学号\_\_\_\_\_20165004\_\_\_\_\_\_ 密级\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**东北大学本科毕业论文**

**基于深度图卷积网络的结点分类算法的研究与实现**

学 院 名 称：软件学院

专 业 名 称：软件工程

学 生 姓 名：刘唐

指 导 教 师：张伟 副教授

黄增峰 副教授

**宋体小3号**

**上面写校内导师姓名与职称，下面写企业导师姓名与职称**

**20XX 年 X 月**

基于深度图卷积网络的结点分类算法的研究与实现

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 作者姓名： | 刘唐 | |
| 校内指导教师： | 张伟 | 副教授 |
| 校外指导教师： | 黄增峰 | 副教授 |
| 单位名称： | 软件学院 | |
| 专业名称： | 软件工程 | |

东 北 大 学

20XX年X月

**论文中所有英文和数字的字体均为Times New Roman，所有中文内容中的标点符号都要用中文标点符号。实词首字母大写，虚词首字母小写。**

**此页段落格式：**

段前1行，段后1行，

行距32磅，居中。

**Design and Implementation of Game-Experience Announcing Wubsystem in Social Network Site for Game Players**

以下四号字体，

姓在前名在后，首字母大写，多字名字，以后名字汉语拼音首字母小写。

by Liu Tang

校内指导教师职称：

Professor（教授），

Associate Professor（副教授），Lecturer（讲师）。

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Supervisor: | Professor | Liu Hongyi |
| Associate Supervisor: | Engineer | Zhang Jun |

企业指导教师职称：

Engineer（工程师），

Senior Engineer（高级工程师）。

Northeastern University

June 20xx

**郑 重 声 明**

本人呈交的学位论文，是在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果，所有数据、图片资料真实可靠。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确的方式标明。本学位论文的知识产权归属于培养单位。

本人签名： 日期：

摘 要

毕业设计（论文）是学生在校学习的最后阶段，是培养学生综合运用所学知识，发现、提出、分析和解决实际问题，锻炼实践能力的重要环节，是对学生实际工作能力的系统训练和考察过程。毕业设计（论文）是学生在教师指导下，对所从事工作和取得成果的完整表述，是学生毕业及学位资格认定的重要依据。论文的撰写是学生基本能力训练的过程，应当符合国家及有关行业（部门）指定的有关标准，符合汉语语言规范。为加强对此项工作的指导，严格把关，依据中华人民共和国《科学技术报告、学位论文和学术论文的编写格式》和东北大学论文格式制定此规范，本规范专为我院本科毕业设计（论文）撰写打印时使用。

摘要正文：

宋体，小四号，段前0行，段后0行，1.5倍行距，首行缩进2字符。

400到700字之间。

本文主要介绍本科毕业设计（论文）的排版及打印规范，关于论文的撰写原则及内容指导请参考《本科毕业设计（论文）的撰写规范》一文。学位论文主要部分由前头部分、主体部分和结尾部分组成。前头部分主要包括：封面、中文题名页、英文题名页、郑重声明、中文摘要、英文摘要、目录。主体部分主要包括：绪论、正文、总结及展望。结尾部分包括：参考文献、致谢、附录（限必要时添加）。

希望通过本文的阐述，使同学们能够了解掌握东北大学软件学院本科毕业设计（论文）的排版及打印规范，并认真执行。

**关键词：**本科毕业设计；论文排版；论文打印；页面布局；段落格式

此页页码采用罗马数字，五号，左右各有一个“-”，居中。

**关键词**与摘要内容空一行，悬挂缩进4字符。

“关键词”加粗，关键词内容3到5个，用“；”分隔

**ABSTRACT**

小二号，加粗。

In recent years, VoIP (Voice over IP) has been applied widely with the develop- ment of Internet. But IP network provides data transmitting service only in a “best effort” manner, it does not guarantee the quality of services to VoIP, as a real-time service. Then, QoS(Quality of Service) is becoming more and more important to VoIP, and it’s also a study focus to computer network for a long time.

This article mainly discusses the QoS architecture, the principle of VoIP and the two related protocols: H.323, SIP. And then, introduce some QoS control mechanisms: packet classification, admission control, QoS route and queue management.

………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………………….

**Key words:** VoIP; QoS; H.323; SIP; RSVP

**关键词**与摘要内容空一行，悬挂缩进。

“**Key words**”加粗，关键词内容3到5个，用英文半角“;”分隔

目 录

黑体小二号，段前0.8行，段后0.5行，单倍行距，居中。

“目录”两字之间空一个中文空格。

宋体小四号，英文字体Times New Roman，1.5倍行距。

[摘 要 II](#_Toc19304)

黑体四号，英文字体Times New Roman，1.5倍行距。

[ABSTRACT III](#_Toc22538)

[第1章　绪 论 1](#_Toc23936)

[1.1 论文排版总体要求 1](#_Toc24502)

[1.1.1 打印 1](#_Toc9021)

[1.1.2 页码编排 1](#_Toc13406)

[1.1.3 页眉设置 1](#_Toc32586)

[1.1.4 装订 1](#_Toc12105)

[1.2 论文主要部分 2](#_Toc2550)

[1.2.1 前头部分 2](#_Toc8998)

[1.2.2 主体部分 2](#_Toc24674)

[1.2.3 结尾部分 3](#_Toc16630)

[1.3 本文结构 3](#_Toc32336)

[第2章　论文前头部分 5](#_Toc28980)

[2.1 封面 5](#_Toc32544)

[2.1.1 论文题目 5](#_Toc11079)

[2.1.2 学生信息 5](#_Toc18429)

[2.1.3 论文封面日期 5](#_Toc25991)

[2.2 中英文题名页 5](#_Toc27733)

[2.2.1 题目 5](#_Toc19031)

[2.2.2 姓名 6](#_Toc26370)

[2.2.3 学校与日期 6](#_Toc800)

[2.3 郑重声明 6](#_Toc21972)

[2.4 中英文摘要 6](#_Toc12351)

