

基于结构感知的多图学习方法

付东来, 高泽安

(中北大学软件学院, 山西太原 030051)

摘要: 多图学习是一种非常重要的学习范式. 与多示例学习相比, 在多图学习中包表示一个对象, 包中的每一个图对应一个子对象. 这种数据表示方法能够表达子对象的结构信息. 但是, 现有的多图学习方法不仅隐含假设包内的图满足独立同分布, 而且多采用将多图学习问题转变为多示例学习问题的技术思路. 这类多图学习方法容易损失图自身及图间的结构信息. 针对上述问题, 本文提出一种基于结构感知的多图学习方法, 有效学习图自身和图间的结构信息. 该方法利用图核, 通过计算图之间的相似度保留图自身的结构信息, 通过生成包级图表达图间的结构信息, 并且设计包编码器有效学习图间的结构信息. 在 NCI(1)、NCI(109) 和 AIDB 三个多图数据集上的实验结果表明, 所提方法相较于现有方法在准确率、精确率、 F_1 值和 AUC 上分别平均提高了 5.97%、3.44%、4.48% 和 2.56%, 在召回率上平均降低了 2.12%.

关键词: 多图学习; 图核; 结构信息; 包结构图; 独立同分布

中图分类号: TP319; TP391.4

文献标识码: A

文章编号: 0372-2112(2024)07-2407-11

电子学报 URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.12263/DZXB.20230565

Multi-Graph Learning Based on Structure-Aware

FU Dong-lai, GAO Ze-an

(School of Software, North University of China, Taiyuan, Shanxi 030051, China)

Abstract: Multi-graph learning is a very important learning paradigm. Compared with multi-instance learning, in multi-graph learning, a bag represents an object, and each graph in the bag corresponds to a sub-object. This data representation method can express the structural information of sub-objects. However, existing multi-graph learning methods not only implicitly assume that the graphs in the bag satisfy independent and identical distribution, but also mostly adopt the technical idea of transforming multi-graph learning problems into multi-instance learning problems. This type of multi-graph learning method easily loses the structural information of the graph itself and the relationships between graphs. In response to the above problems, a multi-graph learning method based on structure awareness is proposed to effectively learn the structural information of the graph itself and the relationships between graphs. This method uses graph kernels to retain the structural information of the graph itself by calculating the similarity between graphs, expresses the structural information between graphs by generating bag-level graphs, and designs a bag encoder to effectively learn the structural information between graphs. Experimental results on the NCI(1), NCI(109), and AIDB datasets show that compared with existing methods, the proposed method improved by 5.97%, 3.44%, 4.48%, and 2.56% in accuracy, precision, F_1 value, and AUC respectively. In terms of recall rate decreased by 2.12%.

Key words: multi-graph learning; graph kernel; structural information; bag-structure graph; independent identical distribution

1 引言

在多示例学习中包表示一个对象, 包中的每一个示例对应一个子对象. 其中, 每个包与一个或多个标记相关联, 但是包中的示例标记不可见^[1]. 近年来, 多示例学习在计算机视觉、自然语言处理、临床医学等领域

受到广泛关注. Yang 等人^[2]提出一种基于多示例学习的分层聚合网络用于显微镜图像分类任务. 包翔等人^[3]将几种多示例学习模型运用于中文专利 IPC (International Patent Classification) 分类号的确定, 实现对大量中文专利的快速分类. Wang 等人^[4]提出一种基于

多示例学习的可解释深度学习架构,以便在没有额外注释的情况下有效地解决儿童骨龄评估问题.但是,多示例学习的数据表示方法忽略了子对象的结构信息.

多图学习是多示例学习的一种扩展.它用图代替示例,将每个对象表示为一个多图包,对象内的每个子对象被表示为一个具有结构信息的图,每个多图包与一个或者多个标记相关联.如果一个多图包中至少有一个图被标记为正类,那么这个多图包也被标记为正类.如果一个多图包中没有任何一个图被标记为正类,那么这个多图包被标记为负类.这种数据表示方法可以表达子对象的结构信息.近年来,多图学习在图像分类、科学出版物分类、图像情感分类、生物制药测试和药物靶标分类等领域受到广泛关注^[5]. Zhao 等人^[6]提出一种具有双粒度标记的多图多标记学习算法以解决图像分类和科学出版物分类问题. Wang 等人^[7]提出一种具有全局结构的多图多标记学习算法以解决图像情感多标记分类问题. 赵宇海等人^[8]借助多图数据结构提出一种基于双模态的药物靶标多标记分类方法. 相较于传统的仅考虑粗粒度对象信息的监督学习方法,多图学习方法可以同时考虑粗粒度的对象信息和细粒度的子对象信息及其内在结构关系.

然而,现有的多图学习方法,通常首先通过挖掘频繁子图或者信息子图的方式,获得所有图的频繁子图和信息子图.然后,通过判断每个图中是否包含这些频繁子图或者信息子图,将图转化为一个二进制的特征向量.通过这种方式可以将一个多图学习问题转化为一个多示例学习问题.最后,利用多示例学习方法进行分类.这类多图学习方法没有考虑子对象的结构信息.尽管借助图核、图嵌入、图神经网络等方式可学习单图表示的对象的结构信息,但这些策略不能直接用于解决多图学习问题.此外,现有的多图学习方法隐含假设多图包内的图服从独立同分布.然而,在实际学习任务中,每个对象所包含的子对象往往存在结构信息,而且各个子对象间也存在依赖关系.这两种结构信息的学习有助于有效识别对象.

针对上述问题,提出基于结构感知的多图学习方法(Multi-Graph Learning based on Structure-aware, SaMGL).首先,根据核函数的定义将多图包中的图隐式地映射到希尔伯特空间,并计算任意两个图之间的相似度度量核矩阵.这样做的优势在于不仅可以保留图的结构信息,而且能够获得这种结构信息的图表示.然后,以多图包中的每个图作为节点,连接相似度较高的节点生成包结构图.其中,每个图对应的图表示作为节点特征.这种包结构图既保留了图的结构信息也表示了包内各个图之间的结构信息.最后,设计包编码器

对包结构图进行分类.

主要贡献如下:

(1)依据核函数的定义创新地提出将多图包中的图从图空间隐式映射到希尔伯特空间,不仅能够保留图的结构信息而且能够获得这种结构信息的图表示.

(2)为了表示图间的结构信息,创新地提出一种以多图包中的图作为节点,以图之间的相似性作为边,构造包结构图表示图间结构信息的方法.

(3)在 NCI(1)、NCI(109)和 AIDB 三个多图数据集上验证了 SaMGL 的有效性.实验结果表明, SaMGL 与现有算法相比,在准确率、精确率、 F_1 值和 AUC 上分别平均提高了 5.97%、3.44%、4.48% 和 2.56%,在召回率上平均降低了 2.12%.由此证明了子对象的结构信息和子对象间的结构信息均有助于对象的识别.此外,通过消融实验进一步证明了 SaMGL 中不同模块的有效性.

