GNN Final Project

鲁东佑
2001213518
信息科学技术学院

刘墨杨
2001111388
信息科学技术学院

摘要

我们在 GAE(Graph Auto Encoder) 的基础上，引入具有 Hessian Penalty 的 GAE。我们使用自动编码器模型（VGAE），它使用图卷积网络（GCN）编码器和简单的内积解码器。Hessian Penalty 是一个简单的正则化术语，它鼓励将生成模型的 Hessian 的输入视为对角线。我们对链接预测任务进行了简单的实验。

代码：`https://github.com/mickelliu/GNNFinalProject`

1 介绍

深度学习在许多领域都表现出良好的性能，并且被广泛用于各个领域的研究。但是，这种基于深度学习的方法也存在很多问题，其中无法解释训练模型的权重如何影响预测结果是一个典型的问题。最近有解耦潜在因子的研究，让嵌入中的每个元素对应一个单独的影响因素。因此，在本文中，我们将参考先前发表的论文，并将潜在因子的解耦应用于图自动编码器，并将其用于链接预测任务。在第二节中，我们将首先介绍本文相关研究，包括图形自动编码器，潜在因子的解耦研究。在第三节中，我们将讨论模型和 Hessian Penalty，在第四节中，介绍进行实验所用到的数据集，展示实验结果并对结果进行分析。

2 相关研究

图自动编码器 2016 年，Thomas 提出了基于自动编码器进行链接预测的 GAE 和 VGAE。这两个模型是通过解码-编码的结构去获取到图中节点的嵌入 (Z)，然后再去做具体的下游任务比如链接预测。编码部分直接使用 GCN 获得图中每个节点的嵌入，解码部分直接采用内积作为编码器重构原始的图。ARGA 是一个自动编码器(Auto-Encoder)和生成式对坑网络 (GAN) 的融合模型，整体模型包括 GAE 和判别器 (Discriminator)，GAE 的编码器和解码器仍然分别使用 GCN 和内积，用判别器使模型的嵌入 (Z) 拟合高斯分布。这两者模型都在链接预测任务获得了比较好的结果。

潜在因子的解耦 已经在与深度学习相关的许多领域中，正在研究潜在因素的解耦性。在图神经网络领域，ICML 上的一篇论文 Disentangled GCN 提出了 Disentangled Convolutional Layer 和新的邻居路由机制获得了更好的解耦性。而且它在顶点分类任务上获得了比较好的结果，证明了解耦对分类结果的影响。自动编码器（A-E）领域上，β-VAE 在损失函数的 KL 上加一个超参数 β，让 KL 更小。它使得潜在因素的分量独立，如果 β 取 1 的时候，它就是典型的 VAE。生成式对抗网络领域是潜在因子的解耦性研究中最活跃的领域之一，其中 Hessian Penalty 令 hessian 矩阵的非对角线元素小（最好为 0）的想法，提高了模型的解耦性。