[2.4.1 摘要标题 6](#_Toc4702)

[2.4.2 摘要内容 6](#_Toc7442)

[2.4.3 关键词 6](#_Toc6705)

[2.5 目录 7](#_Toc31185)

[2.5.1 目录 7](#_Toc2540)

[2.5.2 索引条目 7](#_Toc28889)

[第3章 正文部分 8](#_Toc18888)

[3.1 各级标题 8](#_Toc23433)

[3.2 正文 8](#_Toc16266)

[3.3 图 8](#_Toc15084)

[3.4 表 9](#_Toc14593)

[3.5 程序代码 10](#_Toc31424)

[3.6 公式 10](#_Toc7035)

[3.7 注释 11](#_Toc31126)

[3.8 引文标示 11](#_Toc2003)

[第4章 结尾部分 13](#_Toc26403)

[4.1 参考文献 13](#_Toc24586)

[4.2 参考文献格式 13](#_Toc20993)

[4.3 参考文献举例 14](#_Toc17031)

[参考文献 15](#_Toc18532)

[致 谢 16](#_Toc28784)

第1章　绪 论

本文首先介绍深度图卷积神经网络和图上的半监督结点分类的研究背景，接着分析近年来的国内外研究现状，然后介绍本文的研究内容和主要贡献，最后给出该论文的组织结构。

## 1.1 研究背景

随着训练数据的大量增长和计算资源的快速发展，深度学习在语音识别、目标检测、自然语言处理等方面取得了巨大成功。这归功于深度学习能从欧式数据如语音、文本、图像等中提取有效的特征表示。但是越来越多的任务要求对非欧式数据，如引用网络、社交网络、蛋白质结构等图数据进行处理。然而由于图的不规则、异质性、大规模等特点，传统的神经网络CNN、RNN等无法胜任。近年来，研究人员相继提出了图递归神经网络GRNNs、图卷积神经网络GCNs、图自编码器GAEs、图强化学习GRL等模型，在图数据处理上取得了优越的效果。

图分类、结点分类、链路预测是常见的图上的学习任务。其中结点分类一般指半监督结点分类任务：给定包含结点信息和结构信息的图数据集，带有标签的部分结点作为训练集，预测剩余结点的标签类别。有研究者运用近似技巧从谱图卷积推导出图卷积神经网络的逐层传播公式，使得图像处理中的卷积操作能够被简单应用到图结构数据处理中，在图的半监督结点分类任务上取得了不错的表现。

深度学习的成功在于深层网络架构，该架构具有更高的模型复杂度，因此也具有更强的学习能力。此外，加深网络相比加宽网络具有逐层处理、特征变换等优点。在图像分类任务中，杰出的ResNet具有152层。然而研究表明，随着层数增加，GCN的性能会急剧下降。目前对该问题的研究还较少，为什么性能会下降，如何才能加深GCN，是GCN发展面临的两个挑战。

通过将关系数据自然地建模为图结构数据，GCN等基于图的深度学习模型被广泛应用于其他学科，如计算机视觉、推荐系统、自然语言处理、疾病或药物预测、基于图的NP问题等。对如何加深GCN的研究，能够提升模型的性能，从而促进更深入地挖掘现有图数据的丰富价值。

## 1.2 研究现状

图神经网络是近年来新兴起的研究热点，对深度图卷积神经网络的研究也刚起步不久。

理论方面，研究者们揭示了K层GCN与K步随机游走的关系；证明了图卷积是一种特殊形式的拉普拉斯平滑；分析了在图同构测试任务上GNN性能的上限。

模型方面，PPNP将神经网络与传播算法分离，融入Personalized PageRank算法，在聚合时可以获取更大范围的邻居信息；JK-Net以层级聚合的方式自适应地融合不同层的信息，从而平衡不同邻域的结点的局部与全局信息；Cluster-GCN通过变换邻接矩阵并添加正则化，在考虑权重的同时强化邻近邻居结点的信息；N-GCN在不同尺度下进行图卷积操作，最后融合所有卷积结果得到结点的特征表示，通过对不同尺寸感受野的组合提高模型的表征能力；RGCN基于第K层捕获了K-Hop邻居结点信息，这些相邻层之间存在依赖关系，使用RNN（GRU，LSTM）对层间的长期依赖建模；DeepGCN借鉴CNN的成功经验，基于梯度消失/爆炸的问题，引入残差连接、密集连接和空洞卷积，在点云语义分割任务上进行了实验；Dropedge在每轮训练中从图中随机删除一定比例的边，从数据增强角度缓解了过拟合，从减缓传播角度缓解了过光滑；Snowball和Truncated Krylov均利用了多尺度信息，在一定条件下两种网络结构是等价的，是谱图卷积和深度GCN在块Krylov空间下的推广形式；PairNorm通过引入正则化项改进目标函数，既保证了同一类簇的结点信息趋于一致，又促进了不同类簇的结点信息差异扩大。

这些模型都增强了GCN的学习能力，但是各自也存在着一些不足之处，在几个引用数据集上性能提升有限，多数模型在超过两层后性能仍然会下降。其中，PPNP的传播部分借鉴的是Personalized PageRank，它是基于经验假设设计的，直接进行量化计算而不需要参数学习过程，但是也失去了神经网络的优势；JK-Net只在最后一层对所有层进行融合，层之间的传播方式没有改变，较深层产生的输出仍然存在不同类簇间的结点混合问题，RGCN虽然有一些改进，但是仍然存在相似的问题；Cluster-GCN是基于矩阵的改进，当数据集庞大时，就会面临内存限制问题，而大数据集恰恰最需要更深的GCN；N-GCN、Snowball和Truncated Krylov的思路都类似于Inception，从“宽度”上对网络进行拓展，在同一层级上运行多个不同尺寸的卷积核，但是大尺寸的卷积核不可避免地会引起过光滑问题；DeepGCN的动机在于解决梯度消失/爆炸，但是它不是阻碍GCN加深的主要原因，同时，DeepGCN只在点云数据集上进行了实验，该任务属于图层次的分类，每张图之间不连通，不存在过光滑问题；DropEdge采用随机割边的方法，在稀疏连接图数据上有一定效果，在密集连接图数据上却有反作用；PairNorm的正则化项扩大的是所有不相连结点对间的差异，总体来说对于缓解过光滑问题效果有限。