2 相关工作

2.1 多示例学习

多示例学习是一种弱监督学习方法,最早由 Dietterich 等人^[9]提出,用于解决药物活性预测问题.相较于传统的以一系列带标记的示例作为输入的监督学习方法,多示例学习方法以一系列带标记的多示例包作为输入,每个多示例包由多个未标记的示例构成.如果一个多示例包中至少有一个示例被标记为正类,那么这个多示例包也被标记为正类,否则这个多示例包被标记为负类.多示例学习通过引入多示例包的概念,可以更好地适应一些实际问题中的不确定性和复杂性,降低标注成本.它已被广泛应用于计算机视觉^[10]、自然语言处理^[11]、医学图像分析^[12]、视频音频事件监测^[13]和遥感图像处理^[14]等领域.现有的多示例学习方法主要可以分为三类^[15],它们分别从示例、包和嵌入的角度解决多示例学习问题.其中,示例空间方法通常假设判别信息贮存在示例层面,通过学习示例级判别信息进行包级标签预测^[16,17].包空间方法将训练示例组织成包,直接学习包级判别信息^[18-22].嵌入空间方法将示例嵌入到低维的向量空间,从原始高维示例空间学习有效的特征和表示^[23-25].然而,这些方法大多专注于学习示例级和包级特征,忽略了对对象的结构信息.近年来,学习对象中的结构信息受到广泛关注,基于图的机器学习方法得到青睐^[26-28].为了有效地利用数据之间的关系,进一步提高多示例学习的分类性能, Zhou 等人^[29]为每个包建立一个图,其中,每个示例作为一个节点,示例之间的相似性作为边.然而,这种基于图的多示例学习方法隶属于包空间方法,只能学习子对象之间的结构信息,无法学习子对象的结构信息.

2.2 多图学习

多图学习是多示例学习的一种扩展,最早由 Wu 等人^[30]提出.相较于传统的以一系列带标记的示例作为输入的监督学习方法和以一系列带标记的多示例包作为输入的多示例学习方法,多图学习方法以一系列带标记的多图包作为输入,每个多图包由多个未标记的图构成,图结构的数据可以有效地表达子对象的结构信息.如果一个多图包中至少有一个图被标记为正类,那么这个多图包也被标记为正类,否则这个多图包被标记为负类.多图学习通过引入多图包的概念,借助图结构的数据,可以同时考虑粗粒度的对象信息和细粒度的子对象信息及其内在结构关系,更好地适应一些实际问题.它已被广泛应用于图像分类、科学出版物分类、图像情感分类、生物制药测试和药物靶标分类等领域^[5]. Wu 等人^[31]首先提出了多图单标记学习算法,通过应用频繁子图挖掘算法,将多图包中的图转化为具有一组特征子图的示例,将多图学习问题转化为多示例学习问题,从而通过多示例学习方法解决多图单标记学习问题. Pang 等人^[32]提出了一种基于注意力机制的多图分类算法,将图神经网络与注意力机制相结合,提升了多图分类的精度和效率.他们通过引入图注意力网络,在多图分类过程中自适应地为每个子图分配不同的权重,从而增强了模型对重要子图的识别能力. Zhu 等人^[33]提出了一种基于熵的多图多标记学习算法,将多图学习问题扩展到了多标记学习领域,允许每个多图包与多个标记相关联.他们通过将子图挖掘算法与信息熵相结合,挖掘多图包中的信息子图,将多图学习问题转化为多示例学习问题,从而通过多示例学习方法解决多图多标记学习问题. Zhao 等人^[6]提出一种具有双粒度标记的多图多标记学习算法.首先,利用图核将图映射到希尔伯特空间的方法有效地保留了图的结构信息.然后,通过学习图级标记得到了包级标记.最后,实现了图级和包级的双粒度多图多标记分类. Huang 等人^[34]提出一种具有新标记和缺失标记的多图多标记学习算法,将多图多标记学习问题拓展到更普适的新标记和缺失标记领域. Wang 等人^[7]提出一种具有全局结构的多图多标记学习算法以解决图像情感多标记分类问题:首先将图像情感分类问题建模为多图多标记学习问题,然后提出一种基于全局结构的多图多标记学习算法,利用图核将图映射到希尔伯特空间以保留图结构信息,最后聚合图信息得到图像-标记依赖关系.受此启发,针对多图学习中的子对象结构信息损失问题,提出利用相似度度量核矩阵保留子对象结构信息的方法.

3 方法

首先,对问题进行了形式化定义.然后,从整体上阐述了算法的框架.最后,详细说明了图结构信息学习、包结构图生成、包结构信息学习三个核心模块的设计.

3.1 问题定义

在多图学习中,给定一组具有 n 个多图包的数据集 $M = \{(B_1, Y_1), (B_2, Y_2), \dots, (B_n, Y_n)\}$, 多图包 $B_i = \{g_{i1}, g_{i2}, \dots, g_{im_i}\}$ 表示数据集中的第 i 个样本, m_i 表示包 B_i 中图的个数. 图 $g = (V, E, X)$ 是一个无向图, 其中 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_r\}$ 表示顶点集, r 表示顶点个数, $E \subseteq V \times V$ 表示边集, X 表示顶点 V 的特征集. 训练过程中, 每个多图包 B_i 与一个标签 $Y_i \in Y = \{0, 1\}$ 相关联, $Y_i = 1$ 表示第 i 个多图包被标记为正类, $Y_i = 0$ 表示第 i 个多图包被标记为负类. 多图学习的目标是找到一个映射 $f: B \rightarrow Y$, 其中, B 表示包集, Y 表示标签集.

3.2 算法框架

不同于传统的监督学习任务和多示例学习任务, 在多图学习任务中, 包表示对象, 包内的图表示子对象, 子对象的结构信息用图表示. 现有的由多图转化为多示例解决多图学习问题的技术思路损失了子对象的结构信息, 包内图服从独立同分布的假设丢失了图间的结构信息, 不利于包特征表示的学习. 为了解决现有多图学习方法所存在的上述问题, 提出一种基于结构感知的多图学习方法 (SaMGL). 算法框架如图 1 所示, 基于结构感知的多图学习方法主要分为三个阶段: 图结构信息学习、包结构图生成以及包结构信息学习.

