基于图神经网络的节点表征学习

引言

在图节点预测或边预测任务中，需要先构造节点表征（representation），节点表征是图节点预测和边预测任务成功的关键。在此篇文章中，我们将学习如何基于图神经网络学习节点表征。

在节点预测任务中，我们拥有一个图，图上有很多节点，部分节点的预测标签已知，部分节点的预测标签未知。**我们的任务是根据节点的属性(可以是类别型、也可以是数值型)、边的信息、边的属性（如果有的话）、已知的节点预测标签，对未知标签的节点做预测。**

我们将以`Cora`数据集为例子进行说明，`Cora`是一个论文引用网络，节点代表论文，如果两篇论文存在引用关系，那么认为对应的两个节点之间存在边，每个节点由一个1433维的词包特征向量描述。我们的任务是推断每个文档的类别（共7类）。

为了展现图神经网络的强大，**我们通过节点分类任务来比较MLP和GCN, GAT（两个知名度很高的图神经网络）三者的节点表征学习能力。**此节内容安排为：

1. 首先，我们要做一些准备工作，即**获取并分析数据集、构建一个方法用于分析节点表征的分布。**
2. 然后，我们**考察MLP用于节点分类的表现**，并**分析基于MLP学习到的节点表征的分布。**
3. 接着，我们**逐一介绍GCN, GAT这两个图神经网络的理论、他们在节点分类任务中的表现以及它们学习到的节点表征的分布。**
4. 最后，我们**比较三者在节点表征学习能力上的差异。**

准备工作

获取并分析数据集

```
from torch_geometric.datasets import Planetoid
from torch_geometric.transforms import
NormalizeFeatures
```

```
3
4  dataset = Planetoid(root='data/Planetoid', name='Cora',
   transform=NormalizeFeatures())
5
6  print()
7  print(f'Dataset: {dataset}:')
8  print('======================')
9  print(f'Number of graphs: {len(dataset)}')
10 print(f'Number of features: {dataset.num_features}')
11 print(f'Number of classes: {dataset.num_classes}')
12
13 data = dataset[0]  # Get the first graph object.
14
15 print()
16 print(data)
17 print('======================')
18
19 # Gather some statistics about the graph.
20 print(f'Number of nodes: {data.num_nodes}')
21 print(f'Number of edges: {data.num_edges}')
22 print(f'Average node degree: {data.num_edges /
   data.num_nodes:.2f}')
23 print(f'Number of training nodes:
   {data.train_mask.sum()}')
24 print(f'Training node label rate:
   {int(data.train_mask.sum()) / data.num_nodes:.2f}')
25 print(f'Contains isolated nodes:
   {data.contains_isolated_nodes()}')
26 print(f'Contains self-loops:
   {data.contains_self_loops()}')
27 print(f'Is undirected: {data.is_undirected()}')
28
```

我们可以看到，`Cora`图拥有2,708个节点和10,556条边，平均节点度为3.9。我们仅使用140个有真实标签的节点（每类20个）用于训练。有标签的节点的比例只占到5%。进一步我们可以看到，这个图是无向图，不存在孤立的节点（即每个文档至少有一个引文）。**数据转换在将数据输入到神经网络之前修改数据，这一功能可用于实现数据规范化或数据增强。**在此例子中，我们使用`NormalizeFeatures`，进行节点特征归一化，使各节点特征总和为`1`。其他数据转换方法请参阅torch-geometric-transforms。

可视化节点表征分布的方法

```
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.manifold import TSNE

def visualize(h, color):
    z = TSNE(n_components=2).fit_transform(out.detach().cpu().numpy())
    plt.figure(figsize=(10,10))
    plt.xticks([])
    plt.yticks([])

    plt.scatter(z[:, 0], z[:, 1], s=70, c=color, cmap="Set2")
    plt.show()

```

为了实现节点表征分布的可视化，我们先利用TSNE将高维节点表征嵌入到二维平面空间，然后在二维平面空间画出节点。

MLP在图节点分类中的应用

理论上，我们应该能够仅根据文件的内容，即它的词包特征表示来推断文件的类别，而无需考虑文件之间的任何关系信息。让我们通过构建一个简单的MLP来验证这一点，该网络只对输入节点的特征进行操作，它在所有节点之间共享权重。

