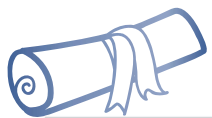




图卷积神经网络(GCN)

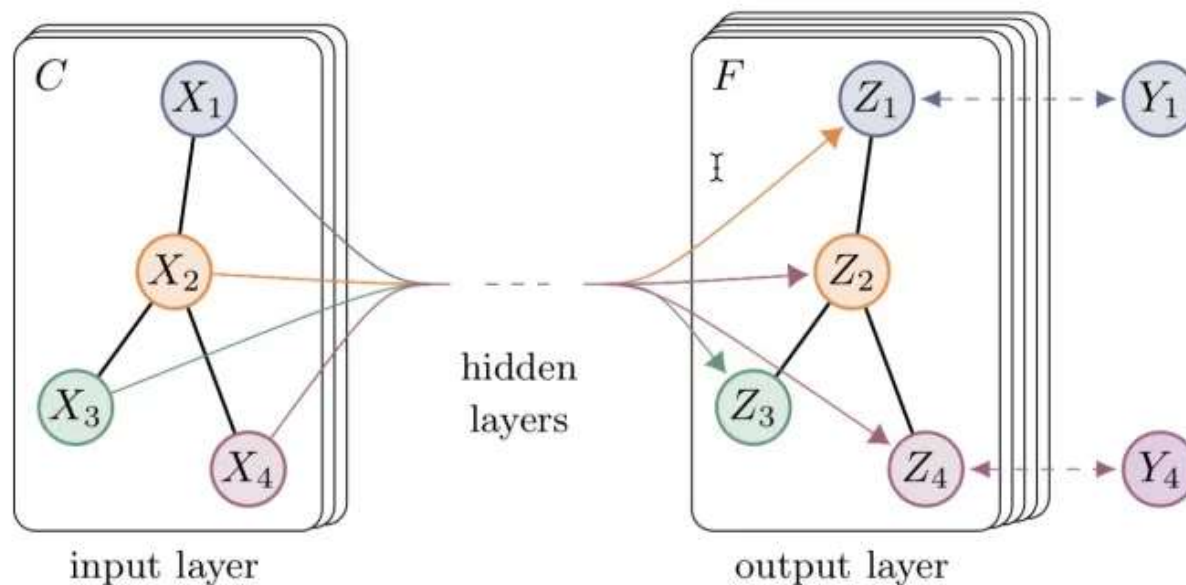
—◆— 人工智能基础——实验四 —◆—



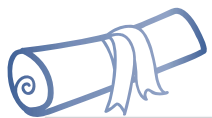


图卷积神经网络

- 目标：
 - 结合图中的节点属性和链接结构，通过图卷积神经网络生成低维的节点表示。该节点表示可以用于各种下游任务中，如节点分类、链接预测、图分类等。



(a) Graph Convolutional Network



图卷积神经网络

- 符号说明:
 - 图 $G = (V, E)$, 其中 V 表示有 N 个节点的节点集, E 表示有 M 条边的边集。
 - $X \in \mathbb{R}^{N \times f}$ 表示的是节点的属性矩阵, f 表示的是每个节点属性的维度
 - $A = \{a_{ij}\} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 表示的是图的邻接矩阵 (可以通过 E 构建邻接矩阵 A), 其中 a_{ij} 表示的是节点 v_i 和 v_j 的链接关系, 如果节点 v_i 和 v_j 存在边, 那么 $a_{ij} = 1$, 否则 $a_{ij} = 0$
 - $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 表示的是对角的度矩阵, 其中 $d_{ii} = \sum_{j \in V} a_{ij}$



图卷积神经网络

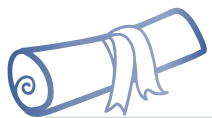
- GCN的基本组成——图卷积层

$$H^l = \sigma (\underbrace{\tilde{D}^{-1/2} \tilde{A} \tilde{D}^{-1/2}}_{\text{邻域聚合 } \hat{H}^l} H^{l-1} \underbrace{W^l}_{\text{特征转换}})$$

