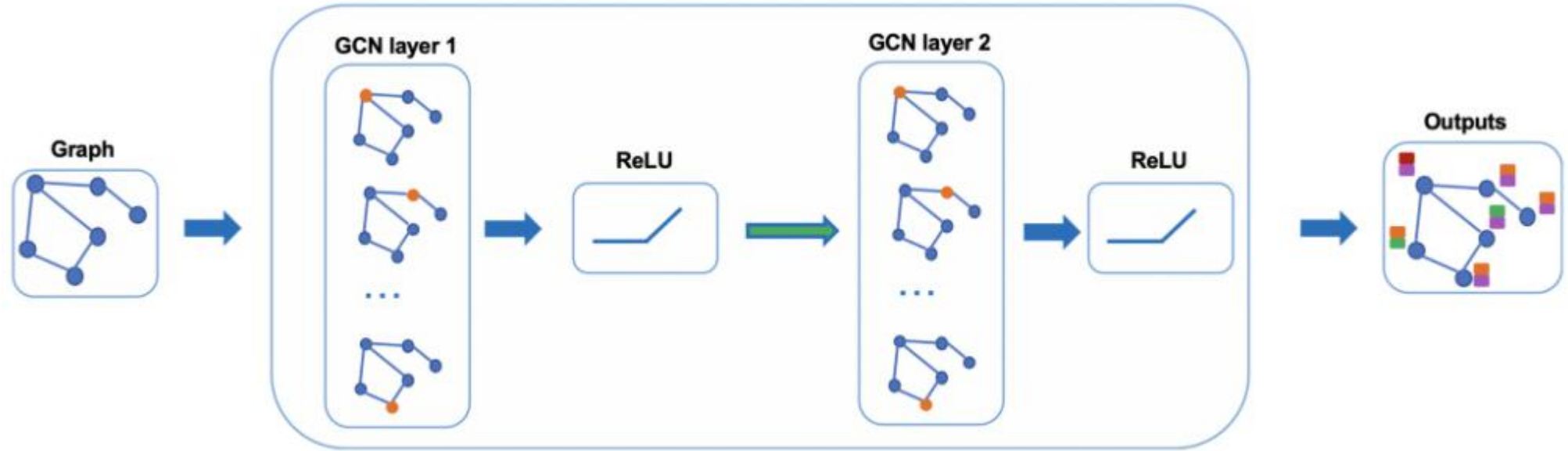


# GCN

- 网络层数

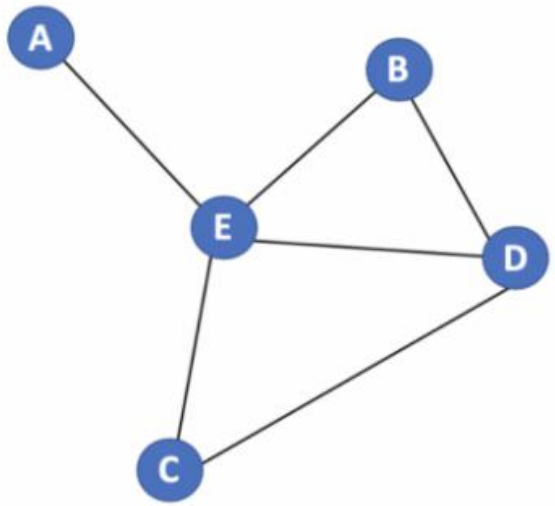
  - 这个跟卷积类似，GCN也可以做多层，每一层输入的还是节点特征

  - 然后将当前特征与网络结构图继续传入下层就可以不断算下去了



# GCN

- 图中基本组成
  - G就是咱们的图
  - A是邻接矩阵
  - D是各个节点的度
  - F是每个节点的特征




Graph $G$

| | A | B | C | D | E |
|---|---|---|---|---|---|
| A | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| B | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| C | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| D | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 |
| E | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 |