MLP图节点分类器：

```
import torch
from torch.nn import Linear
import torch.nn.functional as F

class MLP(torch.nn.Module):
    def __init__(self, hidden_channels):
        super(MLP, self).__init__()
        torch.manual_seed(12345)
        self.lin1 = Linear(dataset.num_features, hidden_channels)

```

```
        self.lin2 = Linear(hidden_channels, dataset.num_classes)

    def forward(self, x):
        x = self.lin1(x)
        x = x.relu()
        x = F.dropout(x, p=0.5, training=self.training)
        x = self.lin2(x)
        return x

model = MLP(hidden_channels=16)
print(model)
```

我们的MLP由两个线程层、一个`ReLU`非线性层和一个`dropout`操作。第一线程层将1433维的特征向量嵌入（embedding）到低维空间中（`hidden_channels=16`），第二个线性层将节点表征嵌入到类别空间中（`num_classes=7`）。

我们利用**交叉熵损失**和**Adam优化器**来训练这个简单的MLP网络。

```
model = MLP(hidden_channels=16)
criterion = torch.nn.CrossEntropyLoss()  # Define loss criterion.
optimizer = torch.optim.Adam(model.parameters(), lr=0.01, weight_decay=5e-4)  # Define optimizer.

def train():
    model.train()
    optimizer.zero_grad()  # Clear gradients.
    out = model(data.x)  # Perform a single forward pass.
    loss = criterion(out[data.train_mask], data.y[data.train_mask])  # Compute the loss solely based on the training nodes.
    loss.backward()  # Derive gradients.
    optimizer.step()  # Update parameters based on gradients.
    return loss

for epoch in range(1, 201):
```

```
    loss = train()
    print(f'Epoch: {epoch:03d}, Loss: {loss:.4f}')

```

训练完模型后，我们可以进行测试，以检验这个简单的MLP模型在未知标签的节点上表现如何。

```
def test():
    model.eval()
    out = model(data.x)
    pred = out.argmax(dim=1)  # Use the class with highest probability.
    test_correct = pred[data.test_mask] == data.y[data.test_mask]  # Check against ground-truth labels.
    test_acc = int(test_correct.sum()) / int(data.test_mask.sum())  # Derive ratio of correct predictions.
    return test_acc

test_acc = test()
print(f'Test Accuracy: {test_acc:.4f}')
```

正如我们所看到的，我们的MLP表现相当糟糕，只有大约59%的测试准确性。

为什么MLP没有表现得更好呢？其中一个重要原因是，用于训练此神经网络的有标签节点数量过少，此神经网络被过拟合，它对未见过的节点泛化性很差。

GCN及其在图节点分类任务中的应用

GCN的定义

GCN 神经网络层来源于论文“Semi-supervised Classification with Graph Convolutional Network”，其数学定义为，

$$\mathbf{X}' = \hat{\mathbf{D}}^{-1/2}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{D}}^{-1/2}\mathbf{X}\mathbf{\Theta}, \tag{1}$$

其中$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{I}$表示插入自环的邻接矩阵，$\hat{D}_{ii} = \sum_{j=0} \hat{A}_{ij}$表示其对角线度矩阵。邻接矩阵可以包括不为1的值，当邻接矩阵不为`{0,1}`值时，表示邻接矩阵存储的是边的权重。$\hat{\mathbf{D}}^{-1/2}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{D}}^{-1/2}$对称归一化矩阵。

它的节点式表述为：

$$\mathbf{x}_i' = \mathbf{\Theta} \sum_{j \in \mathcal{N}(v) \cup \{i\}} \frac{e_{j,i}}{\sqrt{\hat{d}_j \hat{d}_i}} \mathbf{x}_j \tag{2}$$

其中，$\hat{d}_i = 1 + \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} e_{j,i}$，$e_{j,i}$表示从源节点$j$到目标节点$i$的边的对称归一化系数（默认值为1.0）。

