



# الگوریتم‌های شبکه‌های پیچیده

پروژه پایانی



به نام خدا

## آشنایی با Graph Attention Networks (GAT)

به طور کلی تا سال ۲۰۱۸ وزن یال‌ها در زمان آموزش در شبکه‌های عصبی گرافی ثابت در نظر گرفته می‌شدند. موفقیت مکانیزم توجه چندسری<sup>۱</sup> در شبکه‌های ترنسفرمری باعث شد که در این سال شبکه‌ی گرافی مبتنی بر توجه (GAT) توسط ولکویچ<sup>۲</sup> و همکاران پیشنهاد شود. مکانیزم توجه در شبکه‌های عصبی گرافی، این مدل‌ها را قادر می‌سازد تا وزن یال‌ها را به صورت پویا در هنگام انتقال پیام<sup>۳</sup> یاد گرفته شود. در این بخش هدف آشنایی و درک دقیق معماری و عملکرد شبکه GAT است. برای پیاده‌سازی شبکه‌های عصبی گرافی دو کتابخانه معروف DGL<sup>۴</sup> و PyG<sup>۵</sup> موجود است. به دلخواه پیاده‌سازی GAT را از یکی از دو کتابخانه معرفی شده انتخاب کنید و به سوالات زیر پاسخ دهید.

(الف) از مجموعه داده‌های ارائه شده در کتابخانه انتخابی، به دلخواه سه نمونه را انتخاب کنید و سپس به طور خلاصه ویژگی‌های این مجموعه داده را ذکر کنید. دقت کنید که این داده‌های برای کار دسته‌بندی روی گراف به کار خواهند رفت.

(ب) بدون ایجاد تغییری در کد اصلی GAT، روی مجموعه داده‌ی انتخاب شده کار دسته‌بندی را انجام دهید. دقت و نوع تجمیع<sup>۶</sup> خروجی سرهای مختلف را ذکر کنید.

(ج) در ادامه تعداد سرهای مکانیزم توجه را ۱ تا ۲۰ تغییر دهید. نمودار دقت بر اساس تعداد سرها را ترسیم کنید.

(د) در این بخش می‌خواهیم در فرمول زیر که مربوط به محاسبه‌ی امتیاز توجه است، بخش الحاق<sup>۷</sup> را تغییر دهیم (دقت داشته باشید که علامت || نشان‌دهنده‌ی الحاق است).

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp(\text{LeakyReLU}(\vec{u}^{(l)T} [\vec{W}^{(l)} \mathbf{h}_i^{(l-1)} \parallel \vec{W}^{(l)} \mathbf{h}_j^{(l-1)}]))}{\sum_{v_k \in N(v_i)} \exp(\text{LeakyReLU}(\vec{u}^{(l)T} [\vec{W}^{(l)} \mathbf{h}_i^{(l-1)} \parallel \vec{W}^{(l)} \mathbf{h}_k^{(l-1)}]))}$$

بدین منظور توابع زیر را آزمایش کنید:

- Min •
- Max •
- Sum •

<sup>1</sup> Multi-head attention

<sup>2</sup> Velickovic

<sup>3</sup> Message passing

<sup>4</sup> <https://www.dgl.ai>

<sup>5</sup> <https://www.pyg.org>

<sup>6</sup> Aggregation

<sup>7</sup> Concat

- Mean
- Hadamard
- امتیازی: (Concat)

ه) تعداد سرها را ۵ در نظر بگیرید به گونه‌ای هر سر یکی از توابع معرفی شده در بخش د باشد (حالت امتیازی را در نظر بگیرید).

و) مقاله‌ی <sup>۸</sup>How Attentive are Graph Attention Networks را مطالعه کنید. تفاوت‌های آن با نسخه‌ی اصلی GAT را بیان کنید. انگیزه‌ی ایجاد نسخه‌ی جدید از GAT چه بوده است؟  
ز) بخش‌های الف، ب و ج را برای GAT\_V2<sup>۹</sup> تکرار کرده و نتایج را به صورت دقیق با هم مقایسه کنید.

---

<sup>۸</sup> <https://arxiv.org/abs/2105.14491>

<sup>۹</sup> PyG: gatv2\_conv, DGL: gatv2conv

## توضیحات

نکاتی در مورد تحویل تمرین:

- ✓ خروجی کد ها و نتایج سوالات را درون گزارش بنویسید و از توضیح اضافی کد و موارد دیگر خودداری فرمایید (کد بدون گزارش ارزشی ندارد).
- ✓ فرمت تحویل: برای هر سوال یک پوشه جداگانه در نظر گرفته، کد و مواردی از قبیل خروجی برنامه و نمودارها را در آن ذخیره نمایید. این پوشه‌ها به همراه یک فایل report.pdf برای گزارش و توضیح سوالات، درون یک فایل فشرده شده با فرمت zip و یا rar. باشد. فرمت‌های دیگر پشتیبانی نمی‌شوند.
- ✓ می‌توانید از گوگل برای رفع سوالات و مشکلات خود استفاده نمایید. در صورت رفع نشدن مشکل، می‌توانید سوالات خود را با تدریس‌یاران درس از طریق ایمیل زیر در میان بگذارید.
- ✓ هر گونه کپی‌برداری و اشتراک کار دانشجویان غیرمجاز بوده و مطابق با قوانین دانشجویان برخورد خواهد شد.
- ✓ برای قسمت‌های مرتبط با پیاده‌سازی زبان مورد قبول، زبان پایتون است و همچنین تسلط بر کد به منظور توضیح و تغییر آن الزامیست.

❖ ایمیل تدریس‌یاران درس:

bdta00@gmail.com