3 主要方法

3.1 Variational Graph Auto-Encoders

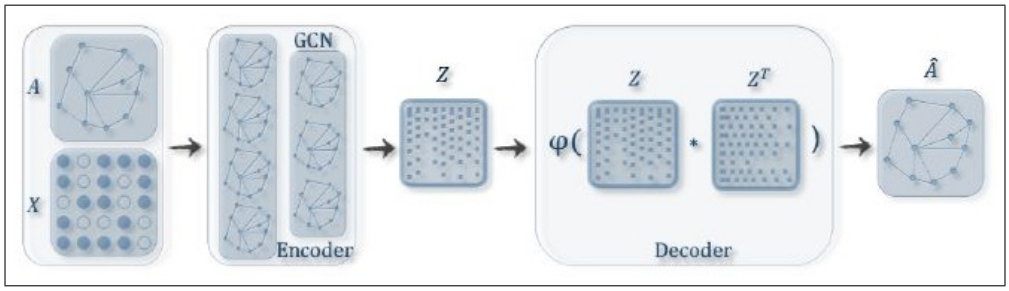


图 1: Variational Graph Auto-Encoders

本文中使用 VGAE 作为基本模型，它就是基于自动编码器（A-E）的一个图神经网络。它的编码部分从图信息获得图节点的嵌入（Z），解码部分从嵌入预测链接。使用 GCN 作为模型的编码器，内积作为解码器。图 1 所示，输入图的邻接矩阵 A 和节点的特征矩阵 X，编码器学习节点的特征向量生成嵌入，解码器生成图（预测链接）。解码部分一共使用三个图卷积层，第一层图卷积的输入为图的原节点特征向量 X 和连接矩阵 A，第二层使用两个 GCN 来分别得到高斯分布的均值 μ 和方差 σ ，再将使其与随机生成的噪声相乘，相加，便得到高斯分布上采样到的一个嵌入 Z，具体公式在 Eq1 到 Eq3 所示。

$$X_1 = GCN(X, A) \tag{1}$$

$$\mu = GCN_\mu(X_1, A) \qquad \sigma = GCN_\sigma(X_1, A) \tag{2}$$

$$Z = \mu + \epsilon \times \sigma \tag{3}$$

解码器由内积计算两个顶点之间存在链接的概率重构图，公式在 Eq4 所示。

$$A_{out} = sigmoid(Z^T, Z) \tag{4}$$

损失函数包括生成图和原始图之间的距离度量，以及节点表示向量分布和正态分布的散度两部分，损失函数公式在 Eq5 所示。

$$\mathcal{L}_{GAE} = E_{q(Z|X,A)}\left[\log(A|Z)\right] - KL\left[Q(Z|X,A)||p(Z)\right] \tag{5}$$

在 VGAE 的基础上，在损失函数的 KL 上加一个超参数 β，让 KL 更小，这样可以使得潜在因素的分量独立。使用这种方法的模型叫做 β-VGAE，它的损失函数在 Eq6 所示

$$\mathcal{L}_{GAE} = E_{q(Z|X,A)}\left[\log(A|Z)\right] - \beta \times KL\left[Q(Z|X,A)||p(Z)\right] \tag{6}$$

当 β 大于 1 的时候可以获得解耦效果，β 等于 1 的时候，它就是一个 VGAE。

3.2 Hessian Penalty

Hessian Penalty 是本文中主要针对测试并使用的解耦方法，源于 W. Peebles 在 2020 年 ECCV 上发表的一篇同名工作。该方法主要用于 GAN 模型，设计初衷是通过计算 GAN 模型中生成器（Generator）所生成 Latent Representation 的 Hessian 损失函数，鼓励生成器生成解耦度更高的 Representation。这个方法简便易懂，应用方便，适用于大量设计 Encoding 的模型，故在这篇工作里我们应用该方法以检验它对 GCN 的优化效果。

通过计算 Hessian 矩阵优化解耦性的原理如 Eq 6 所示，Hessian 矩阵的 ij 元素代表的是潜在因子 z_i 与 z_i 之间的二阶导数。如果该导数为 0，那他们就是数学意义上的不相关，促成解耦。Eq 6 中 G 代表的是生成器函数或模型。

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 G}{\partial z_i \partial z_j} = \frac{\partial}{\partial z_j}\left(\frac{\partial G}{\partial z_i}\right) \tag{7}$$

Hessian Loss 是 Hessian 矩阵非对角线元素元素之和（Eq 8）:

$$\mathcal{L}_H(G) = \sum_{i=1}^{|z|}\sum_{j\neq 1}^{|z|} H_{ij}^2 \tag{8}$$

然而当 $|z|$ 也就是 Latent Representation 的维度增大时，涉及到大量的二阶导数计算导致计算效率的大幅度下降，因此作者提出了使用一个无偏随机估计量用于简化计算（Eq 9, Eq 10）:

$$\mathcal{L}_H(G) = Var_v(v^T H v) \tag{9}$$

其中:

$$v^T H v \approx \frac{1}{2}[G(z+\epsilon v) - 2G(z) + G(z - \epsilon v) \tag{10}$$

