

图预测任务实践

引言

接下来我们将使用第8节中介绍的基于GIN的图表示学习神经网络，和在上半节中我们自己定义的数据集来实现分子图的量子性质预测任务。

通过试验寻找最佳超参数

此任务实践涉及的所有代码皆可见于 `codes\gin_regression` 文件夹。

通过运行以下的命令即可运行一次试验：

```
1  #!/bin/sh
2
3  python main.py --task_name GINGraphPooling\      # 为当前
   试验取名
4
5  --device 0\
   GINConv层数
6  --num_layers 5\                                # 使用
   方法
7  --graph_pooling sum\                          # 图读出
   入维度
8  --emb_dim 256\                                # 节点嵌
9  --drop_ratio 0.\
   测试集做预测并保留预测结果
10 --save_test\                                  # 是否对
11 --batch_size 512\
12 --epochs 100\
13 --weight_decay 0.00001\
   `early_stop`个epochs验证集结果没有提升，则停止训练
14 --early_stop 10\                              # 当有
15 --num_workers 4\
   数据集的根目录
16 --dataset_root dataset                        # 存放数
```

试验运行开始后，程序会在 `saves` 目录下创建一个 `task_name` 参数指定名称的文件夹用于记录试验过程，当 `saves` 目录下已经有一个同名的文件夹时，程序会在 `task_name` 参数末尾增加一个后缀作为文件夹名称。试验运行过程中，所有的 `print` 输出都会写入到试验文件夹下的 `output` 文件，`tensorboard.Summarywriter` 记录的信息也存储在试验文件夹下的文件中。

修改上方的命令再执行，即可试验不同的超参数，所有试验的过程与结果信息都存储于 `saves` 文件夹下。启动 `TensorBoard` 会话，选择 `saves` 文件夹，即可查看所有试验的过程与结果信息。

结语

在此图预测任务实践中：

- 我们将前面所学的基于GIN的图表示学习神经网络和超大规模数据集类的创建方法付诸于实际应用；
- 我们构建了一种很方便的设置不同参数进行试验的方法，不同试验的过程与结果信息通过简单的操作即可进行比较分析。

作业

请小伙伴们进行不同超参数的试验，通过观察不同试验的过程与结果信息的差别分析不同超参数对图预测任务的影响。