Adjacency matrix $A$

| | A | B | C | D | E |
|---|---|---|---|---|---|
| A | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| B | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| C | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 |
| D | 0 | 0 | 0 | 3 | 0 |
| E | 0 | 0 | 0 | 0 | 4 |

Degree matrix $D$

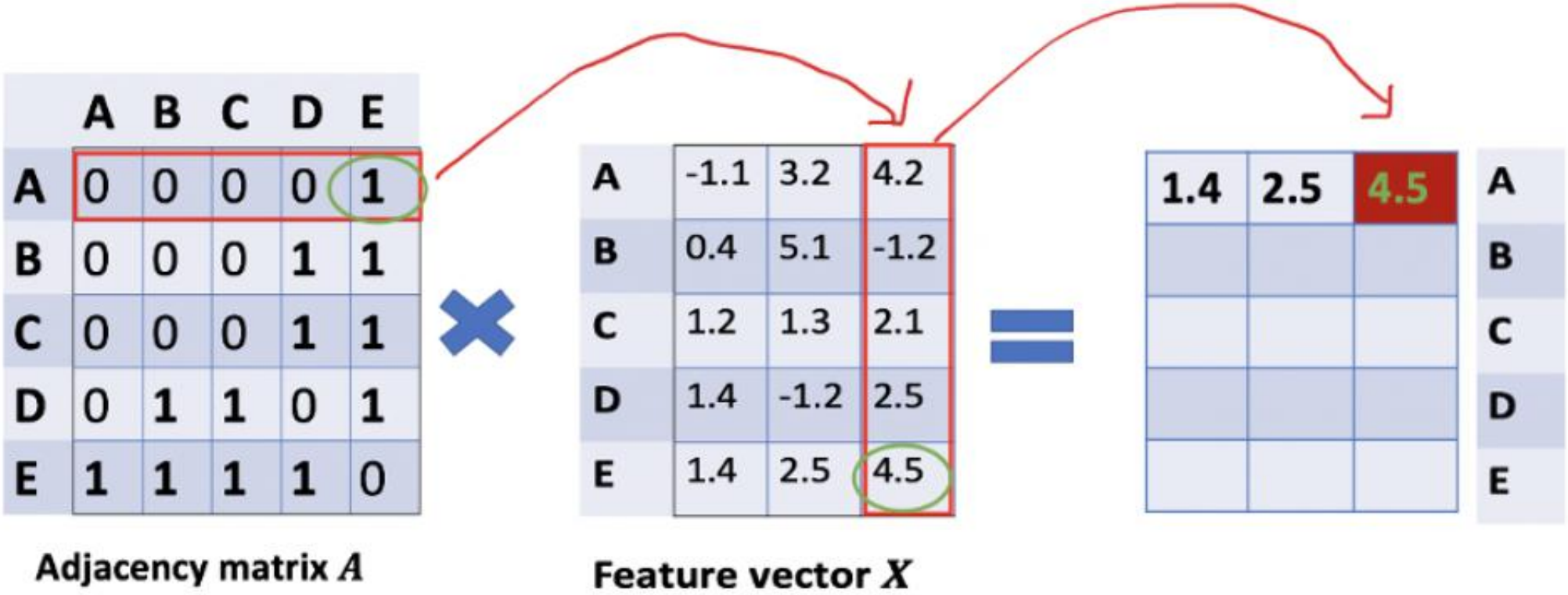
| | | | |
|---|---|---|---|
| A | -1.1 | 3.2 | 4.2 |
| B | 0.4 | 5.1 | -1.2 |
| C | 1.2 | 1.3 | 2.1 |
| D | 1.4 | -1.2 | 2.5 |
| E | 1.4 | 2.5 | 4.5 |