PyG中`GCNConv`模块说明

`GCNConv`构造函数接口：

```
GCNConv(in_channels: int, out_channels: int, improved: bool = False, cached: bool = False, add_self_loops: bool = True, normalize: bool = True, bias: bool = True, **kwargs)
```

其中：

- `in_channels`：输入数据维度；
- `out_channels`：输出数据维度；
- `improved`：如果为`true`，$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + 2\mathbf{I}$，其目的在于增强中心节点自身信息；
- `cached`：是否存储$\hat{\mathbf{D}}^{-1/2}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{D}}^{-1/2}$的计算结果以便后续使用，这个参数只应在归纳学习（transductive learning）的景中设置为`true`；
- `add_self_loops`：是否在邻接矩阵中增加自环边；
- `normalize`：是否添加自环边并在运行中计算对称归一化系数；
- `bias`：是否包含偏置项。

详细内容请大家参阅GCNConv官方文档。

基于GCN图神经网络的图节点分类

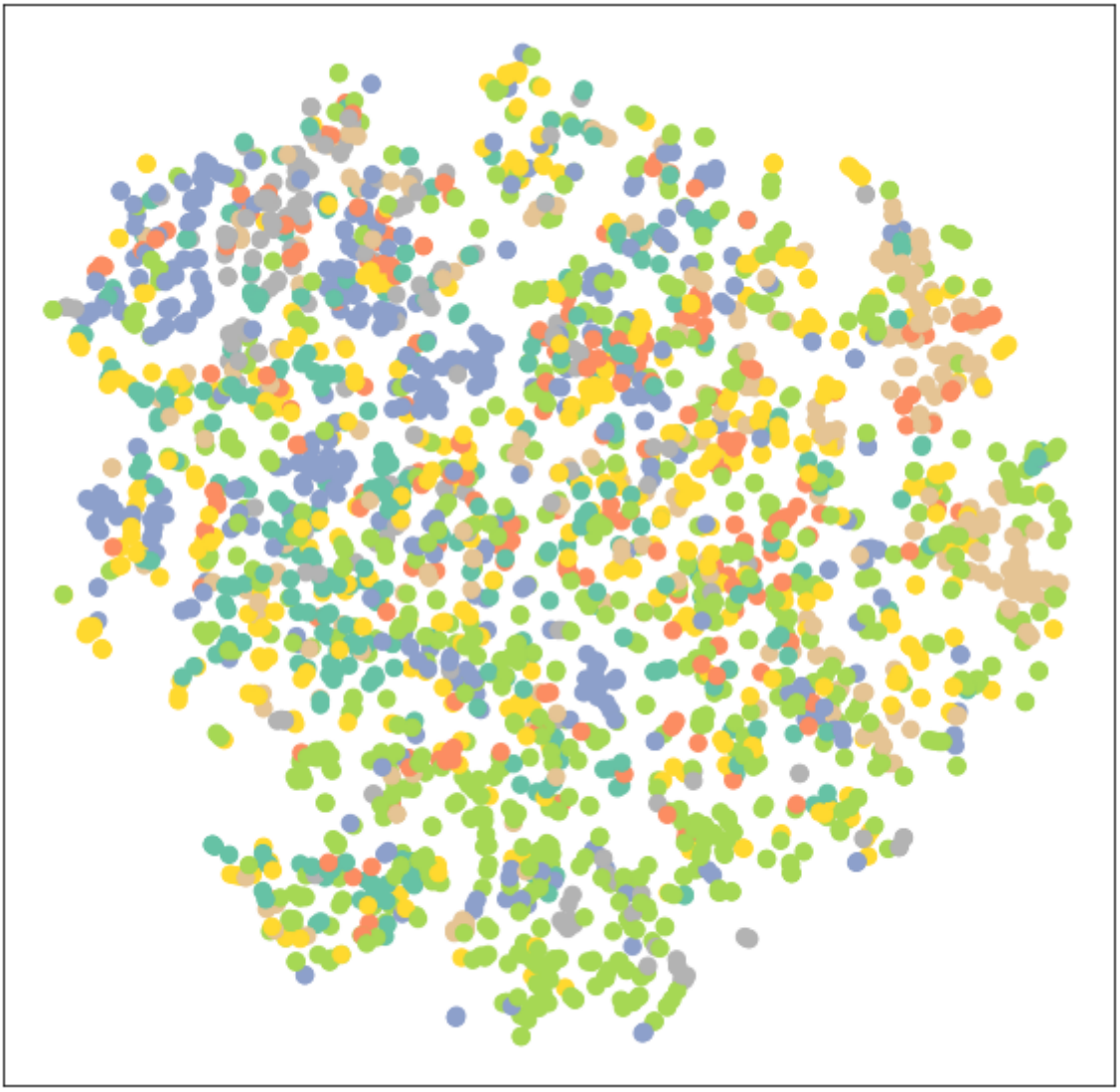
通过将`torch.nn.Linear` layers 替换为PyG的GNN Conv Layers，我们可以轻松地将MLP模型转化为GNN模型。在下方的例子中，我们将MLP例子中的`linear`层替换为`GCNConv`层。

```
from torch_geometric.nn import GCNConv

class GCN(torch.nn.Module):
    def __init__(self, hidden_channels):
        super(GCN, self).__init__()
        torch.manual_seed(12345)
        self.conv1 = GCNConv(dataset.num_features, hidden_channels)
        self.conv2 = GCNConv(hidden_channels, dataset.num_classes)

    def forward(self, x, edge_index):
        x = self.conv1(x, edge_index)
        x = x.relu()
        x = F.dropout(x, p=0.5, training=self.training)
        x = self.conv2(x, edge_index)
        return x

model = GCN(hidden_channels=16)
print(model)