图结构信息学习阶段的主要任务是学习包含图自身结构信息的图特征表示. 首先将多图包中的图从图空间隐式地映射到希尔伯特空间, 其次获得图间的相似度度量核矩阵, 最后根据相似度度量核矩阵将多图包中的图转化为一组包含结构信息的相似度度量核向量, 得到包含图自身结构信息的图特征表示. 包结构图生成阶段的主要任务是有效地捕获包内图之间的结构信息, 打破独立同分布的经典假设. 具体来说, 以多图包中的图作为节点, 以相似度度量核向量为节点特征, 以图间的相似性为边, 生成多图包的结构图, 图结构数据可以有效保留包内图之间的结构信息. 包结构信息学习阶段的主要任务是: 首先结合图结构信息学习阶段所学习到的包含图自身结构信息的图表示和包结构图生成阶段所构造的包结构图, 然后采用图神经网络学习图间结构信息, 并且聚合包含图自身和图间结构信息的图表示得到有效的包表示, 最后采用包分类器对包特征表示进行

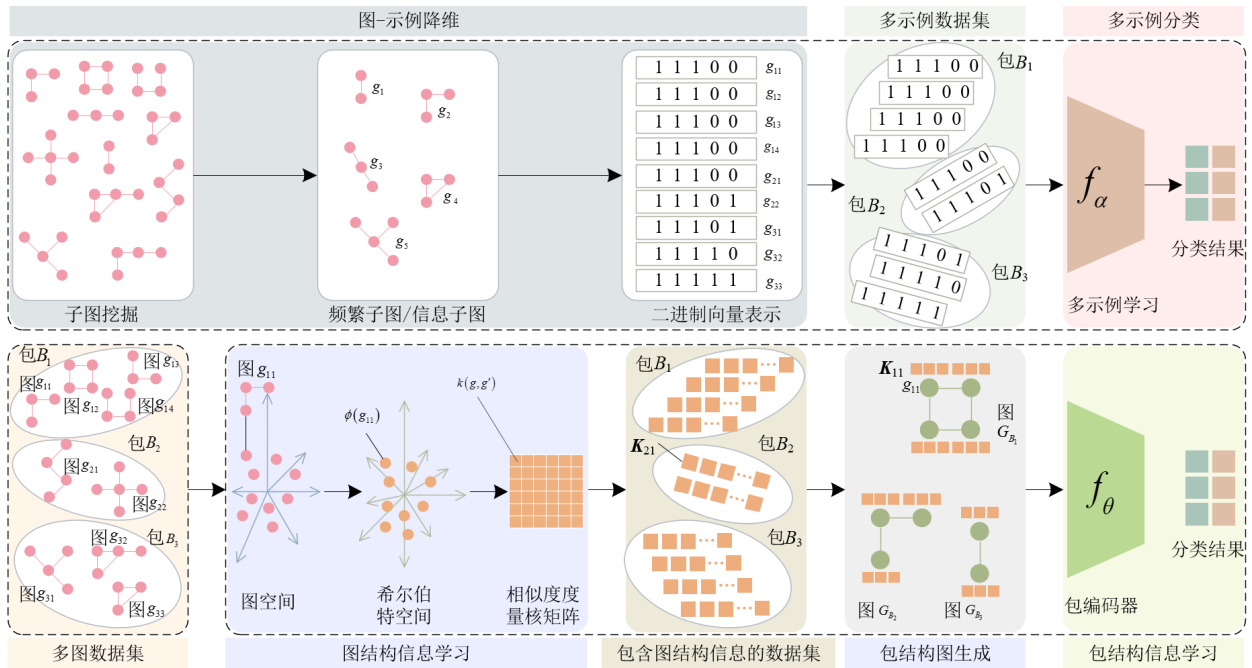


图1 算法框架

分类。

不同于现有的将多图学习退化为多示例学习的解决方法, SaMGL的关键优势在于它借助图结构信息和节点属性信息, 通过计算任意两个图之间的结构相似度, 为每个图生成相似度量核向量, 可以有效学习包内图的内在结构信息。同时, 通过包结构图生成模块将每个多图包表示为一个包含结构信息的图, 以捕获包内图之间的结构关系, 突破独立同分布的经典假设。最后, 通过包编码器有效地学习包内图之间的结构关系, 获得包含图自身和图间结构信息的图特征表示。此外, 包编码器可以借助不同的包级图节点之间的信息传递, 聚合图特征表示得到有效的包特征表示并基于包编码器分类。

3.3 图结构信息学习

传统的监督学习方法, 要求每个样本具有相同的特征维度, 而多图学习中每个多图包可以包含不同个数的图。同时, 每个图中节点个数也有所不同。因此, 多图学习的首要目标是将每个图转化为一个鲁棒性的特征表示, 同时保留图的底层结构信息。现有的由图转为示例的多图学习方法通常将多图包中的图表示为一组二进制的特征向量, 这种表示方法损失了图自身的结构信息。

为了保留这种结构信息, 设计了一种基于图核的图结构信息学习方法。图核是一种特殊的核方法^[35], 它通过计算任意两个图之间的结构相似性来保留图结构信息。这种图之间结构相似性的计算可以被抽象为这

样一个过程, 首先将图数据从低维的图空间映射到高维的希尔伯特空间, 然后通过希尔伯特空间中的内积运算得到任意两个图之间的相似度。因此, 这种映射保留了图自身的结构信息。具体而言, 给定一个多图数据集 M 、希尔伯特空间 H 以及图核 $k: G^2 \rightarrow \mathbb{R}$, 即图空间 G 上的一个对称正定函数。对于给定的图 $g \in B$, 存在一个图空间到希尔伯特空间的映射 $\phi: G \rightarrow H$, 使得多图数据集中任意两个图 $(g, g') \in G^2$ 的核值 $k(g, g')$ 等于两个集合在希尔伯特空间映射的内积, 如式(1)所示:

$$k(g, g') = \langle \phi(g), \phi(g') \rangle, \quad g, g' \in B, \langle \cdot, \cdot \rangle \text{表示内积} \quad (1)$$

因此, 多图包中的图可以通过核函数的定义被映射到高维的希尔伯特空间, 并通过计算它们在希尔伯特空间的内积得到相似度量核矩阵。也就是说, 多图数据集 M 中的任意一个图 g_{ij} 可以被表示为一组包含图自身结构信息的相似度量核向量, 如式(2)所示:

$$\mathbf{K}_{ij} = [k(g_{ij}, g_{11}) \quad k(g_{ij}, g_{12}) \quad \cdots \quad k(g_{ij}, g_{m_n})]^T \quad (2)$$

于是, 一个多图数据集通过基于图核的图结构信息学习阶段, 可以被转化为一个包含图结构信息的多图数据集, 如式(3)所示:

$$M' = \{(B'_1, Y_1), (B'_2, Y_2), \dots, (B'_n, Y_n)\} \quad (3)$$

其中, $B'_i = \{\mathbf{K}_{i1}, \mathbf{K}_{i2}, \dots, \mathbf{K}_{im}\}$, 原始的包集 B 可以被转换为 $B' = \{B'_1, B'_2, \dots, B'_n\}$ 。

3.4 包结构图生成

传统的监督学习任务,可以直接提供每个对象的特征表示,而多图学习将每个对象表示为一个由多个图构成的多图包,只能直接获得图信息,包信息的获取依赖于包内的图.因此,多图学习的关键任务之一在于有效地学习图和包之间的映射关系,将所学习到的图特征表示映射到包.现有的多图学习方法通常假设包中的图服从独立同分布,通过最大池化技术从包中选择得分最高的图作为关键图,以关键图的特征表示作为包特征表示.然而,这种方法往往忽略了包内图之间的结构关系.同时,这种独立同分布的假设在实际应用中难以满足,突破这种假设有利于学习新知识.本文在不考虑该假设约束的条件下,设计了一种包结构图生成方法,有效地学习到了包内图之间的结构关系.