ϵ 值为可调参数，参考值是 0.1。

由于图数据类型的特殊性，盲目在原始图数据上取梯度计算 Hessian Loss 并无意义，所以我们需将原始数据中的特征数据 X 和图结构数据 A 进行一次编码，得到编码器输出 Z 也就是我们在本篇工作中计算 Hessian Penalty 时所用到的输入数据。训练整体 GAE 时所用到损失函数使用 Eq 5 中的 $\mathcal{L}_{GAE}$ 与 Hessian Loss 所组成:

$$\mathcal{L}_{Total} = \mathcal{L}_{GAE} + \mathcal{L}_H(G) \tag{11}$$

4 实验结果

我们进行三个实验，在实验中均使用 Citeseer 数据集对该模型进行了链接预测。Hessian Metrix、AUC（the area under a receiver operating characteristic curve）和 AP（Average precision）作为实验的评价指标。

表 1: 用于实验的 Citeseer 数据集

Data Set	#Nodes	#Links	#Content Words	#Features
Citeseer	3,327	4,732	12,274,336	3,703

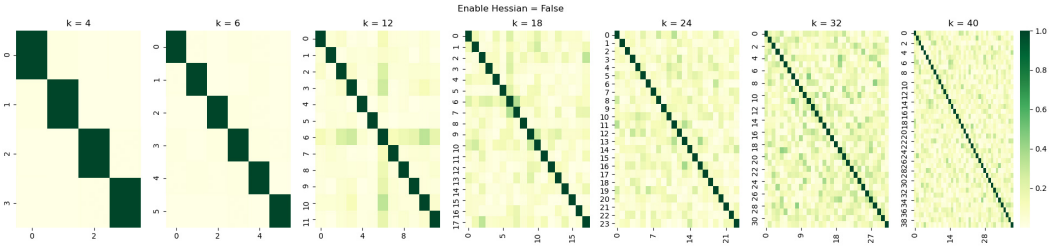
4.1 实验 1：证实 Hessian Penalty 对于 Latent Representational Factors 的聚合效果

在这个实验中，我们主要验证的是 Hessian Penalty 对于 GCN 模型解耦性能的提升效果。绝对相关图（Absolute Correlation Plot）是一种定性测量方法，它能够直观的展现出 **z** 的解耦程度。如果任意图中的数值集中在对角线上，便说明解耦程度高。反之如果数值分布较为分散，那么可以认为解耦程度较低。每两个潜在因子之间的相关度绝对值越高，数值越接近 1，那么在图 2 中的颜色就越深（绿色），反之越接近 0（无相关性）则越接近于浅黄色。在完美解耦的情况下，潜在因子因独立对应于一个特征并且因子之间相互独立，那么 Latent Representation 的相关矩阵（Correlation Matrix）应当为一个完全对角矩阵。注：在本文中，$|z|$ = 潜在因子的数量 = k

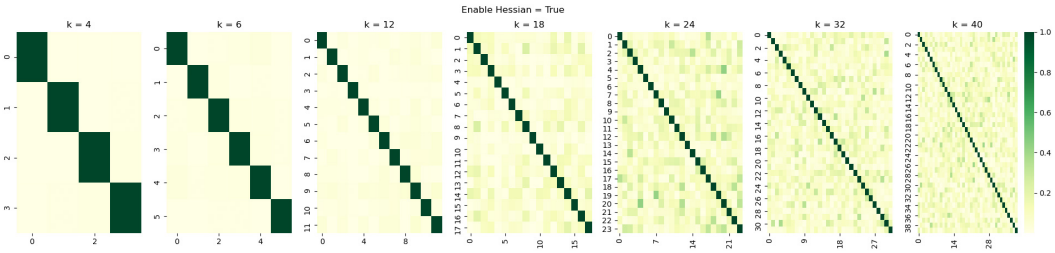
表 2: 三种模型在不同 k 下的平均测试精度，单次试验数据

	$k=4$	$k=6$	$k=12$	$k=18$	$k=24$	$k=32$	$k=40$
GAE	0.888	0.892	0.920	0.914	0.912	0.891	0.906
GAE + Hessian Penalty	0.883	0.886	0.919	0.910	0.895	0.909	0.905
β-GAE, $\beta = 1000$	0.830	0.785	0.817	0.812	0.823	0.818	0.836