```

现在先让我们可视化我们的**未训练的**GCN网络的节点表征。

```
model = GCN(hidden_channels=16)
model.eval()

out = model(data.x, data.edge_index)
visualize(out, color=data.y)
```

经过`visualize`函数的处理，7维特征的节点被嵌入到2维的平面上。我们可以惊喜地发现存在同类节点聚集一起的情况。



现在让我们训练GCN节点分类器：

```
model = GCN(hidden_channels=16)
optimizer = torch.optim.Adam(model.parameters(), lr=0.01, weight_decay=5e-4)
criterion = torch.nn.CrossEntropyLoss()

def train():
      model.train()
      optimizer.zero_grad()  # Clear gradients.
      out = model(data.x, data.edge_index)  # Perform a single forward pass.
      loss = criterion(out[data.train_mask], data.y[data.train_mask])  # Compute the loss solely based on the training nodes.
      loss.backward()  # Derive gradients.
      optimizer.step()  # Update parameters based on gradients.
```

```
        return loss

for epoch in range(1, 201):
    loss = train()
    print(f'Epoch: {epoch:03d}, Loss: {loss:.4f}')

```

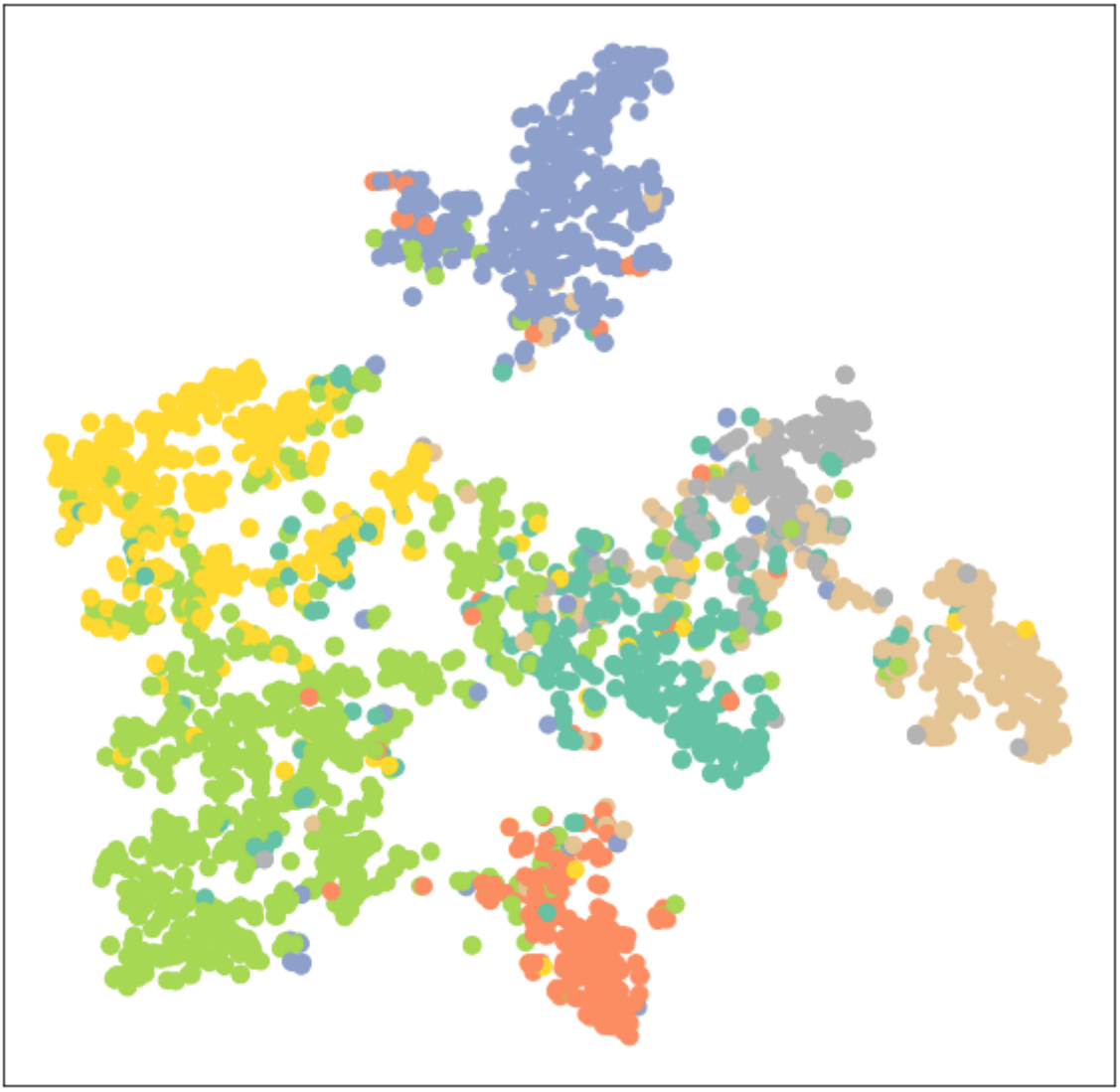
