

环境配置与PyG中图与图数据集的表示和使用

一、引言

[PyTorch Geometric](#) (PyG)是面向几何深度学习的PyTorch的扩展库，几何深度学习指的是应用于图和其他不规则、非结构化数据的深度学习。基于PyG库，我们可以轻松地根据数据生成一个图对象，然后很方便的使用它；我们也可以容易地为一个图数据集构造一个数据集类，然后很方便的将它用于神经网络。

通过此节的实践内容，我们将

1. 首先学习**程序运行环境的配置**。
2. 接着学习**PyG中图数据的表示及其使用**，即学习PyG中Data类。
3. 最后学习**PyG中图数据集的表示及其使用**，即学习PyG中Dataset类。

二、环境配置

1. 使用nvidia-smi命令**查询显卡驱动是否正确安装**

```

→ ~ nvidia-smi
Sat May 15 20:43:25 2021

```

NVIDIA-SMI 460.73.01 Driver Version: 460.73.01 CUDA Version: 11.2									
GPU Fan	Name Temp	Persistence-M Perf	Bus-Id	Disp.A Memory-Usage	Volatile GPU-Util	Uncorr. Compute	ECC M.		
0	GeForce RTX 208...	Off	00000000:01:00.0	Off	0%	N/A	Default		
14%	61C	P0	0MiB / 11016MiB				N/A		

Processes:							
GPU	GI ID	CI ID	PID	Type	Process name	GPU Memory Usage	
No running processes found							

2. 安装正确版本的pytorch和cudatoolkit，此处安装1.8.1版本的pytorch和11.1版本的cudatoolkit

1. conda install pytorch torchvision torchaudio cudatoolkit=11.1 -c pytorch -c nvidia

2. 确认是否正确安装，正确的安装应出现下方的结果

```

1 $ python -c "import torch; print(torch.__version__)"
2 # 1.8.1
3 $ python -c "import torch; print(torch.version.cuda)"
4 # 11.1

```

3. 安装正确版本的PyG

```

1 pip install torch-scatter -f https://pytorch-
  geometric.com/whl/torch-1.8.0+cu111.html
2 pip install torch-sparse -f https://pytorch-
  geometric.com/whl/torch-1.8.0+cu111.html
3 pip install torch-cluster -f https://pytorch-
  geometric.com/whl/torch-1.8.0+cu111.html
4 pip install torch-spline-conv -f https://pytorch-
  geometric.com/whl/torch-1.8.0+cu111.html
5 pip install torch-geometric

```

其他版本的安装方法以及安装过程中出现的大部分问题的解决方案可以在 [Installation of of PyTorch Geometric](#) 页面找到。

三、Data类——PyG中图的表示及其使用

Data对象的创建

Data类的官方文档为[torch_geometric.data.Data](#)。

通过构造函数

Data类的构造函数：

```
1 class Data(object):
2
3     def __init__(self, x=None, edge_index=None, edge_attr=None,
4 y=None, **kwargs):
5         r"""
6         Args:
7             x (Tensor, optional): 节点属性矩阵，大小为`[num_nodes,
8 num_node_features]`
9             edge_index (LongTensor, optional): 边索引矩阵，大小为`[2,
10 num_edges]`，第0行可称为头（head）节点、源（source）节点、邻接节点，第
11 1行可称为尾（tail）节点、目标（target）节点、中心节点
12             edge_attr (Tensor, optional): 边属性矩阵，大小为
13 `[num_edges, num_edge_features]`
14             y (Tensor, optional): 节点或图的标签，任意大小（，其实也可以是
15 边的标签）
16
17         """
18         self.x = x
19         self.edge_index = edge_index
20         self.edge_attr = edge_attr
21         self.y = y
22
23         for key, item in kwargs.items():
24             if key == 'num_nodes':
25                 self.__num_nodes__ = item
26             else:
27                 self[key] = item
```

edge_index的每一列定义一条边，其中第一行为边起始节点的索引，第二行为边结束节点的索引。这种表示方法被称为**COO格式 (coordinate format)**，通常用于表示稀疏矩阵。PyG不是用稠密矩阵 $A \in \{0, 1\}^{|\mathcal{V}| \times |\mathcal{V}|}$ 来持有邻接矩阵的信息，而是用仅存储邻接矩阵A中非0元素的稀疏矩阵来表示图。

通常，一个图至少包含x, edge_index, edge_attr, y, num_nodes 5个属性，**当图包含其他属性时，我们可以通过指定额外的参数使Data对象包含其他的属性：**

```
1 graph = Data(x=x, edge_index=edge_index, edge_attr=edge_attr, y=y,
               num_nodes=num_nodes, other_attr=other_attr)
```

转dict对象为Data对象

我们也可以**将一个dict对象转换为一个Data对象：**

```
1 graph_dict = {
2     'x': x,
3     'edge_index': edge_index,
4     'edge_attr': edge_attr,
5     'y': y,
6     'num_nodes': num_nodes,
7     'other_attr': other_attr
8 }
9 graph_data = Data.from_dict(graph_dict)
```

from_dict是一个类方法：

```
1 @classmethod
2 def from_dict(cls, dictionary):
3     r"""Creates a data object from a python dictionary."""
4     data = cls()
5     for key, item in dictionary.items():
6         data[key] = item
7
8     return data
```

注意：graph_dict中属性值的类型与大小的要求与Data类的构造函数的要求相同。

Data对象转换成其他类型数据

我们可以将Data对象转换为dict对象：

```
1 def to_dict(self):  
2     return {key: item for key, item in self}
```