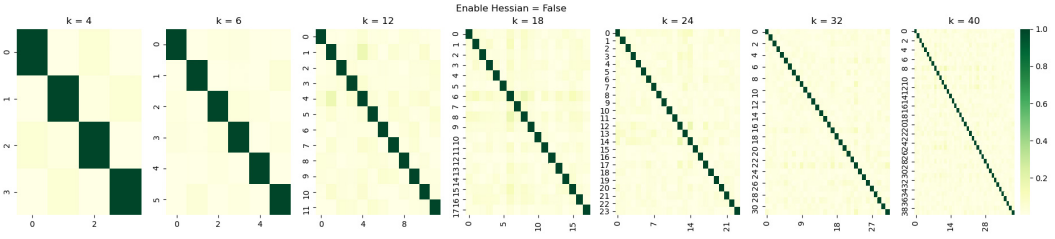
主观上看，我们可以看出在 $k = 12$ 和 $k = 18$ 时 GAE+Hessian 的模型较于纯 GAE 相比，减小了数值分散，然而在其他的情况下并无明显提升。原 GAE 在 k 小于等 6 时就已经可以达成很大的解耦度，而两者在 k 大于等于 18 时均表现出解耦都下降的区别。精度方面，单次数据结果表明 Hessian 对于预测效率有负面干扰，精度平均下降了 1% 左右，我们将在截下来的实验 2 中更准确的去认证两者之间的精度差。相比传统的在 GAE 中介入 β 参数从而达到解耦目的的方法，Hessian 虽然没有大幅度降低精度，但也未能综合情况下实现更明显的解耦效果。如（c）图中所示，把 β 参数从 1 调到 1000 可以达到很好的解耦效果，但是所承受的代价也是将近 10% 的精度下降。



(a) Pure GAE (No Hessian Penalty)



(b) GAE + Hessian Penalty



(c) β-GAE, $\beta = 1000$

图 2: Latent Factor Correlation Plot. GAE 模型在损失函数中加入 Hessian Penalty 前后的对比。两组模型除损失函数包不包含 Hessian Penalty 外的其他超参数均相同，7 张图的横坐标为 Latent Representation $\mathbf{z}$ 的 Latent Factor 总数 $\mathbf{k}$，分别为 $\mathbf{k} = [4, 6, 12, 18, 24, 32, 40]$。

4.2 实验 2：Hessian Penalty 对于链接预测任务的影响

实验 2 的目的是证实 Hessian Penalty 是否能够真正的提升链接预测任务的效率。我们一共做了 3 组实验，每个实验测试不同 k 参数下两个模型的预测精度的差距。为了保证数据的精确度 (Precision)，每个模型的结果均为 10 轮实验的平均，并且我们提供了每个 AP 分数的标准误差值。

10 次实验数据平均结果表明，Hessian Penalty 对于链接预测精度是有负面影响的，下降幅度约为 0.8% 至 1.1% 之间。本次实验中，Hessian Loss 在损失函数中权重为 1E-5，Hessian Loss 的大小与 $\mathcal{L}_{GAE}$ 差距不大。