通过在经典的多图学习中引入包结构图 $G_B = (G, \mathbf{A}, \mathbf{X}_B)$ 的技术思路表达图间的结构关系.多图包中的包结构图以包中的图为节点,以包中图间的相似性为边生成包结构图,节点特征由式(1)所学习到的包含图自身结构信息的相似度量核向量表示.包 B_i 的包结构图 $G_{B_i} = (G_i, \mathbf{A}_i, \mathbf{X}_{B_i})$, 其中, $G_i = \{g_{i1}, g_{i2}, \dots, g_{im_i}\}$, $\mathbf{X}_{B_i} = \{\mathbf{K}_{i1}, \mathbf{K}_{i2}, \dots, \mathbf{K}_{im_i}\}$, $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{m_i \times m_i}$, 基于包 B_i 内图之间的相似性计算所得到的邻接矩阵如式(4)所示:

$$A_i(j, k) = I[s(\mathbf{K}_{ij}, \mathbf{K}_{ik}) \geq \tau] \quad (4)$$

其中, $I[\cdot]$ 是指示函数,条件成立时为1,否则为0; τ 是一个阈值,用于控制全局结构图的稀疏性; s 是一个相似度量函数,如式(5)所示:

$$s(\mathbf{K}_{ij}, \mathbf{K}_{ik}) = \frac{\mathbf{K}_{ij} \cdot \mathbf{K}_{ik}}{\|\mathbf{K}_{ij}\| \|\mathbf{K}_{ik}\|} \quad (5)$$

因此,每一个多图包可以被表示为一个包结构图,根据式(1)计算结果所得到的多图表示数据集 $M' = \{(B'_1, Y_1), (B'_2, Y_2), \dots, (B'_n, Y_n)\}$ 就可以被表示为 $M'' = \{(G_{B_1}, Y_1), (G_{B_2}, Y_2), \dots, (G_{B_n}, Y_n)\}$. 包结构图可以有效地保留包内图之间的结构关系,有助于包信息的学习.

3.5 包结构信息学习

与传统监督学习相同,多图学习任务的最终目标也是为每个对象学习一个有效的特征表示,即包特征表示.为了获得有效的包特征表示,学习包内图之间的结构信息,借助包含图结构信息的图特征表示和包结构图,设计了一种包结构信息学习方法,在有效地学习包内图之间结构信息的同时,聚合图特征表示得到有效的包特征表示,最后采用全连接层作为包分类器对包特征表示分类.具体来说,为了有效学习包内图之间的结构信息,包结构信息学习阶段以包结构图生成阶

段所学习到的包含图自身结构信息和图间结构信息的多图数据集 $M'' = \{(G_{B_1}, Y_1), (G_{B_2}, Y_2), \dots, (G_{B_n}, Y_n)\}$ 作为输入,利用包编码器 f_θ 进行分类,得到包集 B 所对应的标签集 Y .

为了同时学习数据集 M'' 中图自身结构信息和包结构信息,同时使用包结构图的节点信息 \mathbf{X}_B 和邻接关系 \mathbf{A} , 采用图卷积神经网络^[36] 和一个全连接层构成包分类器 $f_\theta = f_{\text{MLP}}(f_{\text{GCN}}(G_{B_i}))$. 具体而言,一个 L 层的图卷积神经网络使用 $G_B = (G, \mathbf{A}, \mathbf{X}_B)$ 作为输入,学习过程中每一层的节点信息,如式(6)所示:

$$\begin{aligned} \mathbf{h}^l &= \sigma\left(\tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X}_B \mathbf{w}^0\right) \\ \mathbf{h}^{l+1} &= \sigma\left(\tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{h}^l \mathbf{w}^l\right) \\ l &\in \{1, 2, \dots, L-1\} \end{aligned} \quad (6)$$

其中, $\mathbf{h}^l \in \mathbb{R}^{|G| \times d}$ 表示第 $l-1$ 层的输出; \mathbf{w}^l 是可学习的权重矩阵; $\sigma(\cdot)$ 是非线性激活函数; $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{I}_{|G|}$ 是图 G 的自连接邻接矩阵, $\tilde{\mathbf{D}}_{ii} = \sum_j \tilde{\mathbf{A}}_{ij}$.

根据式(6)图卷积神经网络学习到了包结构图 G_B 的节点表示 \mathbf{h}_v , 即各个多图包中的图表示.不同于图结构信息学习阶段所学习到的图表示 \mathbf{K}_{ij} , 式(6)所学习的图表示 \mathbf{h}_v 包含了图间的结构信息.多图学习任务中图标签的模糊性客观上只能使用包标签无法使用图标签.也就是说,一个多图包中如果存在一个图被标记为正类,那么这个包也被标记为正类,当且仅当多图包中没有任何一个图被标记为正类时,这个多图包才被标记为负类.因此,在多图学习中,通常多图包中得分最高的图被作为这个多图包的代表图,如果这个代表图被标记为正类,那么这个多图包也会被标记为正类,反之亦然.然而,这种学习方法通常依赖于代表图选择的正确性和所学习到的图表示的正确性.受图标签模糊性的影响,代表图选择的正确性和图表示的正确性难以保证.因此,为了降低代表图选择错误和部分图表示学习错误对分类结果产生的影响,通过聚合包中所有图的图表示 \mathbf{h}_v 得到包表示 \mathbf{h}_b , 如式(7)所示:

$$\mathbf{h}_b = \sum_{v \in B} (\mathbf{h}_v) \quad (7)$$

最后,通过全连接层进行包分类,如式(8)所示:

$$\text{output} = \sigma(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{h}_b + \mathbf{b}) \quad (8)$$

其中, $\sigma(\cdot)$ 是非线性激活函数, $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^{d \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{d \times d_i}$ 是需要学习的参数.

4 实验

为了验证 SaMGL 的有效性,基于 NCI(1)、NCI(109)和 AIDB 三个多图数据集开展了多方面的实验

证. 首先, 搭建了实验环境, 选取了经验参数. 然后, 对 NCI(1)、NCI(109) 和 AIDB 三个多图数据集做了预处理. 最后, 通过准确率、精确率、召回率、 F_1 值、AUC 以及消融实验验证了 SaMGL 的有效性.

