**基于深度图卷积网络的结点分类算法的研究与实现**

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. **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。

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，APPNP将神经网络与传播算法分离，融入个性化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，APPNP的传播部分借鉴得是个性化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，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虽然相对有一些改进，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. **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。

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

模型方面，本文从两个角度针对过光滑的问题，本文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和基于特征相似的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，借鉴APPNP的想法，

实验方面

创新之处：方法+实验

研究意义