表 3: 两种模型在不同 k 下的平均测试精度，10 次试验数据平均

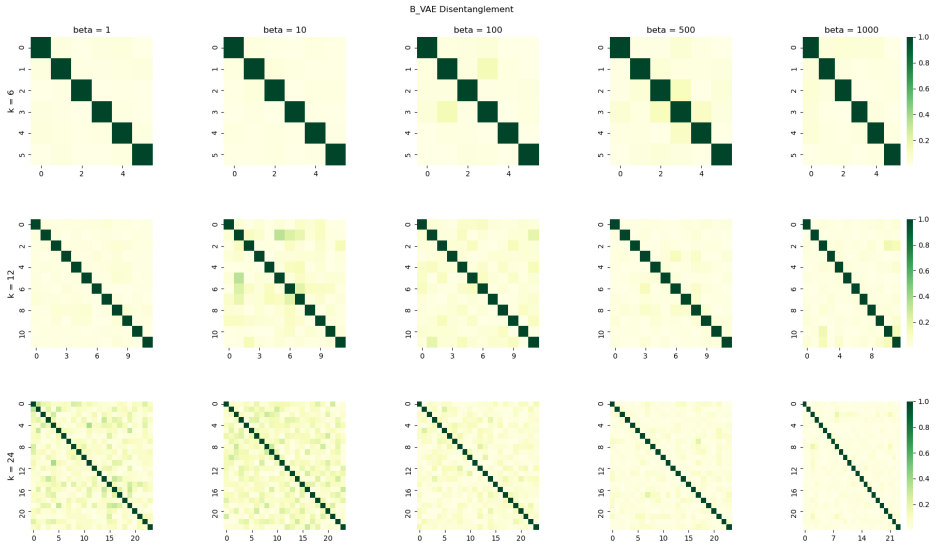
Models	$k = 6$	$k = 12$	$k = 18$
	AP Score	AP Score	AP Score
GAE	0.905 ±0.011	0.921 ±0.011	0.921 ±0.010
GAE + Hessian Penalty	0.896 ±0.010	0.913 ±0.009	0.910 ±0.009

4.3 实验 3：β 参数对于解耦性的影响以及其与 Hessian Penalty 的相互作用

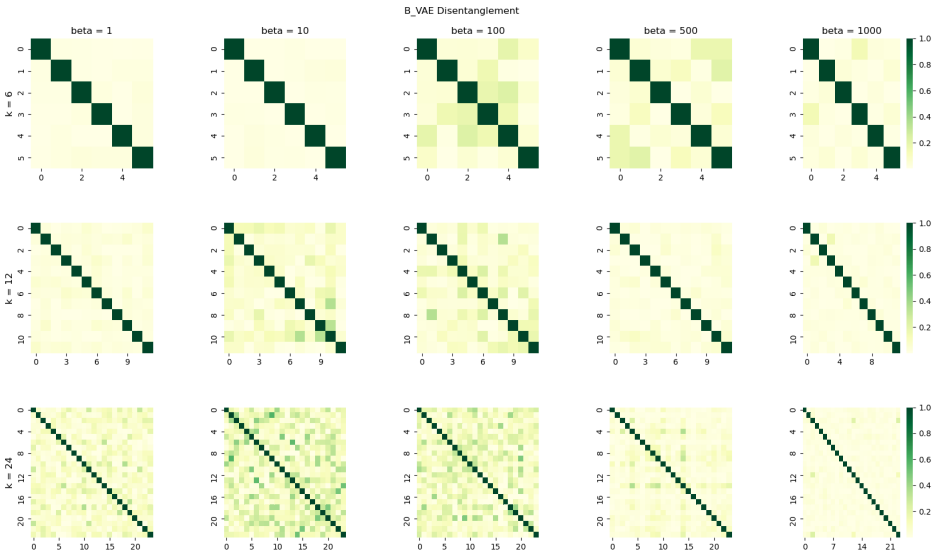
在以上两个实验使用的是纯 GAE 模型，β 参数预设为 1。β 参数的应用原理与 Hessian Penalty 类似，设计初衷都是提高模型解耦性能。在这个实验中，我们将调整 β 参数的大小来分析它对解耦度的影响程度。另外，在其中的一个实验中我们会将 β 参数与 Hessian Penalty 结合使用，观察两者的相互作用。

表 4: 改变 k 与 β 两个变量与添加 Hessian Penalty 所产生模型的平均测试精度，单次试验数据

	$\beta = 1$	$\beta = 10$	$\beta = 100$	$\beta = 500$	$\beta = 1000$
β-GAE (k=12)	0.918	0.883	0.840	0.842	0.820
β-GAE + Hessian Penalty (k=12)	0.927	0.891	0.853	0.781	0.758
β-GAE (k=24)	0.917	0.889	0.845	0.863	0.796
β-GAE + Hessian Penalty (k=24)	0.920	0.904	0.835	0.785	0.747