4.1 搭建实验环境

选用了 Intel (R) Xeon (R) CPU, 16 GB RAM, Nvidia RTX A4000 GPU 搭建了实验的硬件环境. 软件环境选用了 64 位 Ubuntu 20.04.3 操作系统, Python 3.10 编译环境和 Pytorch 1.12 深度学习框架. 实验过程中基线算法的超参数按照相应文献公开的取值设置^[16-25]. 根据现有的实验条件, 对于超参数批尺寸、阈值 τ 、图神经网络隐藏层维度、学习率、权重衰减、学习次数、图神经网络层数分别在集合 $\{32, 64, 128, 256, 512, 1\ 024\}$ 、 $\{0, 0.1, 0.2, \dots, 1.0\}$ 、 $\{32, 64, 128, 256, 512, 1\ 024\}$ 、 $\{0.1, 0.01, 0.001, 0.000\ 1\}$ 、 $\{0.1, 0.01, 0.001, 0.000\ 1\}$ 、 $\{10, 20, \dots, 200\}$ 、 $\{1, 2, \dots, 5\}$ 中选取, 表 1 给出了 SaMGL 最终的超参数取值. 为了保证实验结果的公平性, 对 5 个不同随机种子设置下的实验结果求取平均值.

表 1 超参数选取

超参数名称	超参数取值	超参数名称	超参数取值
批尺寸	64	权重衰减	0.001
阈值 τ	0.98	学习次数	100
隐藏层维度	512	网络层数	2
学习率	0.01		

4.2 准备实验数据

NCI 癌症筛查数据集是公开的常见图分类数据集之一, 已被许多已有的图分类算法使用. 该数据集可从网站 PubChem (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) 免费下载并使用. 实验过程中选取了 ID 为 1 和 109 的 NCI 数据集. 不同 ID 的 NCI 数据集均属于一个抗癌活性预测的生物测定任务, 数据集中每个化合物都被表示为一个以原子作为节点, 原子之间的键为边的图. 如果一种化合物对相应的癌症有活性, 则图为正类, 否则为负类. 实验中通过随机选择的方法构建了多图数据集. 正类多图包通过随机选择正类图和负类图构成, 负类多图包通过随机选择负类图构成. 表 2 给出了基于 NCI(1) 和 NCI(109) 数据集构造的多图数据集的详细情况.

AIDB 数据集是来自 DBLP 数据库的文本数据

表 2 多图数据集

数据集	包数	图个数	节点数	边数	正包数
NCI(1)	400	2 271	62 311	134 528	200
NCI(109)	400	2 309	63 603	137 352	200
AIDB	1 600	10 364	206 459	1 863 894	800

集^[37], 由计算机科学领域的书目数据组成, 包括摘要、作者、年份、标题和参考文献等信息. 为了构建图, 采用了一种基于模糊认知映射 (E-FCM)^[38] 的方法, 在每篇论文的摘要中提取了大量的关键词和关键词之间的相关性. 然后, 以关键词作为节点, 两个关键词之间的相关性作为边的权值, 构造一个图. 为了构建多图包, 将每篇论文表示为一个多图包, 并将论文及其参考文献的摘要信息表示为多个图. 在实验中, 选择来自人工智能 (Artificial Intelligence, AI) 和数据库 (DataBase, DB) 两个热门领域的书目数据, 以人工智能 (AI) 领域书目数据作为正样本, 数据库 (DB) 领域的书目数据作为负样本, 形成 AIDB 多图数据集. 表 2 给出了所构造的 AIDB 数据集的详细情况.

4.3 评价指标

实验选取准确率 (Accuracy)、精确率 (Precision)、召回率 (Recall)、 F_1 值 (F_1) 和 ROC 曲线下方的面积大小 (AUC) 五个常见的分类算法性能评价指标, 如式 (9)~(13) 所示:

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{TP} + \text{TN}}{\text{TP} + \text{TN} + \text{FP} + \text{FN}} \quad (9)$$

$$\text{Precision} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}} \quad (10)$$

$$\text{Recall} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} \quad (11)$$

$$F_1 = 2 \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}} \quad (12)$$

$$\text{AUC} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m-1} (x_{i+1} - x_i) \cdot (y_i + y_{i+1}) \quad (13)$$

其中, TP 表示被正确预测为正类的正多图包的个数, FP 表示被错误预测为正类的负多图包的个数, FN 表示被错误预测为负类的正多图包的个数, TN 表示被正确预测为负类的负多图包的个数, m 表示测试集中多图包的个数.

4.4 性能分析

由于现有的多图单标记分类算法尚未有公开的数据集和实验代码, 因此实验中选用具有代表性的多示例学习算法作为基线算法. 为了能够使用多示例学习基线算法处理多图学习数据集, 实验中采用了现有多图学习问题常见的由图转为示例的降维技术思路. 实验中分别从三类不同的多示例学习算法中选择了具有代表性的算法作为比较对象. 从示例空间方法中选择了 EM-DD^[16]、mi-SVM 和 MI-SVM^[17]. 从包空间方法选择了 MILES^[18]、C-KNN^[19]、BoW^[20]、CCE^[21] 和 MInD^[22]. 从嵌入空间方法选择了 mi-net、MI-Net、MI-Net (DS)、MI-Net (RC)^[23]、注意力神经网络 (Attention) 和门控注意力神经网络 (Gated-Attention)^[24]、rFF+pool、rFF+pool-

GCN 和 B-rFF+pool-GCN^[25]. 表 3、表 4 和表 5 分别展示了在 NCI(1)、NCI(109) 和 AIDB 数据集上的实验结果. 可以观察到, 所提出的基于结构感知的多图学习方法整体上优于所有的基线算法.

由表 3 可知, 就 NCI(1) 数据集而言, 不同基线算法在不同评价指标上各有优劣. SaMGL 在准确率上要最好的基线算法 mi-net 高 4.05%, 在召回率上比最好的基线算法 MILES 低 6.25%. 这是因为 NCI(1) 数据集在

表 3 NCI(1)数据集上不同模型的实验结果

单位: %

算法	准确率	召回率	精确率	F_1 值	AUC
EM-DD	62.00±2.94	72.12±1.85	60.14±2.78	<u>65.49±1.85</u>	51.23±0.93
MILES	59.44±0.37	74.25±4.02	57.28±0.72	64.39±1.00	62.18±0.14
C-KNN	55.44±0.84	69.75±2.49	54.22±0.69	60.92±1.03	58.02±2.38
mi-SVM	56.44±2.09	55.13±21.58	65.12±9.86	50.70±14.72	<u>65.08±0.90</u>
MI-SVM	53.50±3.12	22.88±12.66	<u>65.44±7.69</u>	27.95±15.68	60.27±3.38
BoW	56.19±2.65	62.00±6.31	55.13±2.06	57.95±3.67	57.68±2.66
CCE	58.63±0.57	<u>72.25±3.49</u>	56.92±0.73	63.34±0.68	62.47±1.69
MInD	56.19±3.31	63.88±6.68	55.50±2.73	58.87±3.85	58.51±3.27
mi-net	<u>63.95±6.19</u>	—	—	—	—
MI-Net	57.45±7.91	—	—	—	—
MI-Net(DS)	58.80±8.55	—	—	—	—
MI-Net(RC)	58.15±8.07	—	—	—	—
Attention	58.40±1.20	58.40±2.40	60.90±10.00	59.00±4.30	58.70±1.10
Gated-Attention	58.50±1.20	58.10±1.00	61.40±9.60	59.30±4.10	58.90±1.70
rFF+pool	55.68±6.89	60.60±10.95	55.87±11.82	57.08±8.27	58.58±8.29
rFF+pool-GCN	55.30±7.44	61.65±10.88	55.28±11.37	57.35±8.45	58.31±8.34
B-rFF+pool-GCN	57.85±7.30	59.44±12.41	58.61±11.75	57.76±8.32	59.99±8.86
SaMGL	68.00±2.45	68.00±12.88	70.80±10.25	67.48±4.22	70.78±3.68

注:每一列中最优结果和次优结果分别以粗体和下划线显示.