在训练过程结束后，我们检测GCN节点分类器在测试集上的准确性：

```
def test():
      model.eval()
      out = model(data.x, data.edge_index)
      pred = out.argmax(dim=1)  # Use the class with highest probability.
      test_correct = pred[data.test_mask] == data.y[data.test_mask]  # Check against ground-truth labels.
      test_acc = int(test_correct.sum()) / int(data.test_mask.sum())  # Derive ratio of correct predictions.
      return test_acc

test_acc = test()
print(f'Test Accuracy: {test_acc:.4f}')
```

通过简单地将线性层替换成GCN层，我们可以达到81.4%的测试准确率！与前面的仅获得59%的测试准确率的MLP分类器相比，现在的分类器准确性要高得多。这表明节点的邻接信息在取得更好的准确率方面起着关键作用。

最后我们还可以通过可视化我们**训练过的**模型输出的节点表征来再次验证这一点，现在同类节点的聚集在一起的情况更加明显了。

```
model.eval()

out = model(data.x, data.edge_index)
visualize(out, color=data.y)
```



GAT及其在图节点分类任务中的应用

GAT的定义

图注意网络（GAT）来源于论文 Graph Attention Networks。其数学定义为，

$$\mathbf{x}'_i = \alpha_{i,i}\mathbf{\Theta}\mathbf{x}_i + \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \alpha_{i,j}\mathbf{\Theta}\mathbf{x}_j, \tag{3}$$

