

Graph Convolutional Network (GCN)

정의

Graph Convolutional Network(GCN) 는 그래프 구조의 데이터를 처리하기 위해 설계된 신경망이다.

일반적인 CNN(합성곱 신경망)이 이미지처럼 **격자형 데이터(grid data)** 에서 지역 정보를 추출하는 것처럼, GCN은 **그래프의 구조**를 반영하여 노드 간의 관계를 학습한다. GCN은 특히 **노드 분류, 링크 예측, 그래프 분류** 등에서 활용된다.

그래프 구조 복습

그래프 $G = (V, E)$ 는 다음으로 구성된다:

- V : 노드(정점)들의 집합
- E : 노드 간의 엣지(간선)
- A : 인접 행렬 (Adjacency matrix), $A_{ij} = 1$ if edge $(i, j) \in E$

또한 각 노드는 **특성 벡터** $x_i \in \mathbb{R}^F$ 를 가질 수 있다.

GCN의 핵심 아이디어

각 노드의 표현을 그 이웃들의 정보를 **합성곱(convolution)** 연산을 통해 집계하여 업데이트한다.

즉, 노드의 표현을 **자기 자신 + 이웃 노드들의 정보**로부터 갱신한다. 이 과정을 층(layer)을 쌓아가면서 점점 넓은 이웃의 정보를 반영할 수 있다.

수학적 표현

가장 일반적으로 사용되는 GCN layer는 Kipf & Welling (2016)의 모델이며, 한 층의 연산은 다음과 같다:

$$H^{(l+1)} = \sigma \left(\tilde{D}^{-1/2} \tilde{A} \tilde{D}^{-1/2} H^{(l)} W^{(l)} \right)$$

- $H^{(l)}$: l 번째 층의 노드 특성 행렬 (입력은 $H^{(0)} = X$)
- $\tilde{A} = A + I$: 자기 자신을 포함한 인접 행렬 (Self-loop 추가)
- \tilde{D} : \tilde{A} 의 대각 합 행렬 (정규화용)
- $W^{(l)}$: 학습 가능한 가중치 행렬

- σ : 활성화 함수 (ReLU 등)

이 구조는 그래프 신호에 대해 **스펙트럼 필터링**과 유사한 효과를 낸다.

정규화의 역할

정규화된 인접 행렬:

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

는 각 노드의 이웃 개수 차이를 보정해주는 역할을 한다. 즉, 이웃이 많은 노드는 너무 큰 영향을 받지 않도록 스케일을 조정한다.

직관적으로 이해하면?

1. 각 노드는 **자신과 이웃 노드의 특성**을 평균 혹은 가중 평균해서 새롭게 표현함
2. 층을 쌓을수록 더 넓은 이웃(멀리 떨어진 노드)의 정보까지 반영 가능
3. 학습 가능한 파라미터는 **특성 간의 가중치**만 있음 (그래프 구조는 고정)

GCN의 사용 예시

- **노드 분류**: citation network에서 논문의 주제를 분류
- **링크 예측**: 소셜 네트워크에서 친구 추천
- **그래프 분류**: 화합물 구조 → 독성 여부 판단 등

장점

- 그래프 구조를 직접 활용하여 관계성 학습 가능
- 파라미터 수가 적고 효율적
- 다양한 그래프 기반 모델(GAT, GraphSAGE 등)의 기반이 됨

한계

- 고정된 그래프 구조만 처리 가능 (동적 그래프에 한계)
- 과도한 레이어 수 → over-smoothing 문제 발생 가능
- 전체 그래프 구조를 알아야 하므로 **미니배치 학습**이 어려움 (부분적으로 해결된 방법들도 있음)

참고 문헌

- Kipf & Welling (2016), *Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks*
<https://arxiv.org/abs/1609.02907>