表 4 NCI(109)数据集上不同模型的实验结果

单位: %

算法	准确率	召回率	精确率	F_1 值	AUC
EM-DD	55.38±2.74	63.63±5.55	54.53±2.29	58.63±3.48	51.65±6.25
MILES	55.56±2.08	61.50±8.79	55.00±1.39	57.52±4.12	57.86±2.53
C-KNN	53.19±2.66	64.63±1.52	52.72±2.25	57.81±1.83	54.70±2.19
mi-SVM	54.88±2.58	48.75±18.86	54.85±4.25	47.71±11.02	60.97±2.73
MI-SVM	50.63±1.63	16.88±10.08	57.49±6.07	22.10±11.99	56.02±2.29
BoW	55.13±2.38	66.25±7.23	54.39±2.09	59.06±2.98	57.64±3.42
CCE	<u>60.06±1.69</u>	<u>74.75±3.03</u>	57.79±1.38	<u>65.06±1.67</u>	<u>63.72±2.86</u>
MInD	57.69±1.28	68.00±2.85	56.85±0.69	61.01±2.23	61.04±0.49
mi-net	59.40±8.43	—	—	—	—
MI-Net	55.85±7.31	—	—	—	—
MI-Net(DS)	57.05±7.17	—	—	—	—
MI-Net(RC)	55.85±7.31	—	—	—	—
Attention	56.00±2.10	55.30±2.40	<u>66.10±7.50</u>	59.90±2.60	56.40±1.90
Gated-Attention	56.50±1.10	55.90±1.10	61.50±3.40	58.50±1.60	56.50±1.10
rFF+pool	52.33±7.44	58.73±11.93	52.86±11.27	54.55±8.42	54.55±8.86
rFF+pool-GCN	49.05±8.11	55.11±12.85	49.68±10.53	51.24±8.88	49.59±8.09
B-rFF+pool-GCN	51.10±7.76	57.57±13.53	52.27±11.97	53.26±8.61	53.51±8.87
SaMGL	69.50±7.65	79.00±10.20	67.22±7.27	72.14±6.43	67.48±8.44

注:每一列中最优结果和次优结果分别以粗体和下划线显示.

表 5 AIDB 数据集上不同模型的实验结果

单位: %

算法	准确率	召回率	精确率	F_1 值	AUC
EM-DD	60.35±N/A	43.70±N/A	66.68±N/A	52.19±N/A	88.39±N/A
MILES	85.66±1.66	86.94±2.94	84.84±0.73	85.82±1.84	92.73±1.12
C-KNN	83.63±0.57	92.51±0.63	78.58±0.46	84.97±0.53	93.17±0.21
mi-SVM	77.06±N/A	97.25±N/A	69.32±N/A	80.93±N/A	90.80±N/A
MI-SVM	72.50±8.25	52.57±19.07	<u>90.57±2.94</u>	58.33±20.48	89.37±0.20
BoW	62.53±0.22	80.07±3.19	59.62±0.57	68.11±0.96	64.90±0.18
CCE	81.60±0.85	85.25±1.25	79.60±2.02	82.27±0.47	89.36±0.24
MInD	<u>89.02±0.33</u>	89.92±0.82	88.49±0.09	<u>89.13±0.37</u>	95.30±0.03
mi-net	77.56±3.08	—	—	—	—
MI-Net	88.34±2.25	—	—	—	—
MI-Net(DS)	88.03±2.39	—	—	—	—
MI-Net(RC)	87.25±2.89	—	—	—	—
Attention	85.90±1.30	86.10±1.30	85.60±1.30	85.80±1.30	85.90±1.30
Gated-Attention	85.60±0.50	84.70±0.20	86.90±1.60	85.80±0.60	85.70±0.50
rFF+pool	87.27±2.43	86.50±3.39	87.90±3.86	87.12±2.61	93.31±1.91
rFF+pool-GCN	86.59±2.44	84.79±3.78	88.02±3.70	86.29±2.64	92.40±1.90
B-rFF+pool-GCN	87.12±2.50	85.68±3.69	88.30±3.92	86.88±2.65	92.92±2.01
SaMGL	93.44±0.71	<u>92.89±2.38</u>	94.40±2.60	93.49±0.72	<u>93.51±0.71</u>

注:每一列中最优结果和次优结果分别以粗体和下划线显示。

生成过程中负图的个数远大于正图的个数,导致 SaMGL 算法在分类过程中更倾向于将样本划分为负类,因此 SaMGL 算法在 NCI(1) 数据集上的召回率较低而其他评价指标较高。此外, SaMGL 在精确率上比最好的基线算法 MI-SVM 高 5.36%, 在 F_1 值上比最好的基线算法 EM-DD 高 1.99%, 在 AUC 上比最好的基线算法 mi-SVM 高 5.7%。

由表 4 可知,就 NCI(109) 数据集而言,基线算法 CCE 要优于其他基线算法。SaMGL 在准确率上要比 CCE 高 9.44%, 在召回率上比 CCE 高 4.25%, 在精确率上比最好的基线算法 Attention 高 1.12%, 在 F_1 值上比 CCE 高 7.08%, 在 AUC 上比最好的基线算法 mi-SVM 高 3.76%。

由表 5 可知,就 AIDB 数据集而言,不同基线算法在不同评价指标上各有优劣,但整体上 MInD 算法表现最优。SaMGL 在准确率上要比 MInD 高 4.42%, 在召回率上 SaMGL 是次优的,比最优的基线算法 mi-SVM 低 4.36%, 这是因为 mi-SVM 算法在 AIDB 数据集上更倾向于将样本预测为正例。同时, SaMGL 在精确率上比最优的基线算法 MI-SVM 高 3.83%, 在 F_1 值上比 MInD 高 4.36%, 在 AUC 上也是次优的,比最优的基线算法 MInD 低 1.79%。

综上,在三个多图数据集上, SaMGL 相较于现有方法在准确率、精确率、 F_1 值和 AUC 上分别平均提高了 5.97%、3.44%、4.48% 和 2.56%, 在召回率上平均降低了 2.12%。因此,通过保留图自身的结构信息和图间的结