其中注意力系数$\alpha_{i,j}$的计算方法为，

$$\alpha_{i,j} = \frac{\exp\left(\text{LeakyReLU}\left(\mathbf{a}^\top [\mathbf{\Theta}\mathbf{x}_i \,\|\, \mathbf{\Theta}\mathbf{x}_j]\right)\right)}{\sum_{k \in \mathcal{N}(i)\cup\{i\}} \exp\left(\text{LeakyReLU}\left(\mathbf{a}^\top [\mathbf{\Theta}\mathbf{x}_i \,\|\, \mathbf{\Theta}\mathbf{x}_k]\right)\right)}. \tag{4}$$

PyG中GATConv模块说明

GATConv构造函数接口：

```
GATConv(in_channels: Union[int, Tuple[int, int]],
out_channels: int, heads: int = 1, concat: bool = True,
negative_slope: float = 0.2, dropout: float = 0.0,
add_self_loops: bool = True, bias: bool = True,
**kwargs)
```

其中：

- in_channels：输入数据维度；
- out_channels：输出数据维度；
- heads：在GATConv使用多少个注意力模型（Number of multi-head-attentions）；
- concat：如为true，不同注意力模型得到的节点表征被拼接到一起（表征维度翻倍），否则对不同注意力模型得到的节点表征求均值；

详细内容请大家参阅GATConv官方文档

基于GAT图神经网络的图节点分类

这一次，我们将MLP例子中的linear层替换为GATConv层，来实现基于GAT的图节点分类神经网络。

```
import torch
from torch.nn import Linear
import torch.nn.functional as F

from torch_geometric.nn import GATConv

class GAT(torch.nn.Module):
    def __init__(self, hidden_channels):
        super(GAT, self).__init__()
        torch.manual_seed(12345)
        self.conv1 = GATConv(dataset.num_features,
hidden_channels)
        self.conv2 = GATConv(hidden_channels,
dataset.num_classes)

```

```
    def forward(self, x, edge_index):
        x = self.conv1(x, edge_index)
        x = x.relu()
        x = F.dropout(x, p=0.5, training=self.training)
        x = self.conv2(x, edge_index)
        return x

```

基于GAT图神经网络的训练和测试，与基于GCN图神经网络的训练和测试相同，此处不再赘述。

结语

在节点表征的学习中，MLP节点分类器只考虑了节点自身属性，**忽略了节点之间的连接关系**，它的结果是最差的；而GCN与GAT节点分类器，**同时考虑了节点自身属性与周围邻居节点的属性**，它们的结果优于MLP节点分类器。从中可以看出**邻居节点的信息对于节点分类任务的重要性。**

基于图神经网络的节点表征的学习遵循消息传递范式：

- 在邻居节点信息变换阶段，GCN与GAT都对邻居节点做归一化和线性变换（两个操作不分前后）；
- 在邻居节点信息聚合阶段都将变换后的邻居节点信息做求和聚合；
- 在中心节点信息变换阶段只是简单返回邻居节点信息聚合阶段的聚合结果。

GCN与GAT的区别在于邻居节点信息聚合过程中的**归一化方法不同**：

- 前者根据中心节点与邻居节点的度计算归一化系数，后者根据中心节点与邻居节点的相似度计算归一化系数。
- 前者的归一化方式依赖于图的拓扑结构，不同节点其自身的度不同、其邻居的度也不同，在一些应用中可能会影响泛化能力。
- 后者的归一化方式依赖于中心节点与邻居节点的相似度，相似度是训练得到的，因此不受图的拓扑结构的影响，在不同的任务中都会有较好的泛化表现。

作业

- 此篇文章涉及的代码可见于`codes/learn_node_representation.ipynb`，请参照这份代码使用

PyG中不同的图卷积层在PyG的不同数据上实现节点分类或回归任务。

参考文献

- PyG中内置的数据转换方法：torch-geometric-transforms
- 一个可视化高纬数据的工具：t-distributed Stochastic Neighbor Embedding
- 提出GCN的论文：Semi-supervised Classification with Graph Convolutional Network
- GCNConv官方文档：torch_geometric.nn.conv.GCNConv
- 提出GAT的论文： Graph Attention Networks