## 1.3 研究内容

文献方面，本文从理论和模型两个角度，对当前深度GCN研究的最新进展进行了总结归纳，确定了过光滑问题是限制GCN层数加深的主要原因。

理论方面，本文提出了过光滑的量化方法，细化到了结点特征矩阵的行列，从而能够定量地研究过光滑问题。

模型方面，本文从两个角度展开了研究：

针对过拟合问题，在GCN上研究并实验了几种传统方法：weight decay、dropout和Early Stopping。

针对梯度消失/爆炸问题，在GCN上研究并实验了几种传统方法：Xavier初始化、Batch Norm和梯度修剪。

针对过光滑的问题，从图数据预处理的角度，在DropEdge的基础上做了两种改进，分别是基于结点度数的DegreeDrop和基于特征相似DistanceDrop；从控制邻居权重的角度，利用特征的余弦相似度，经过Softmax归一化处理，作为结点与邻居间的权重；从平衡局部全局的角度，将残差连接引入GCN网络，并提出了带可学习权重的残差连接，同时进一步引入并尝试了密集连接；从增强结点自身的角度，在每层引入输入层的链接，并在初始特征和当前特征间赋予平衡权重。

实验方面，本文额外引入了几个密集连接的图数据集，使得实验结果更能区分模型的学习能力；设计了对过光滑理论分析的验证实验，有力地佐证了过光滑是阻碍GCN加深的主要问题；规范了对过光滑问题的模型的实验设置，排除了过拟合和梯度消失/爆炸对实验的混合影响。

本文的创新之处主要体现在模型和实验方面，一方面基于理论分析从不同角度计了多个有效缓解过光滑问题的有效模型，另一方面通过改进和规范实验设置与流程，使得对深度GCN的实验研究更具有说明力。

## 1.4 组织结构

针对梯度消失/爆炸问题，在GCN上研究并实验了几种传统方法：Xavier初始化、Batch Norm和梯度修剪。

针对过光滑的问题，从图数据预处理的角度，在DropEdge的基础上做了两种改进，分别是基于结点度数的DegreeDrop和基于特征相似DistanceDrop；从控制邻居权重的角度，利用特征的余弦相似度，经过Softmax归一化处理，作为结点与邻居间的权重；从平衡局部全局的角度，将残差连接引入GCN网络，并提出了带可学习权重的残差连接，同时进一步引入并尝试了密集连接；从增强结点自身的角度，在每层引入输入层的链接，并在初始特征和当前特征间赋予平衡权重。

第2章　相关工作

## 2.1 图卷积神经网络

图卷积神经网络GCN由ChebNet近似推导而来，是一种简单有效的层式传播模型，是深度图卷积神经网络的基础。

2.1.1 问题定义

图上的半监督结点分类任务是指：给定包含结点信息和结构信息的图数据集，将带标签的部分结点作为训练集，预测剩余结点的标签类别。对该任务可采取的学习策略见公式（2.1）-（2.2）表述。

其中表示带标签的结点的监督损失，表示图结构信息引入的损失，表示神经网络的可微分函数，是权重系数，是结点特征向量矩阵，表示无向图的拉普拉斯矩阵，是邻接矩阵，D是度矩阵，。

正则化项基于相邻结点更加相似的假设，然而该假设可能会限制模型的能力。GCN使用神经网络模型直接编码图结构信息，回避了损失函数中的正则化项的使用。

2.1.2 谱图卷积

经过对称归一化后拉普拉斯矩阵为，其中是的特征向量矩阵，是的特征值矩阵。给定输入信号，傅里叶域的滤波器，谱图卷积见公式（2.3）表述。

其中是对x做图上的傅里叶变换，可视作的特征值得函数。然而，大图上的特征分解很低效，特征向量矩阵乘法的时间复杂度也较高。这里可以用切比雪夫多项式近似，见公式（2.4）表述。

这里是的最大特征值，是切比雪夫因子。切比雪夫多项式由递推公式定义，其中。将切比雪夫近似公式代入谱图卷积公式，见公式（2.5）表述。其中。

2.1.3 传播公式

在公式（2.5）中，令，谱图卷积近似为关于的线性函数，我们可以堆叠多层获得卷积能力；令，我们期望神经网络的参数在训练过程中自适应该变化。在这些条件下近似结果见公式（2.6）表述。

其中参数和可以共享于所有结点的计算。我们引入进一步近似，见公式（2.7）表述。这在一定程度上可以缓解过拟合，并减少计算量。

这里的特征值范围是[0, 2]，重复该操作会导致数值不稳定等问题。为此我们引入再正则化技巧，其中。

我们将公式（2.7）进一步泛化，给定输入信号，有C个通道（即C维特征），卷积包含F个滤波器，见公式（2.8）表述。

其中是滤波器的参数矩阵，是卷积操作后的信号矩阵。在多层神经网络中，习惯上把变换后的记做，表示结点在隐藏层的嵌入。此外，习惯上把神经网络的参数记做而非，当前层的输出会作为下一层输入。经过这些符号替换后，得到GCN逐层传播公式，见公式（2.9）表述。

2.1.4 结点分类

经过GCN处理后的输出嵌入可以用于下游任务，两层的用于半监督结点分类任务的GCN见公式（2.10）表述。

这里是权重矩阵，在输入层和隐藏层间做线性变换，也是权重矩阵，在隐藏层和输出层间做线性变换。变换结果经过softmax激活函数输出作为分类结果。对于半监督结点分类任务，在带标签的样本上评估交叉熵，见公式（2.11）表述。