(a) β-GAE (No Hessian Penalty)



(b) β-GAE + Hessian Penalty

图 3: Latent Factor Correlation Plot. 从左到右分别为 $\beta = [1, 10, 100, 500, 100]$, 从上到下分别为 $k = [6, 12, 24]$。例如第二行第四列所对应模型的两个变量分别为 ($\beta = 500, k = 12$)。我们可从以上实验结果表明，当 Hessian Penalty 和 β 参数一起生效时导致解耦因子分散，主要表现在（b）图中 ($\beta = [10,100], k = 24$) 这两张图。另外，β 参数越大，产生的解耦效果越好，但是代价是预测精度的下降，故无法确认其他工作中所提出的解耦度和预测精度的正相关关系。

5 总结

我们参考相关研究，在 VGAE 的基础上引入 Disentanglement 的思路，使用 Hessian Penalty 和调整 β 参数进行了三种实验。通过这三种实验表明, Hessian Penalty 和。但是加 Hessian Penalty 却导致之后模型的精度低于纯 GAE，Penalty 达到对 Model Disentanglement 更加显著的优化效果, 但是随之的代价就是精度的大幅度下降（ 10%）。我们认为导致这种结果有几种原因。首先，链接预测任务相对而言不是很复杂，简易的 GAE 模型就能达到比较高的精度（ 90%）。第二，β-VAE 和 Hessian Penalty 都是针对生成式模型的方法，其主要设计初衷是为了提升无监督的生成任务中模型的 Disentanglement 效果，对于监督学习任务的精度提升并无保障，然而，由于我们的实验是基于监督学习，任务中需首要考虑模型的精度问题。通过我们的实验结果，我们认为模型的 Disentanglment 和精度可能是一个 Trade-Off 的关系。根据 J. Ma 在 2019 年提出的 Disentangled GCN 工作中，DisenGCN 在节点分类上获得了好的 disentanglement 和精度，GAE 的编码部分使用 Disentangled 图卷积会有效果, 因此作者引出了 Disentanglment 和预测精度的正相关关系。然而在我们的实验设定下，数据无法证实出类似的结论。Disentanglement 的提升是否能够真正提升监督学习任务的精度还有待考究。最后，Factor VAE 提出了解耦性和精度两方面都获得比较好结果的方法，以后的研究可以在 VGAE 的基础上引入 Factor VAE 中的优化方法进行，以便证明在监督学习任务中两者之间是否存在正相关关系。

参考文献

[1] Thomas N. Kipf and Max Welling. Variational Graph Auto-Encoders, 2016; arXiv:1611.07308.

[2] Kipf, Thomas N and Welling, Max Semi-supervised classification with graph convolutional networks arXiv:1609.02907

[3] Pan, Shirui and Hu, Ruiqi and Long, Guodong and Jiang, Jing and Yao, Lina and Zhang, Chengqi Adversarially regularized graph autoencoder for graph embedding, 2018; arXiv:1802.04407.

[4] William Peebles, John Peebles, Jun-Yan Zhu, Alexei Efros and Antonio Torralba. The Hessian Penalty: A Weak Prior for Unsupervised Disentanglement, 2020; arXiv:2008.10599.

[5] Christopher P. Burgess, Irina Higgins, Arka Pal, Loic Matthey, Nick Watters, Guillaume Desjardins and Alexander Lerchner. Understanding disentangling in -VAE, 2018; arXiv:1804.03599.

[6] Jianxin Ma, Peng Cui, Kun Kuang, Xin Wang, Wenwu Zhu. Disentangled Graph Convolutional Networks, 2019; Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning, PMLR 97:4212-4221.

[7] Kim, Hyunjik and Mnih, Andriy. Disentangling by factorising, 2018; arXiv:1802.05983.