

# GCN, GAT, GraphSAGE

笔记本：深度学习

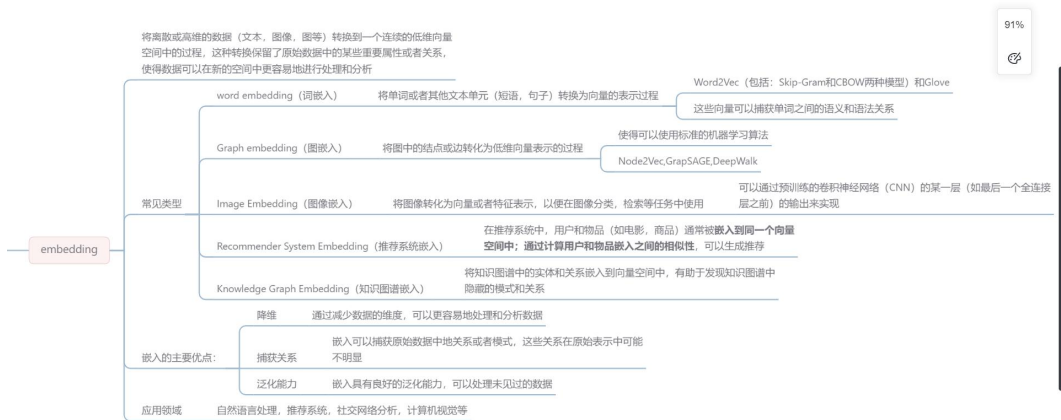
创建时间：2024/5/17 20:48

更新时间：2024/5/18 14:21

作者：ztn

**GCN：图卷积网络**  
与CNN（卷积神经网络）的作用类似，都是特征提取器，但是GCN的处理对象是图数据；

**首次将图像处理中的卷积操作简单的用到图结构数据处理中来，并且给出了具体的推导**  
(穿插：embedding：将离散或高维的数据（文本，图像，图等）转换到一个连续的低维向量空间中的过程，这种转换保留了原始数据中的某些重要属性或者关系，使得数据可以在新的空间中更容易地进行处理和分析；、  
常见的embedding：



设计了一种从图数据中提取特征的方法，这些特征可以用于图数据的节点分类，图分类，边预测等任务，顺便可以得到图的嵌入表示。

GCN的一个重要结点是**其节点的聚合表征不包含它自己的特征**，而是**相邻节点的特征聚合**，只有具有**自环（self\_loop）**的节点才会在该聚合中包含自己的特征。为了避免大的节点在其特征表征中具有较大的值，度小的节点具有较小的值，可能会导致梯度消失或者梯度爆炸的问题，可以通过增加自环来解决。

## 什么是节点的聚合表征？

结点的聚合表征是通过聚合其邻域节点的信息来生成的，这个过程可以视为一种**特征提取**，用于捕捉节点的局部结构和属性信息；

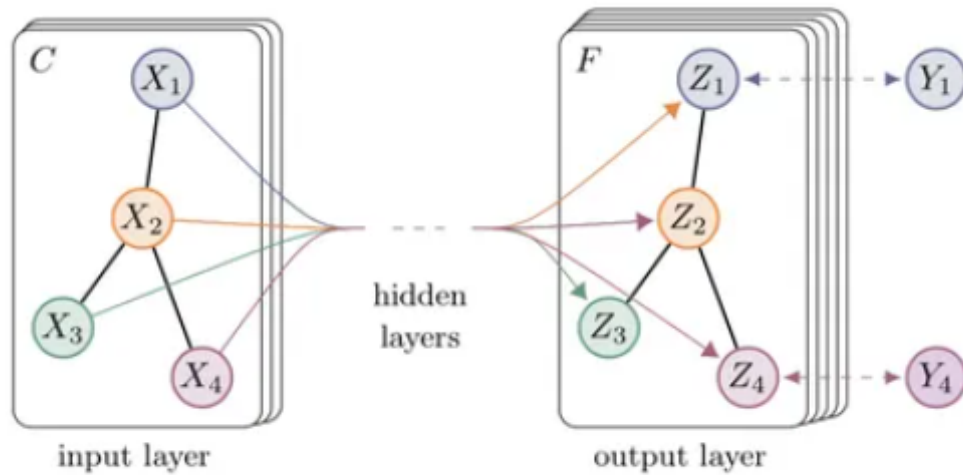
具体来说：在图神经网络中，每个节点都与去其相邻节点通过边相连，为了生成节点的表征，图神经网络会聚合这些节点及其邻域节点的信息，这通常通过一系列的图卷积操作来实现，**每个节点都会将其自身特征和邻域节点进行聚合，从而生成新的节点表征，（由于聚合了邻域节点的信息，节点的特征也具有一定的全局性，能够反映节点在整个图结构中的位置和角色）**

聚合：聚合过程的目标是通过图中的节点和边特征来**更新**每个节点的表示，这通常包括两个步骤，信息传递和信息聚合，信息传递是指通过节点之间的边将信息从邻居节点传递到目标节点。而信息聚合则是将传递过来的信息与目标节点的特征进行融合。

(eg:节点聚合可以学习用户和物品的嵌入，以捕捉用户的兴趣和物品的特征。)



那其实根据度矩阵以及上述计算方式：0-0 “DAD” =  $\frac{1}{\sqrt{3}} * \frac{1}{\sqrt{3}}$ ，对应的边的权值是所连接的两个顶点的对应的D的值；0-1:  $\frac{1}{\sqrt{3}} * \frac{1}{\sqrt{3}}$ , 0-2:  $\frac{1}{\sqrt{3}} * \frac{1}{\sqrt{4}}$



(a) Graph Convolutional Network

$$Z = f(X, A) = \text{softmax} \left( \hat{A} \text{ReLU} \left( \hat{A} X W^{(0)} \right) W^{(1)} \right).$$

计算所有带有标签的样本的交叉熵：

$$\mathcal{L} = - \sum_{l \in \mathcal{Y}_L} \sum_{f=1}^F Y_{lf} \ln Z_{lf},$$

---

**Algorithm 1: WL-1 algorithm (Weisfeiler & Lehmann, 1968)**

---

**Input:** Initial node coloring  $(h_1^{(0)}, h_2^{(0)}, \dots, h_N^{(0)})$

**Output:** Final node coloring  $(h_1^{(T)}, h_2^{(T)}, \dots, h_N^{(T)})$

$t \leftarrow 0$ ;

**repeat**

**for**  $v_i \in \mathcal{V}$  **do**

$h_i^{(t+1)} \leftarrow \text{hash} \left( \sum_{j \in \mathcal{N}_i} h_j^{(t)} \right)$ ;

$t \leftarrow t + 1$ ;

**until** stable node coloring is reached;

---

(也就是上面的GCN的核心计算公式的实现；