Feature vector $X$

# GCN

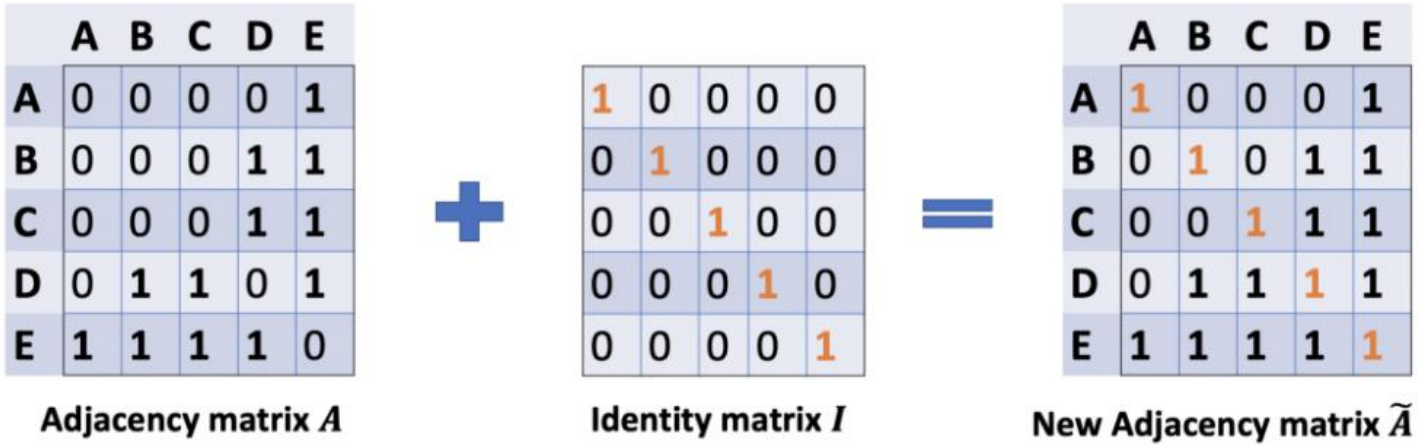
## 特征计算方法

其实就是邻接矩阵与特征矩阵进行乘法操作，表示聚合邻居信息



# GCN

- 一点小问题
  - 光想着别人，没考虑自己呢：$\tilde{A} = A + \lambda I_N$
  - 只需要在邻接矩阵中
  - 加上自己就可以啦
  - 但是还有木有啥问题呢？



| | A | B | C | D | E |
|---|---|---|---|---|---|
| A | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| B | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| C | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| D | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 |
| E | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 |

Adjacency matrix $A$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |

Identity matrix $I$

| | A | B | C | D | E |
|---|---|---|---|---|---|
| A | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| B | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 |
| C | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 |
| D | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| E | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |

New Adjacency matrix $\tilde{A}$

# GCN

- 度矩阵也要变一变

- 其实就是对度矩阵进行 $\tilde{D}^{-1}$ 这样就相当于平均的感觉了

| | A | B | C | D | E |
|---|---|---|---|---|---|
| A | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| B | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 |
| C | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 |
| D | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| E | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |

***New adjacency matrix*** $\tilde{A}$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 3 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 4 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 5 |