其中表示所有带标签的结点的集合。通过梯度下降法我们可以训练神经网络的权重。

## 2.2 深度图卷积神经网络

研究发现，超过2-3层后，随着层数增加，GCN的性能会急剧下降。研究者在加深GCN上做了一些尝试，提出了一些深度GCN模型。

2.2.1 PPNP

传统的GCN模型在每一层变换时包括特征变换和1阶邻居的聚合，通常只能使用有限的邻居结点信息并且难以扩展，但是边缘结点，稀疏结点等需要更多的邻居结点信息。然而，简单地堆叠层以获取更多邻居结点信息会带来两个问题：一是聚合次数过多会导致过平滑，丧失了结点的局部特性；二是堆叠层数过多会导致参数量过大，有可能造成过拟合。

受Personalized PageRank启发，研究者提出一种新的传播算法，该方法可以平衡局部性和对更大范围邻居信息的需求，从而缓解过光滑的问题。此外将神经网络与传播过程分离，神经网络的深度完全独立于传播过程，从而回避过拟合的问题。普通的PageRank见公式（2.12）表述。

Personalized PageRank考虑了根节点，见公式（2.13），其中是添加了自循环的对称归一化邻接矩阵。

求解公式（2.13）并矩阵化后见公式（2.14）表述。它的每个元素(yx)表示结点x对y的影响分数大小。

为了利用上述Personalized PageRank影响分数，我们将该分数与高层特征一起用于生成每个结点的类别概率分布，见公式（2.15）表述。

其中是结点的输入特征矩阵，是结点的隐层特征矩阵，表示任意特征映射函数，如神经网络，独立地对每个结点进行变换，该过程中不涉及聚合操作。

直接计算矩阵的时间复杂度和空间复杂度都很高，我们可以用迭代的方法近似求解，见公式（2.16）-（2.18）表述。

其中是超参数，表示迭代轮数。我们可以通过设置转移概率控制邻居结点的范围，对于不同类型的图和任务选择不同的转移概率。

PPNP的传播部分借鉴的是Personalized PageRank，在该过程中聚合图的结构信息，它是基于经验假设设计的，直接进行量化计算而不需要参数学习过程，但是也失去了神经网络的优势。本文在增强结点自身的角度，将Personalized PageRank引入了GCN，可以同时自动学习结构信息和特征信息。

2.2.2 JK-Net

虽然GCN能适应不同结构的图数据，但是GCN固定的层级结构无法满足不同邻域结构的结点对平滑范围的要求。K步随机游走在不同邻域结构的结点上的效果见图2.1，从左往右分别是中心结点的4步随机游走，边缘结点的4步随机游走和5步随机游走。可以看到，位于连接紧密的中心结点，平滑范围扩散过快；位于连接稀疏的边缘结点，平滑范围扩散过慢，但是一旦触及中心，平滑范围就会陡增。

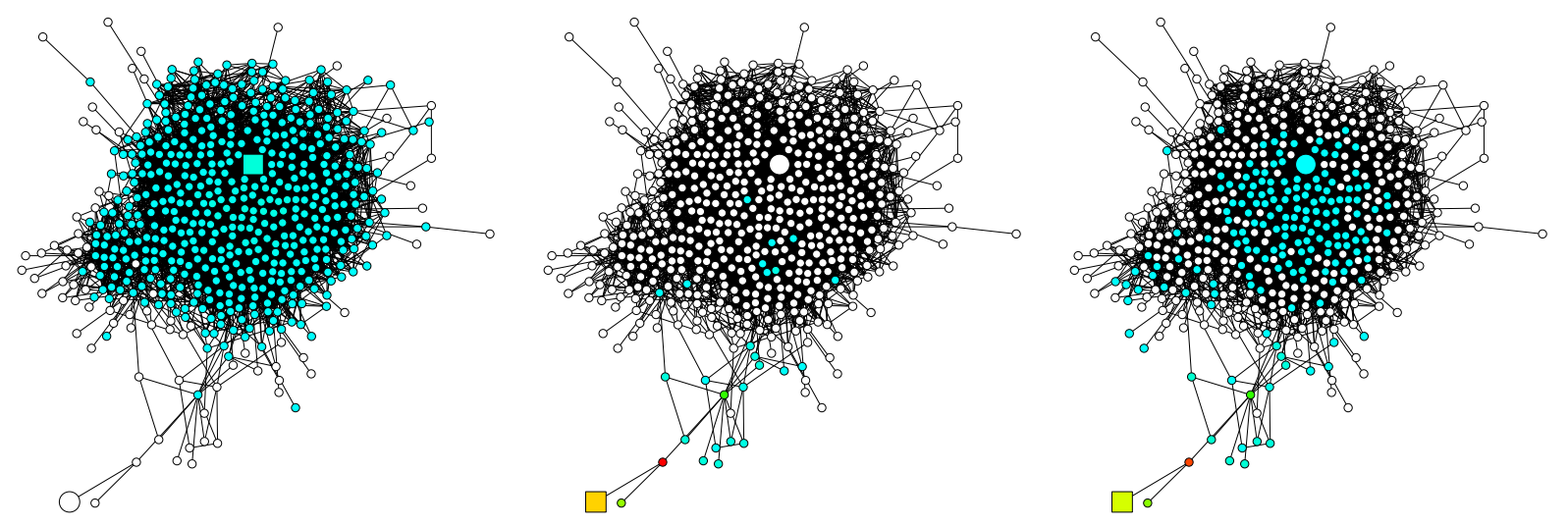


图2.1 K步随机游走在不同邻域结构的结点上的效果

底层信息更具局部性，高层信息更具全局性，JK-Net以层级聚合的方式自适应的融合不同层的信息，从而平衡不同邻域结构结点的局部与全局信息，见图2.2。具体的融合方式有Concatenation、Max-pooling和LSTM-attention。

Concatenation将各层输出拼接，之后作线性变换用于分类；Max-pooling将各层输出聚在一起做元素级别的最大池化操作。

LSTM-attention是最复杂的融合方式，为每层学习注意力系数，该系数表示各层的重要程度。将各层输入依次送入一个双向LSTM，将每层的前向表达和后向表达拼接后作线性变换得到一个系数，对该系数作softmax归一化得到最终的注意力系数，最后对各层输出依据注意力系数加权求和。