或转换为namedtuple：

```
1 def to_namedtuple(self):  
2     keys = self.keys  
3     DataTuple = collections.namedtuple('DataTuple', keys)  
4     return DataTuple(*[self[key] for key in keys])
```

获取Data对象属性

```
1 x = graph_data['x']
```

设置Data对象属性

```
1 graph_data['x'] = x
```

获取Data对象包含的属性的关键字

```
1 graph_data.keys()
```

对边排序并移除重复的边

```
1 graph_data.coalesce()
```

Data对象的其他性质

我们通过观察PyG中内置的一个图来查看Data对象的性质：

```
1 from torch_geometric.datasets import KarateClub
2
3 dataset = KarateClub()
4 data = dataset[0] # Get the first graph object.
5 print(data)
6 print('=====
  ===')
7
8 # 获取图的一些信息
9 print(f'Number of nodes: {data.num_nodes}') # 节点数量
10 print(f'Number of edges: {data.num_edges}') # 边数量
11 print(f'Number of node features: {data.num_node_features}') # 节点
  属性的维度
12 print(f'Number of node features: {data.num_features}') # 同样是节点
  属性的维度
13 print(f'Number of edge features: {data.num_edge_features}') # 边属
  性的维度
14 print(f'Average node degree: {data.num_edges /
  data.num_nodes:.2f}') # 平均节点度
15 print(f'if edge indices are ordered and do not contain duplicate
  entries.: {data.is_coalesced()}') # 是否边是有序的同时不含有重复的边
16 print(f'Number of training nodes: {data.train_mask.sum()}') # 用作
  训练集节点
17 print(f'Training node label rate: {int(data.train_mask.sum()) /
  data.num_nodes:.2f}') # 用作训练集的节点数占比
18 print(f'Contains isolated nodes:
  {data.contains_isolated_nodes()}') # 此图是否包含孤立的节点
19 print(f'Contains self-loops: {data.contains_self_loops()}') # 此
  图是否包含自环的边
20 print(f'Is undirected: {data.is_undirected()}') # 此图是否是无向图
```

四、Dataset类——PyG中图数据集的表示及其使用

PyG内置了大量常用的基准数据集，接下来我们以PyG内置的Planetoid数据集为例，来学习PyG中图数据集的表示及使用。

Planetoid数据集类的官方文档为[torch_geometric.datasets.Planetoid](https://pytorch-geometric.com/1.4.0/datasets/#planetoid)。

生成数据集对象并分析数据集

如下方代码所示，在PyG中生成一个数据集是简单直接的。在第一次生成PyG内置的数据集时，程序首先下载原始文件，然后将原始文件处理成包含Data对象的Dataset对象并保存到文件。

```
1 from torch_geometric.datasets import Planetoid
2
3 dataset = Planetoid(root='/dataset/Cora', name='Cora')
4 # Cora()
5
6 len(dataset)
7 # 1
8
9 dataset.num_classes
10 # 7
11
12 dataset.num_node_features
13 # 1433
```

分析数据集中样本

可以看到该数据集只有一个图，包含7个分类任务，节点的属性为1433维度。

```
1 data = dataset[0]
2 # Data(edge_index=[2, 10556], test_mask=[2708],
```

```
3 # train_mask=[2708], val_mask=[2708], x=[2708, 1433], y=[2708])
4
5 data.is_undirected()
6 # True
7
8 data.train_mask.sum().item()
9 # 140
10
11 data.val_mask.sum().item()
12 # 500
13
14 data.test_mask.sum().item()
15 # 1000
```

现在我们看到该数据集包含的唯一的图，有2708个节点，节点特征为1433维，有10556条边，有140个用作训练集的节点，有500个用作验证集的节点，有1000个用作测试集的节点。PyG内置的其他数据集，请小伙伴一一试验，以观察不同数据集的不同。

数据集的使用

假设我们定义好了一个图神经网络模型，其名为Net。在下方的代码中，我们展示了节点分类图数据集在训练过程中的使用。


```
1 model = Net().to(device)
2 data = dataset[0].to(device)
3 optimizer = torch.optim.Adam(model.parameters(), lr=0.01,
  weight_decay=5e-4)
4
5 model.train()
6 for epoch in range(200):
7     optimizer.zero_grad()
8     out = model(data)
9     loss = F.nll_loss(out[data.train_mask],
  data.y[data.train_mask])
10    loss.backward()
11    optimizer.step()
12
```

结语

通过此实践环节，我们学习了**程序运行环境的配置**、**PyG中Data对象的生成与使用**、以及**PyG中Dataset对象的表示和使用**。此节内容是图神经网络实践的基础，所涉及的内容是最常用、最基础的，在后面的内容中我们还将学到复杂Data类的构建，和复杂Dataset类的构建。

作业

- 请通过继承Data类实现一个类，专门用于表示“机构-作者-论文”的网络。该网络包含“机构“、“作者“和”论文”三类节点，以及“作者-机构“和“作者-论文“两类边。对要实现的类的要求：1) 用不同的属性存储不同节点的属性；2) 用不同的属性存储不同的边（边没有属性）；3) 逐一实现获取不同节点数量的方法。

参考资料

- [PyTorch Geometric](#)
- [Installation of of PyTorch Geometric](#)

- `torch_geometric.data.Data`
- `torch_geometric.datasets.Planetoid`