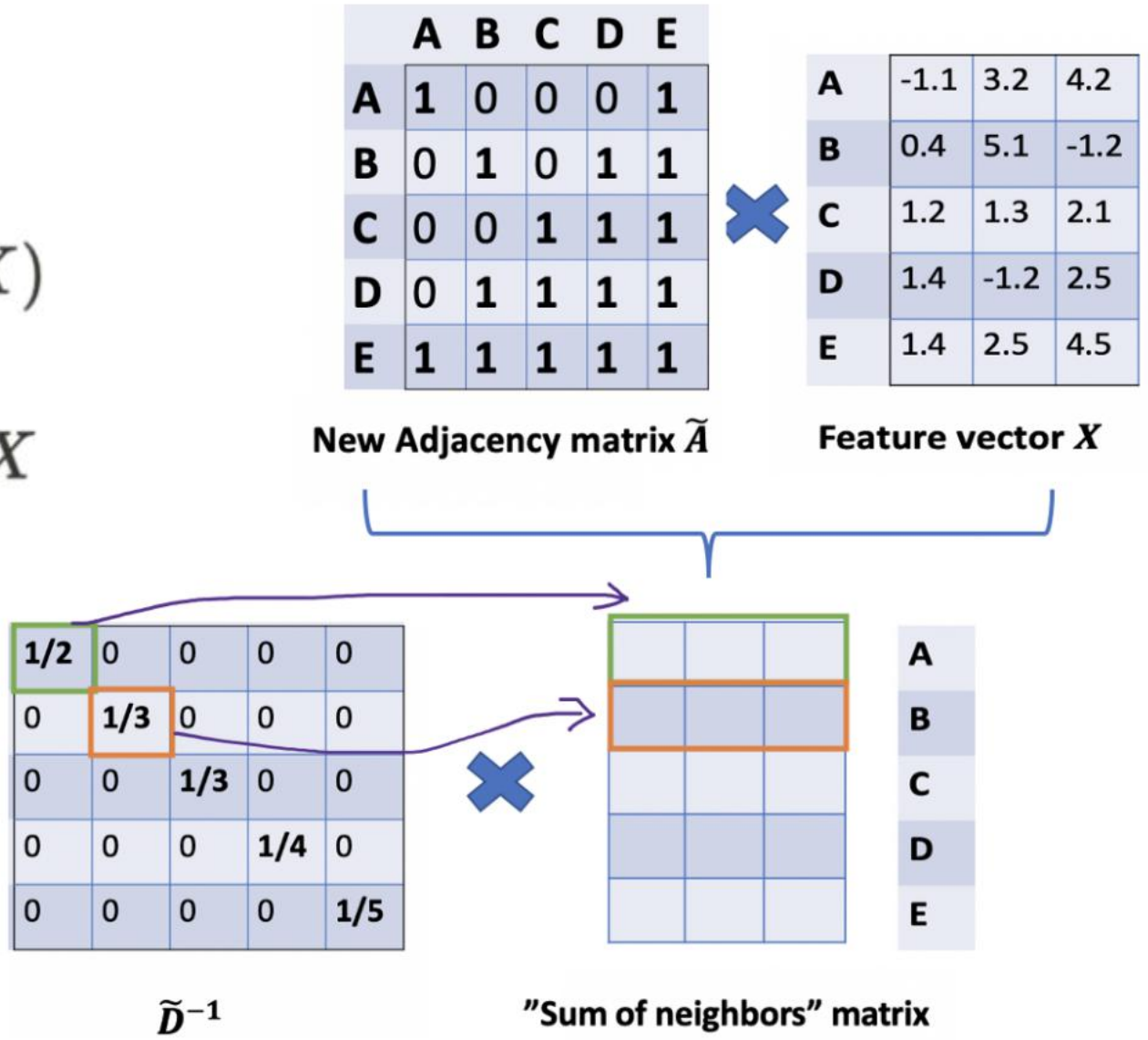
New degree matrix $\tilde{D}$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1/2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1/3 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 1/3 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 1/4 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 1/5 |