加入融合机制后，GCN就存在两种聚合方式，横向的邻居聚合学习结构信息，纵向的层级聚合促使模型有选择地学习结构信息，从而使得GCN模型能够堆叠更多层。

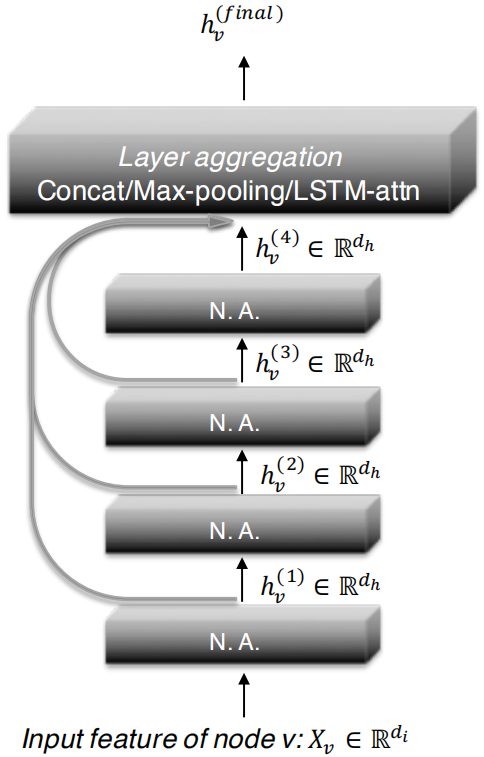


图2.2 JK-Net网络结构

JK-Net能自适应地根据结点的邻域结构组合不同层的信息，但是由于JK-Net只在最后一层对所有层进行融合，层之间的传播方式没有改变，较深层产生的输出仍然存在不同类簇间的结点混合问题。本文引入DenseNet对此作了改进。

2.2.3 Cluster-GCN

近距离的邻居结点比远距离的邻居结点贡献更大，通过放大GCN中邻接矩阵的对角部分，可以在每层的聚合中对上一层的表达施加更多权重，见公式（2.19）表述。

然而该改进存在两个弊端：一是对所有结点使用相同的权重可能是不合理的；二是随着层数增加可能会导致数值不稳定。我们可以为原始矩阵添加自循环后再标准化，从而规避数值不稳定问题，见公式（2.20）表述。

接着考虑到结点的权重添加正则化，见公式（2.21）表述。

基于矩阵的实现，当数据集庞大时，就会面临内存限制问题，而大数据集恰恰最需要更深的GCN。本文基于DGL框架实现模型，采用消息发送与接收的方式进行邻居聚合和结点更新。

2.2.4 N-GCN

受Inception的启发，我们可以在不同尺度下进行卷积，最后融合所有卷积结果得到结点的特征表示，通过组合不同尺寸感受野来提高模型的表征能力。N-GCN的原理见公式（2.22）表述。

N-GCN相当于采用Concatenation融合方式的JK-Net，较深层产生的输出仍然存在不同类簇间的结点混合问题。

2.2.5 RGCN

对于一个n层的GCN，第i层捕获了i-hop邻居结点的信息，相邻层之间存在依赖关系，我们可以用RNN对各层之间的长期依赖建模。RGCN的原理见公式（2.23）-（2.24）表述。

基于门控的循环神经网络引入门控机制来控制信息的累积速度，包括有选择地加入新的信息，并有选择的遗忘之前累积的信息，有效地改善了循环神经网络的长程依赖问题，常用的有长短期记忆网络和门控循环单元网络。

长短期记忆网络LSTM是循环神经网络的一个变体，可以有效地解决简单循环神经网络的梯度消失/爆炸问题。将LSTM引入GCN，RGCN-LSTM的原理见公式（2.25）-（2.31）表述。

门控循环单元网络GRU是一种比LSTM网络更加简单的循环神经网络。GRU网络引入门控机制来控制信息更新的方式。和LSTM不同，GRU不引入额外的记忆单元。GRU引入一个更新门来控制当前状态需要从历史状态中保留多少信息，以及需要从候选状态中接受多少信息。将GRU引入GCN，RGCN-GRU的原理见公式（2.32）-（2.36）表述。

与JK-Net在最后一层使用LSTM融合各层信息不同，RGCN使用RNN对各层之间的长期依赖建模，缓解了更深的层不同类簇结点混合的问题。

2.2.6 DeepGCN

借鉴深度CNN的经验，我们可以将残差连接、密集连接引入GCN解决由于网络加深导致的梯度消失/爆炸问题，将空洞卷积引入GCN解决由于池化操作导致的空间信息丢失问题。ResGCN和DenseGCN的网络结构见图2.3。