构信息有效提升了算法的分类性能。

4.5 消融实验

为了验证 SaMGL 中图结构信息学习模块、包结构图生成模块和包结构信息学习模块的重要性开展了消融实验。实验过程中,针对图结构信息学习模块,通过采用常用的基于降维的图结构信息学习方法将图转化为示例。针对包结构图生成模块通过将包结构图 $G_{B_i} = (G_i, A_i, X_{B_i})$ 的邻接矩阵 A_i 设置为一个全 0 的矩阵。也就是说,只保留节点信息,不考虑图间结构信息。针对包结构信息学习模块,采用常用的图同构网络 (Graph Isomorphism Network, GIN)^[39] 和图注意力网络 (Graph Attention network, GAT)^[40] 作为替代方案。图 2(a) 和图 2(b) 分别展示了 SaMGL 在三个多图数据集上关于准确率和 F_1 值的消融实验结果。其中,“降维”表示对图结构信息学习模块做消融研究,“ $A_i = \mathbf{0}$ ”表示对包结构图生成模块做消融研究,“GIN”和“GAT”表示对包结构信息学习模块做消融研究。

由图 2 可知,在三个多图数据集上,所提出的图结构信息学习方法相较于传统的基于降维的图结构信息学习方法在准确率和 F_1 值上分别平均提高了 6.56% 和 13.94%, 所提出的包结构图生成模块相较于传统的认为包内图之间服从独立同分布假设的方法在准确率和 F_1 值上分别平均提高了 4.24% 和 9.53%。由此可知,所提出的图结构信息学习方法和包结构图生成模块可以显著地提升算法的分类性能。此外,所提出的采用图卷

积神经网络作为主要部分进行图结构信息学习的方法相较于采用图同构网络和图注意力网络的方法在准确率上分别平均提高了 1.37% 和 2.25%, 在 F_1 值上分别平

均提高了 7.05% 和 7.89%, 由此可知, 在 SaMGL 算法中采用图卷积神经网络作为主要组成部分学习图结构信息更具优势。

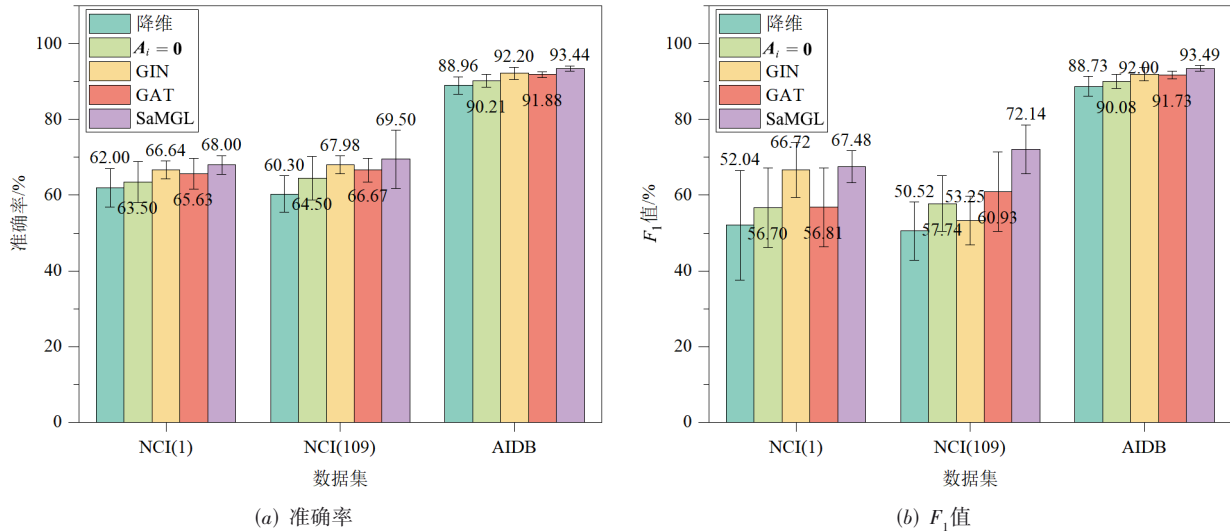


图 2 SaMGL消融实验图

5 总结

针对现有多图学习方法存在不能学习多图包内图自身结构信息和图间结构信息的不足, 提出基于结构感知的多图学习方法 (SaMGL). SaMGL 通过图结构信息学习模块, 利用核函数学习多图包中图自身的结构信息. 通过包结构图生成模块构建多图包内各个图之间的结构信息并通过包结构信息学习模块同时学习图自身的结构信息和图间的结构信息. 在 NCI(1)、NCI(109) 和 AIDB 数据集上的实验结果证明, SaMGL 在准确率、召回率、精确率、 F_1 值和 AUC 五个指标上优于基线算法. 消融实验的结果表明所提出的图结构信息学习模块、包结构图生成模块和包结构信息学习模块可以显著地提升算法的分类性能. SaMGL 的关键优势在于它能够有效地学习多图包内图自身结构信息和图间结构信息. 虽然 SaMGL 在多图单标签分类任务上表现出良好的分类效果, 但它只适用于解决多图单标签分类任务, 不适用于多图多标签分类任务. 这是因为多标签分类问题更加复杂, 需要考虑标签之间的相关性. 未来将进一步沿着这一技术思路研究多图多标签分类任务.

参考文献

[1] 朱越, 姜远, 周志华. 一种基于多示例多标记学习的新标记学习方法[J]. 中国科学: 信息科学, 2018, 48(12): 1670-1680.
ZHU Y, JIANG Y, ZHOU Z H. Multi-instance multi-label new label learning[J]. Scientia Sinica (Informationis),

2018, 48(12): 1670-1680. (in Chinese)

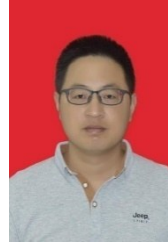
- [2] YANG Y, TU Y L, LEI H C, et al. HAMIL: Hierarchical aggregation-based multi-instance learning for microscopy image classification[J]. Pattern Recognition, 2023, 136: 109245.
- [3] 包翔, 刘桂锋, 崔靖华. 多示例多标签学习在中文专利自动分类中的应用研究[J]. 图书情报工作, 2021, 65(8): 107-113.
BAO X, LIU G F, CUI J H. Application of multi instance multi label learning in Chinese patent automatic classification[J]. Library and Information Service, 2021, 65(8): 107-113. (in Chinese)
- [4] WANG C, WU Y, WANG C, et al. Attention-based multiple-instance learning for Pediatric bone age assessment with efficient and interpretable[J]. Biomedical Signal Processing and Control, 2023, 79: 104028.
- [5] ZHANG D K, YIN J, ZHU X Q, et al. Network representation learning: A survey[J]. IEEE Transactions on Big Data, 2020, 6(1): 3-28.
- [6] ZHAO Y H, WANG Y J, WANG Z K, et al. Multi-graph multi-label learning with dual-granularity labeling[C]//Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2021: 2327-2337.
- [7] WANG M X, ZHAO Y H, WANG Y J, et al. Image emotion multi-label classification based on multi-graph learn-