邻域聚合 \hat{H}^l

特征转换

其中， H^{l-1} ， H^l 分别代表上一层卷积层输出的节点表示和当前层卷积层输出的节点表示； $\tilde{A} = A + I$ 表示带有自环的邻接矩阵， \tilde{D} 为 \tilde{A} 对应的度矩阵， W^l 代表当前层中的权重矩阵(也是GCN需要学习到的参数)； $\sigma()$ 表示的是激活函数，一般选取ReLU()



图卷积神经网络

- 下游任务——节点分类

针对节点分类的下游任务，需要根据所学到的节点表示对该节点的类别进行预测。一般情况下，采用 $\text{softmax}()$ 进行节点类别的预测，即：

$$\hat{Y} = \text{softmax}(H^{(L)})$$

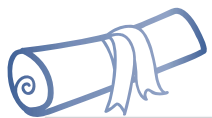
其中， $\hat{Y} \in \mathbb{R}^{N \times C}$ 表示预测的节点标签， C 表示节点的类别总数

- 性能评估——交叉熵

我们采用交叉熵函数来评估节点类别预测的准确率，即：

$$L = -Y \log \hat{Y}$$

其中， Y, \hat{Y} 分别表示真实标签和预测标签。



图卷积神经网络

- 实验设置

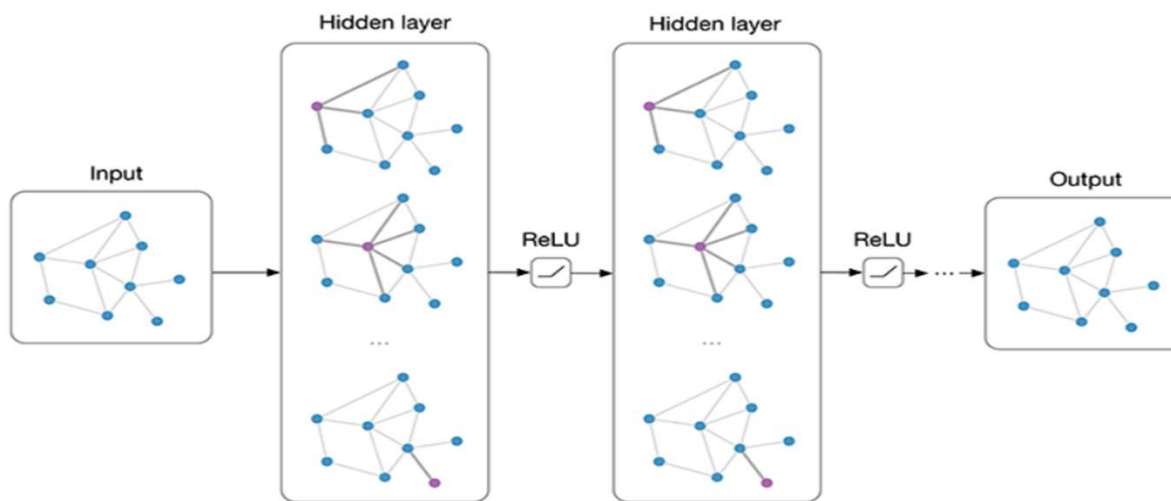
本次实验采用的数据集是Cora，以下提供两种导入数据集的方式：

- 本地文件中导入数据集（数据集文件已提供）
- 从Python的相关库中导入数据集，如下述指令：
 - `from dgl.data import CoraGraphDataset`
 - `from torch_geometric.datasets import Planetoid`
`dataset = Planetoid(root='/tmp/Cora', name='Cora')`



实验要求

1. 搭建图卷积网络GCN;
2. 基于Cora数据集对GCN的性能进行预测
3. 按要求书写实验报告。



Multi-layer Graph Convolutional Network (GCN) with first-order filters.