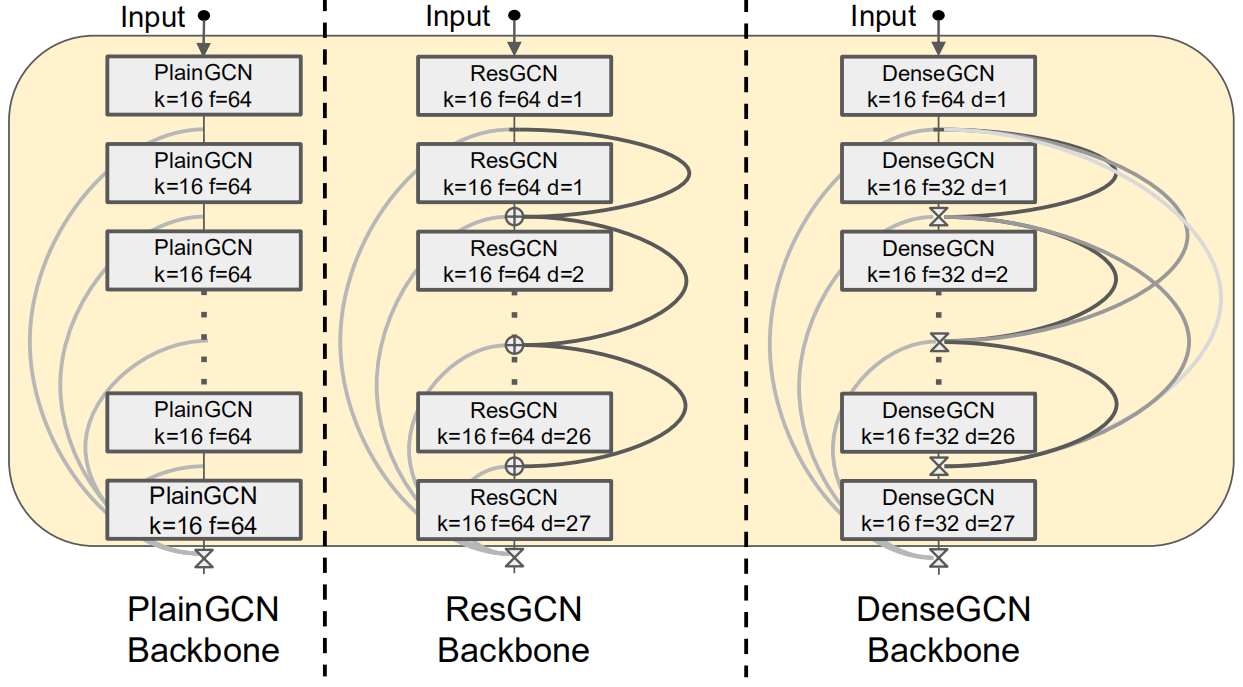


图2.3 GCN、ResGCN、DenseGCN网络结构

残差网络ResNet通过给非线性的卷积层增加直连边的方式来提高信息的传播效率。将残差连接引入GCN，ResGCN的原理见公式（2.37）描述。

密集网络DenseNet通过密集连接来改进信息流并重用层之间的特征。将密集连接引入GCN，以利用不同层的信息流，DenseGCN的原理见公式（2.38）描述。

空洞卷积是一种不增加参数数量，同时增加输出单元感受野的方法，也称为膨胀卷积。空洞卷积通过给卷积核插入“空洞”来变相地增加其大小。在特征空间上使用L2距离，根据与目标结点的距离将邻居结点排序，见公式（2.39）表述。

给定空洞系数，目标结点的邻居结点见公式（2.40）表述。

DeepGCN的动机在于解决梯度消失/爆炸，但是它不是阻碍GCN加深的主要原因，同时，DeepGCN只在点云数据集上进行了实验，该任务属于图层次的分类，每张图之间不连通，不存在过光滑问题。本文在引用数据集等多个图数据集上实验了ResGCN、DenseGCN，并提出了带可学习权重的ResGCN。

2.2.7 DropEdge

DropEdge在每轮训练中随机删除图数据集中一定数量的边，在验证集和测试集上不使用DropEdge机制。具体而言，在随机矩阵中随机选取个非零元素置零，其中是原始图的总边数，是删除概率，最后得到邻接矩阵，见公式（2.41）描述。

接着对添加自循环并做对称归一化，将得到的结果代替GCN中的。我们可以让所有层共享同一个，也可以在每一层进行DropEdge，在第层得到邻接矩阵，这样可以赋予原始数据更多随机性。

从数据增强角度，DropEdge在训练中不断随机删除原始图的边，增强了输入数据的随机性和多样性，从而缓解了过拟合问题。从消息传递角度，GCN中结点间通过连边进行消息传递，随机删除一些边可以使得结点连接变稀疏，从而缓解了过光滑问题。

在基于结点采样的方法DropNode中，删除某个结点相当于删除了与该结点相连的所有边，可以视为DropEdge的特殊形式。与DropNode相比，DropEdge是面向边的，保留了所有结点的特征，更具灵活性。此外DropNode对所有边的采样是并行的，更具高效性。

Dropout是一种正则化方法，在训练中随机丢弃一部分神经元，即随机将特征向量的部分维度置零，与DropEdge相比，它可以缓解过拟合但是不能缓解过平滑。图稀疏性通过复杂的优化算法删掉部分边来压缩图，与DropEdge相比时间复杂度往往很高。

DropEdge是一种简单而高效的方法，但是实验发现，在引用数据集等稀疏图上表现良好，在其他几个密集图数据集上却起到了反作用，这可能是因为相当一部分有效边被随机删除了。本文基于DropEdge做了一些改进，分别是基于结点度数的DegreeDrop和基于特征相似DistanceDrop。

2.2.8 PairNorm

给定表示结点的新特征矩阵，其中表示特征矩阵的第行，图上的正则化最小平方GRLS优化问题见公式（2.42）描述。

这里运算，第一项可以看做带度数权重的最小平方，第二项表示图结构上新特征之间的差异。该优化问题的目标在于保证新特征与原特征相似，同时促使新特征在图上更光滑。

GRLS问题有解析解，其中，是一阶泰勒近似，即。用代替，也就是。因此，图卷积是GRLS问题的近似解。

理想情况下，我们希望同一类簇类更光滑，同时不同类簇间不光滑，但是公式（2.42）只能确保前者。为了同时实现两个目标，我们可以在公式（2.42）中增加一项，该项表示不相连结点对之间的距离总和，见公式（2.43）描述。

其中系数用于平衡两个目标的重要程度。我们可以求出公式（2.43）的解析解，并用图卷积近似，从而得到带系数的新的图卷积操作，但是这样不具备通用性。

给定图卷积的输出作为PairNorm层的输入，是PairNorm层的输出。图卷积只实现了第一个目标，PairNorm作为正则化层，通过增加不相连结点对间的总距离来实现第二个目标。结点对间的总距离记做TPSD，PairNorm确保，见公式（2.44）描述。