$\tilde{D}^{-1}$

# GCN

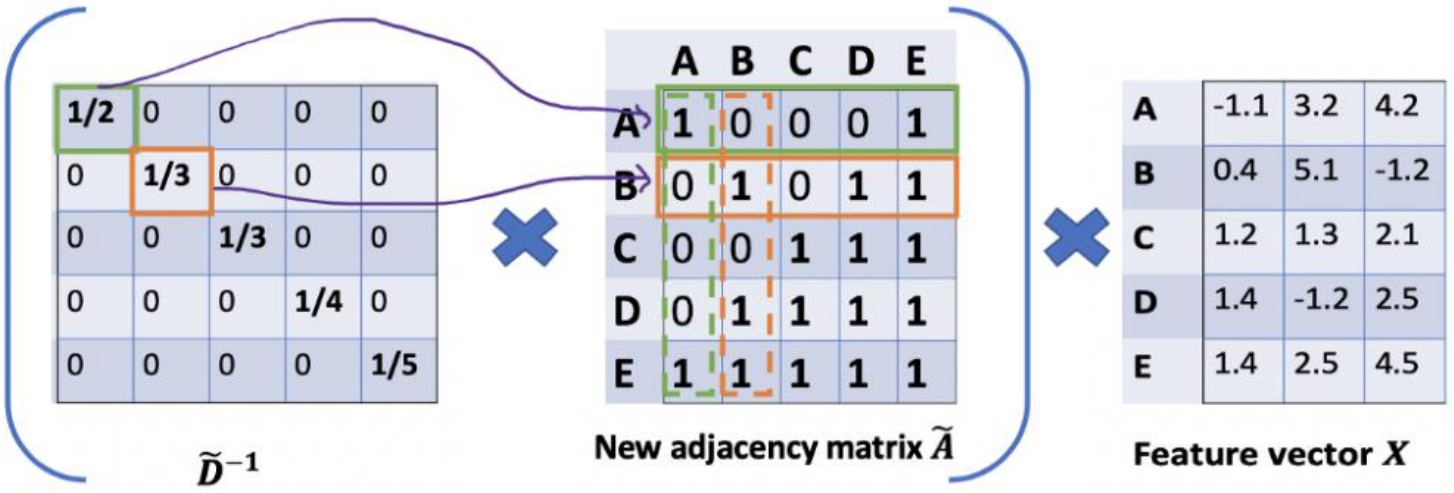
- 矩阵scale
  - 目前公式变成这样了：$\tilde{D}^{-1}(\tilde{A}X)$
  - 乘法嘛，也可以这样：$(\tilde{D}^{-1}\tilde{A})X$
  - 所以 $\tilde{D}^{-1}$ 就相当于scale方法了
  - 但是这一步就够了吗？