- ing[J]. *Expert Systems with Applications*, 2023, 231: 120641.
- [8] 赵宇海, 何子豪, 谢儒, 等. 一种基于双模态的药物靶标多标签分类方法: CN116469484A[P]. 2023-07-21.
- [9] DIETTERICH T G, LATHROP R H, LOZANO-PÉREZ T. Solving the multiple instance problem with axis-parallel rectangles[J]. *Artificial Intelligence*, 1997, 89(1/2): 31-71.
- [10] TANG P, WANG X G, BAI X, et al. Multiple instance detection network with online instance classifier refinement[C]//2017 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). Piscataway: IEEE, 2017: 3059-3067.
- [11] ANGELIDIS S, LAPATA M. Multiple instance learning networks for fine-grained sentiment analysis[J]. *Transactions of the Association for Computational Linguistics*, 2018, 6: 17-31.
- [12] LIU M X, ZHANG J, ADELI E, et al. Landmark-based deep multi-instance learning for brain disease diagnosis[J]. *Medical Image Analysis*, 2018, 43: 157-168.
- [13] WANG Y, LI J C, METZE F. A comparison of five multiple instance learning pooling functions for sound event detection with weak labeling[C]//2019 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP). Piscataway: IEEE, 2019: 31-35.
- [14] LIU X, JIAO L C, ZHAO J Q, et al. Deep multiple instance learning-based spatial-spectral classification for PAN and MS imagery[J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2018, 56(1): 461-473.
- [15] 赵璐, 袁立明, 郝琨. 多示例学习算法综述[J]. *计算机科学*, 2022, 49(S1): 93-99.
ZHAO L, YUAN L M, HAO K. Review of multi-instance learning algorithms[J]. *Computer Science*, 2022, 49(S1): 93-99. (in Chinese)
- [16] ZHANG Q, GOLDMAN S A. EM-DD: An improved multiple-instance learning technique[C]//Proceedings of the 14th International Conference on Neural Information Processing Systems: Natural and Synthetic. New York: ACM, 2001: 1073-1080.
- [17] ANDREWS S, TSOCHANTARIDIS I, HOFMANN T. Support vector machines for multiple-instance learning[C]//Proceedings of the 15th International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: ACM, 2002: 577-584.
- [18] CHEN Y X, BI J B, WANG J Z. MILES: Multiple-instance learning via embedded instance selection[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2006, 28(12): 1931-1947.
- [19] WANG J, ZUCKER J D. Solving the multiple-instance problem: A lazy learning approach[C]//Proceedings of the Seventeenth International Conference on Machine Learning. New York: ACM, 2000: 1119-1126.
- [20] AMORES J. Multiple instance classification: Review, taxonomy and comparative study[J]. *Artificial Intelligence*, 2013, 201: 81-105.
- [21] ZHOU Z H, ZHANG M L. Solving multi-instance problems with classifier ensemble based on constructive clustering[J]. *Knowledge and Information Systems*, 2007, 11(2): 155-170.
- [22] CHEPLYGINA V, TAX D M J, LOOG M. Multiple instance learning with bag dissimilarities[J]. *Pattern Recognition*, 2015, 48(1): 264-275.
- [23] WANG X G, YAN Y L, TANG P, et al. Revisiting multiple instance neural networks[J]. *Pattern Recognition*, 2018, 74(C): 15-24.
- [24] ILSE M, TOMCZAK J M, WELLING M. Attention-based deep multiple instance learning[EB/OL]. (2018) [2023]. <http://arxiv.org/abs/1802.04712>.
- [25] PAL S, VALKANAS A, REGOL F, et al. Bag graph: Multiple instance learning using Bayesian graph neural networks[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2022, 36(7): 7922-7930.
- [26] ZHAO P J, LIAO W J, HUANG Y L, et al. Intelligent design of shear wall layout based on graph neural networks[J]. *Advanced Engineering Informatics*, 2023, 55: 101886.
- [27] ZHANG B H, LOU S J, WANG L W, et al. Rethinking the expressive power of GNNs via graph biconnectivity[C]//International Conference on Learning Representations. Kigali: ACM, 2023: 1-16.
- [28] 江兵兵, 何文达, 吴兴宇, 等. 基于自适应图学习的半监督特征选择[J]. *电子学报*, 2022, 50(7): 1643-1652.
JIANG B B, HE W D, WU X Y, et al. Semi-supervised feature selection with adaptive graph learning[J]. *Acta Electronica Sinica*, 2022, 50(7): 1643-1652. (in Chinese)
- [29] ZHOU Z H, SUN Y Y, LI Y F. Multi-instance learning by treating instances as non-I.I.D. samples[C]//Proceedings of the 26th Annual International Conference on Machine Learning. New York: ACM, 2009: 1249-1256.
- [30] WU J, ZHU X Q, ZHANG C Q, et al. Multi-instance multi-graph dual embedding learning[C]//2013 IEEE 13th International Conference on Data Mining. Piscataway:

IEEE, 2013: 827-836.

- [31] WU J, ZHU X Q, ZHANG C Q, et al. Bag constrained structure pattern mining for multi-graph classification[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2014, 26(10): 2382-2396.
- [32] PANG J, GU Y, XU J, et al. Parallel multi-graph classification using extreme learning machine and MapReduce[J]. Neurocomputing, 2017, 261: 171-183.
- [33] ZHU Z X, ZHAO Y H. Multi-graph multi-label learning based on entropy[J]. Entropy, 2018, 20(4): 245.
- [34] HUANG M M, ZHAO Y H, WANG Y J, et al. Multi-graph multi-label learning with novel and missing labels[J]. Knowledge-Based Systems, 2023, 276: 110753.
- [35] 王兆慧, 沈华伟, 曹婧, 等. 图分类研究综述[J]. 软件学报, 2022, 33(1): 171-192.
- WANG Z H, SHEN H W, CAO Q, et al. Survey on graph classification[J]. Journal of Software, 2022, 33(1): 171-192. (in Chinese)
- [36] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[EB/OL]. (2016) [2023]. <http://arxiv.org/abs/1609.02907>.
- [37] TANG J, ZHANG J, YAO L M, et al. ArnetMiner: Extraction and mining of academic social networks[C]//Proceedings of the 14th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2008: 990-998.
- [38] PERUSICH K, MCNEESE M D. Using fuzzy cognitive maps for knowledge management in a conflict environment[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part C (Applications and Reviews), 2006, 36(6): 810-821.
- [39] XU K, HU W, LESKOVER J, et al. How powerful are graph neural networks?[C]//The 7th International Conference on Learning Representations. New Orleans: ACM, 2019: 1-17.
- [40] VELICKOVIC P, CUCURULL G, GASANOVA A, et al. Graph attention networks[C]//The 6th International Conference on Learning Representations. Vancouver: ACM, 2018: 1-12.

作者简介



付东来 男, 1979年出生. 博士, 副教授, 硕士生导师. 主要研究方向为众包计算、可信计算、机器学习、神经网络等.

E-mail: fudonglai@nuc.edu.cn



高泽安 男, 1997年8月出生于山西省吕梁市. 现为中北大学软件工程专业硕士研究生. 主要研究方向为机器学习、神经网络.

E-mail: gaozean2022@163.com