随着图卷积操作的不断平滑，和越来越接近，因此和也越来越接近。是与数据集特性相关的常数，记做超参数C。

为了对进行正则化，我们需要计算，然而对于大数据集直接计算时间复杂度很高。的等价形式见公式（2.45）描述。

为进一步简化，将中心化，第二项为0，TPSD的值不变。具体地，PairNorm分为两步，中心化见公式（2.46）描述，缩放化见公式（2.47）描述。

PairNorm具有坚实的理论基础，但是由于扩大的是所有不相连结点对间的差异，总体来说对于缓解过光滑问题效果有限，在受过光滑较严重的密集连接图数据集上表现不佳。本文提出的基于DropEdge的改进方法直接针对过光滑问题，取得了较好的效果。

## 2.3 本章小结

本章首先介绍了图卷积神经网络的理论基础和模型详情，并介绍了GCN在图的半监督结点分类任务上的应用，接着介绍了8种深度图卷积神经网络模型，讨论分析了它们各自的优缺点以及本文的主要工作以及在已有工作上的改进。

第3章 正文部分

正文是论文的核心部分，占主要篇幅，一般由标题、文字段落、图、表和公式五个部分构成。正文内容一般可包括绪论、需求（系统）分析、系统设计、系统实现、系统测试、总结及展望、参考文献、致谢等。其中除了参考文献和致谢之外，都需要编排章节号。

每章按照阿拉伯数字编号，如“第1章、第2章…”,节与小节按照阿拉伯数字编号，如“2.1”等，每个章节编号与名称之间空一个中文空格，如“第1章 绪　论，1.1 国内外现状”。

## 3.1 各级标题

各级标题中文均用黑体，英文和数字均用Times New Roman。

一级标题（每章的标题），采用小二号黑体，段前0.8行，段后0.5行，单倍行距，居中打印，标题为两个汉字的，中间加一个中文空格。

二级标题为四号黑体，居左，段前0.5行，段后0.5行。

三级标题为小四号黑体，居左，段前0.5行，段后0.5行。

可以定义四级标题，四级标题以下采用2级标号。(1)、(2)和①、②，全文统一，中文字体为小四号黑体。

## 3.2 正文

正文内容中文全部用宋体，英文和数字用Times New Roman，小四号字体，首行缩进2个中文字符，段前0行，段后0行，行距固定值23磅。正文中所用标点符号全部为全角符号（用作标号的括号除外，可以使用半角括号，并全文统一）。

在文中不应该由于图表的原因，造成留有大段空白，最多不超过2行。

## 3.3 图

插图应与文字内容相符，技术内容正确。所有制图应符合国家标准和专业标准。对无规定符号的图形应采用该行业的常用画法。

每幅插图应有图标题和图序号。图序号按章编排，如第1章第4幅插图序号为“图1.4”。图序号之后空一格写图标题，图序号和图标题居中置于图下方，用小4号黑体（数字和字母为Time New Roman粗体小4号）。从参考文献引用来的图应在图标题右上角标注参考文献序号。图中若有分图，分图号用（a）、（b）等置于分图下、图标题之上。图中的文字小于等于小四号字体。

图与图标题、图序号为一个整体，不得拆开排版为两页。当页空白不够排版该图整体时，可将其后文字部分提前，将图移至次页最前面。每一章不能以图开始和结尾。

对坐标轴必须进行文字标示，有数字标注的坐标图必须注明坐标单位。

每一个图在正文当中必须有明确的说明性引用文字，不能仅仅是“如下图：”等字样，可写明“…见图3.5。”或“…如图3.5所示。”，正文引用图后用“。”，而不是“：”。

除了界面图，一概不能拷屏截图，图片均应该为可编辑图片。示例图片如图3.1所示。

图3.1 示例图片

## 3.4 表

每一个表格都应有表标题和表序号。表序号一般按章编排，如第2章第4个表的序号为“表2.4”。表标题和表序之间应空一格，表标题中不能使用标点符号，表标题和表序号居中置于表上方（黑体小4号，数字和字母为Time New Roman粗体小4号）。从参考文献引用来的表应在表标题右上角标注参考文献序号。表中的文字为五号字体（数字和字母为Time New Roman），单倍行距。

每一个表在正文当中必须有明确的说明性引用文字，不能仅仅是“如下表：”等字样，可写明“…见表3.5。”或“…如表3.5所示。”，正文引用表后用“。”，而不是“：”。

无特殊情况下，表与表标题、表序号为一个整体，不得拆开排版为两页。当页空白不够排版该表整体时，可将其后文字部分提前，将表移至次页最前面。每一章不能以表开始和结尾。如表太大一页排不下，应该将表拆成2个，下一页的表也必须有表头、且标上“续”表号与表名置于表的上方。表一律采用三线表的标准格式，表用开表，表头边框与表底边框选1.5磅，表头文字采用粗体，居中对齐。示例表格如表3.1所示。

表3.1 数据库表设计

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **表序号** | **表名** | **表的详细说明** |
| 1 | blacklist | 黑名单 |
| 2 | buddys | 用户间关系 |
| 3 | credits\_rule | 积分规则 |

续表3.1数据库表设计

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **表序号** | **表名** | **表的详细说明** |
| 4 | my\_tag | 我的标签 |
| 5 | my\_topic\_tag | 个人话题使用标签 |
| 6 | notice | 通知消息 |

## 3.5 程序代码

程序代码使用5号Times New Roman，中文注释使用5号宋体，段前0行，段后0行，单倍行距，不加黑，排版尽量美观，不能出现在每章的结尾处。连续代码不能超过1页。代码举例：

int main(int argc, char \*argv[])

{ …

Char \* cfgFile =" config /nas1. local. xml ";

…

while (true) {

std::cout << "Just wait here and let factory take care of new sessions" << std::endl;

ACE\_OS::sleep(10); //连接延迟设定

}

}

## 3.6 公式

正文中引用的公式、算式或方程式等需用公式编辑器等工具编辑，不可直接贴图。按章序号用阿拉伯数字编号（式号），如：式（3.1）表示第3章第1个公式，公式一般单行居中排版与上下文分开，式号与公式同行居右排版，公式与编号之间不加虚线。文中引用公式时，采用“见公式（3.2）”表述。例如：