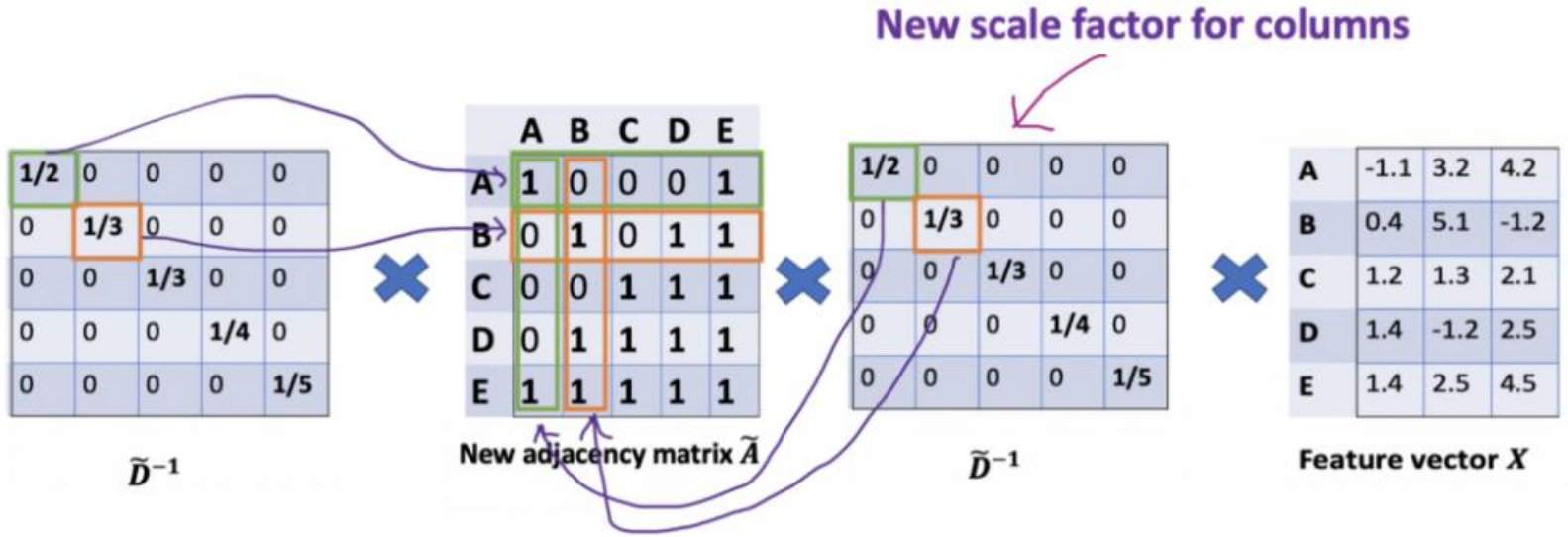


# GCN

- 矩阵scale
  - 左乘相当于对行做归一化
  - 那么列咋办呢？同理
  - 所以咱们现在的公式：

$$\tilde{D}^{-1}\tilde{A}\tilde{D}^{-1}X$$



# GCN

- 矩阵scale

  - 还得再变变，由于咱们行列都进行了归一化，这相当于两次了

  - 我去网吧被抓到了，我妈揍了我一顿，我爸又揍了我一顿

  - 好像有点亏，要不咱们这么整吧：$\tilde{D}^{-1/2}\tilde{A}\tilde{D}^{-1/2}X$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **2** | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | **3** | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | **3** | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | **4** | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | **5** |

$\tilde{D}$



| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **1/2** | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | **1/3** | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | **1/3** | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | **1/4** | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | **1/5** |

$\tilde{D}^{-1}$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **$1/\sqrt{2}$** | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | **$1/\sqrt{3}$** | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | **$1/\sqrt{3}$** | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | **1/2** | 0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | **$1/\sqrt{5}$** |

$\tilde{D}^{-1/2}$

# GCN

- 我的理解

  - 相当于这么个事，$\sqrt{\tilde{D}_{ii}\tilde{D}_{jj}}$ 表示分别对行和列完成归一化
  - 现在有小红和小绿两个人 $\frac{1}{\sqrt{\deg(v_i)}\cdot\sqrt{\deg(v_j)}} = \hat{D}^{-\frac{1}{2}}\hat{A}\hat{D}^{-\frac{1}{2}}$
  - 当计算小红的特征的时候，它只跟小绿有关系
  - 那小绿继承了300亿，小红也是？ $\frac{1}{\sqrt{\deg(v_i)}\cdot\sqrt{\deg(v_j)}}$

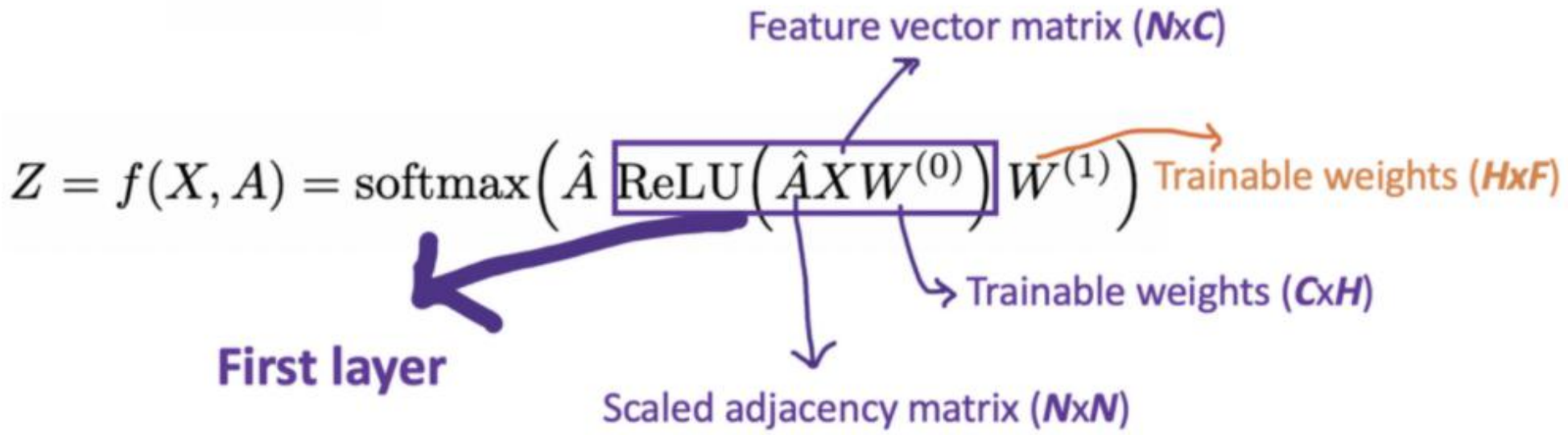
    会把其关系的权重变的很小，因为小绿的度很大

# GCN

- 基本公式

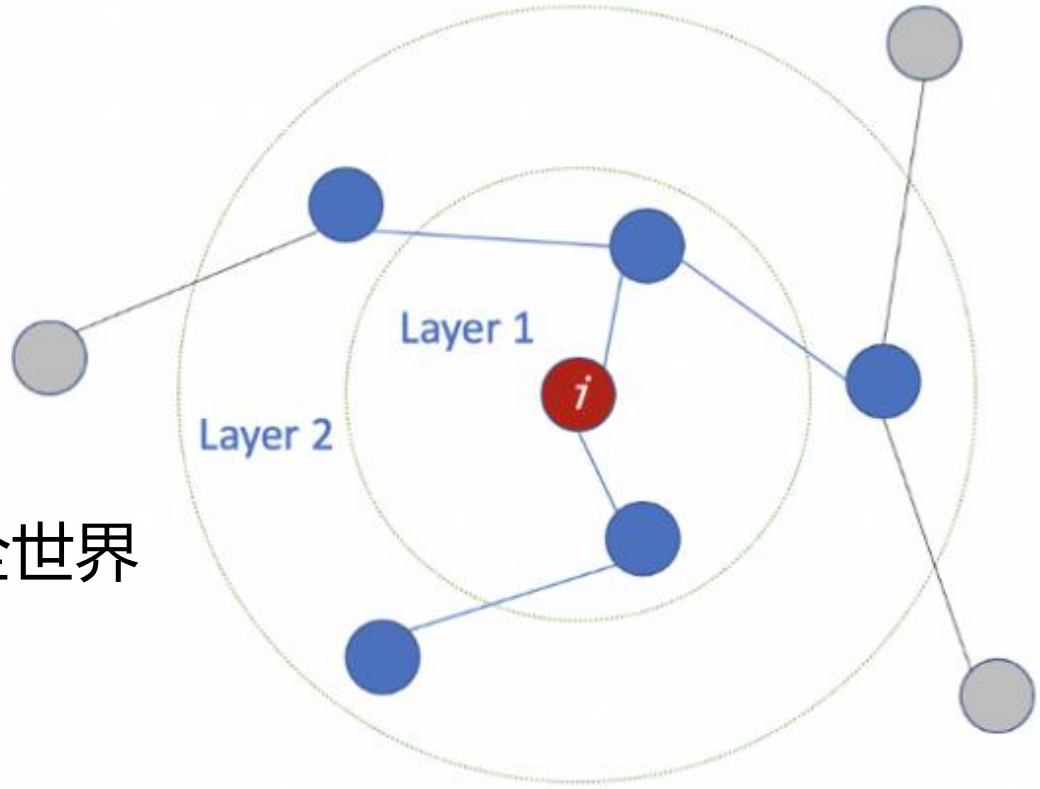
  - 例如完成一个十分类任务的，F就为10表示输出层

  - 其中 $\hat{A} = \tilde{D}^{-1/2}\tilde{A}\tilde{D}^{-1/2}$ 就是咱们刚才说的分别对左右都进行了归一化



# GCN

- GCN的层数
  - 理论上来说肯定越大越好
  - 但是实际的图中可能不需要那么多
  - 在社交网络中，只需6个人你可以认识全世界
  - 所以一般的GCN层数不会特别多



# GCN

## GCN的层数

在多个图数据集中，都可以发现两三层的比较合适，多了反而差了