 (3.1)

公式较长时应在“＝”前转行或在“＋、－、×、÷”运算符号处转行，若在“＝”前转行，等号应在转行后的行首，若在“＋、－、×、÷”运算符号处转行，运算符号转行后采用等号对齐的方式进行，公式的编号用圆括号括起来放在公式右边行末。

## 3.7 注释

注释是对论文中特定名词或新名词的注解。注释可用页末注或篇末注的一种。选择页末注的应在注释与正文之间加细线分隔，线宽度为1磅，线的长度不应超过纸张的三分之一宽度。同一页类列出多个注释的，应根据注释的先后顺序编排序号。字体为宋体5号，注释序号以“①、②”等数字形式标示在被注释词条的右上角。页末或篇末注释条目的序号应按照“①、②””等数字形式与被注释词条保持一致。

## 3.8 引文标示

引文即对参考文献的引用，引文标示应全文统一，采用方括号上标的形式置于所引内容最末句的右上角（以上标标注出），引文编号用阿拉伯数字置于半角方括号中，用小4号字体（数字用Times New Roman），如：“……模式[3]”。正文引用参考文献的顺序要按参考文献的编号顺序依次出现。各级标题不得使用引文标示。正文中如需对引文进行阐述时，引文序号应以逗号分隔并列排列于方括号中，如“文献[1，2，6-9]从不同角度阐述了……”

为了保证每一章从奇数页开始，因此加本页空白页

本页不显示页眉和页码，但仍然占有一页页码。

第4章 结尾部分

## 4.1 参考文献

参考文献要求10篇以上，并要求全部引用。其中不能出现上课时所使用的教材，而且不能全部为书或全部为网络资源，参考文献中必须有英文文献和网络资源。

按正文中参考文献引用的先后顺序用阿拉伯数字连续编号。参考文献的序号左顶格，并用数字加方括号表示，与正文中的引文标示一致，如[1]，[2]……。每一条参考文献著录均以“.”结束。采用宋体小四号字，段前0行，段后0行，1.5倍行距，悬挂缩进2字符。

## 4.2 参考文献格式

作者姓名写到第三位，余者写“等.”。

参考文献中出现的标点符号一律用半角的字体（包括“，”、“.”、“：”和“-”等一切可能用到的符号，包括网址中的“：”和“.”），之后可加一个半角的空格，然后接着写后面的内容。

具体各类参考文献的编排格式如下：

1.文献是期刊时，书写格式为：

[序号] 作者. 文章题目[J]. 期刊名, 出版年份，卷号(期数):起止页码.

2.文献是图书时，书写格式为：

[序号] 作者. 书名[M]. 版次. 出版地：出版单位，出版年份：起止页码.

3.文献是会议论文集时，书写格式为：

[序号] 作者. 文章题目[A].主编.论文集名[C], 出版地：出版单位，出版年份:起止页码.

4.文献是学位论文时，书写格式为：

[序号] 作者. 论文题目[D].保存地：保存单位，年份.

5.文献是来自报告时，书写格式为：

[序号]报告者. 报告题目[R].报告地：报告会主办单位，报告年份.

6.文献是来自专利时，书写格式为：

[序号]专利所有者. 专利名称：专利国别，专利号[P].发布日期.

7.文献是来自国际、国家标准时，书写格式为：

[序号]标准代号. 标准名称[S].出版地：出版单位，出版年份.

8.文献来自报纸文章时，书写格式为：

[序号]作者. 文章题目[N].报纸名，出版日期（版次）.

9.文献来自电子文献时，书写格式为：

[序号]作者.文献题目[电子文献及载体类型标识].电子文献的可获取地址，发表或更新日期/引用日期（可以只选择一项）.

电子参考文献建议标识：

［DB/OL］——联机网上数据库(database online)  
［DB/MT］——磁带数据库(database on magnetic tape)  
［M/CD］ ——光盘图书(monograph on CD-ROM)  
［CP/DK］——磁盘软件(computer program on disk)  
［J/OL］ ——网上期刊(serial online)  
［EB/OL］——网上电子公告(electronic bulletin board online)

## 4.3 参考文献举例

参考文献举例见下一章。

参考文献

[1] 戴军, 袁惠新. 膜技术在含油废水处理中的应用[**J**]. 膜科学与技术, 2002, 22(2)：59-64.

[2] 毛侠, 孙云. 和谐图案的自动生成研究[**A**]. 第一届中国情感计算及智能交互学术会议论文集[**C**]. 北京: 中国科学院自动化研究所, 2003: 277-279.

[3] 王湛. 膜分离技术基础[M]. 北京: 化学工业出版社, 2000: 14-21, 30.

[4] 张志祥. 间断动力系统的随机扰动及其在守恒律方程中的应用[D]. 北京: 北京大学, 1998.

[5] World Health Organization. Factors regulating the immune response: report of WHO Scientific Group[R]. Geneva: WHO, 1970.

[6] 河北绿洲生态环境科技有限公司. 一种荒漠化地区生态植被综合培育种植方法:中国, 01129210.5[P]. 2001-10-24.

[7] GB/T16159-1996, 汉语拼音证词法基本规则[S]. 北京: 中国标准出版社, 1996.

[8] 毛侠. 情感工学破解“舒服之谜”[N]. 光明日报, 2004-04-17(B1).

[9] 陈剑. 上博简《民之父母》“而得既塞於四海矣”句解释[EB/OL]. 简帛研究网站，http://www.bamboosilk.org/Wssf/2003/chenjian03.htm．2003-01-18.

致 谢

应以简短的文字对题目与论文撰写过程中曾直接给予帮助的人员(例如指导教师、答疑教师及其他人员)表示自已的谢意 ，这不仅是一种礼貌，也是对他人劳动的尊重，是治学者应有的思想作风。对整个毕业设计（论文）进行总体性、概括性总结，表达出设计（论文）的思路、学习收获、对未来进一步学习的设想。