به نام خدا دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران) دانشکده مهندسی کامپیوتر



# گزارش پروژه پایانی درس شبکههای پیچیده

استاد درس: دکتر مصطفی حقیر چهرقانی

دانشجو: فاطمه غلامزاده ۹۹۱۳۱۰۰۳

نيم سال اول ۱۴۰۱–۱۴۰۰

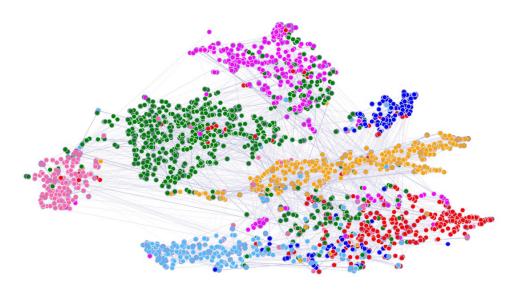
# قسمت الف)

#### دیتاست Cora

مجموعه داده Cora شامل ۲۷۰۸ نشریه علمی است که در ۷ کلاس مختلف طبقه بندی شده اند. این شبکه از استنادات شامل ۵۴۲۹ پیوند (لینک) بین نودهایش می باشد. هر نشریه در این مجموعه داده با یک بردار ۱۴۳۳ بعدی از 0 و 1 ها نمایش داده می شود که هر بعد این بردار وجود یا عدم وجود یک کلمه از دیکشنری در آن نشریه را نشان می دهد. ویژگی های این دیتاست در جدول زیر خلاصه شده است:

| ۲۷۰۸  | تعداد نودها              |
|-------|--------------------------|
| ۱۰۵۵۶ | تعداد يالها              |
| ۳/۹۰  | میانگین درجه نودها       |
| 140   | تعداد نودهای آموزشی      |
| ۰/۰۵  | Label rate نودهای آموزشی |

شکل ۱ یک بازنمایی از گراف این دیتاست است که در مقالهی اصلی GAT ارائه شده است.



شکل ۱ دیتاست Cora

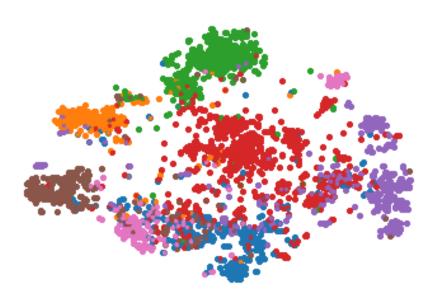
#### دیتاست Citeseer

مجموعه داده CiteSeer شامل ۳۳۱۲ نشریه علمی است که در ۶ کلاس طبقه بندی شده اند. شبکه استناد شامل ۴۷۳۲ پیوند است. هر انتشار در مجموعه داده با یک بردار کلمه ۱/۰ توصیف می شود که نشان دهنده عدم وجود

/ وجود کلمه مربوطه در دیکشنری است. دیکشنری از ۳۷۰۳ کلمه منحصر به فرد تشکیل شده است. ویژگیهای این دیتاست در جدول زیر خلاصه شده است:

| <b>ሥ</b> ሥ۲۷ | تعداد نودها              |  |
|--------------|--------------------------|--|
| 9104         | تعداد يالها              |  |
| ۲/۷۴         | میانگین درجه نودها       |  |
| 140          | تعداد نودهای آموزشی      |  |
| ۰/۰۴         | Label rate نودهای آموزشی |  |

شکل ۲ یک گراف دیتاست Citeseer را نشان می دهد.



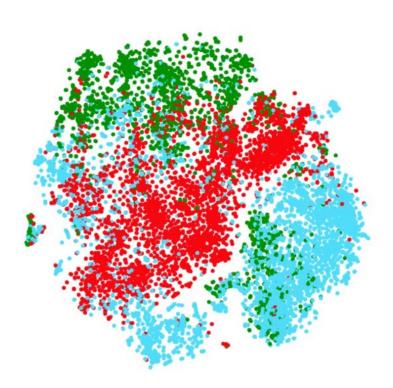
شکل ۲ دیتاست Citeseer

# دیتاست Pubmed

مجموعه داده Pubmed شامل ۱۹۷۱۷ نشریه علمی از پایگاه داده PubMed مربوط به دیابت است که در یکی از سه کلاس طبقه بندی شده اند. شبکه استناد شامل ۴۴۳۳۸ پیوند است. هر انتشار در مجموعه داده توسط یک بردار کلمه وزن دار TF/IDF از یک فرهنگ لغت که از ۵۰۰ کلمه منحصر به فرد تشکیل شده است، توصیف می شود. ویژگی های این دیتاست در جدول زیر خلاصه شده است:

| 19V1V | تعداد نودها              |
|-------|--------------------------|
| ለለ۶۴ለ | تعداد يالها              |
| ۴٫۵۰  | میانگین درجه نودها       |
| ۶۰    | تعداد نودهای آموزشی      |
| 0/00  | Label rate نودهای آموزشی |

# شکل ۳ گراف دیتاست pubmed را نشان می دهد:



شکل ۳ دیتاست Pubmed

#### قسمت ب)

برای انجام این بخش از پروژه نیاز به تنظیم هایپرپارامترهای مدل GAT بر روی سه دیتاست مذکور است. برای تنظیم این هایپرپارامترها از مطالب گفته شده در مقاله اصلی GAT ایده گرفته شده است.

این ابرپارامترها در جدول زیر خلاصه شدهاند:

|          | #output heads | Regularization factor | dropout |
|----------|---------------|-----------------------|---------|
| Cora     | 1             | 5e-4                  | 0.6     |
| Citeseer | 1             | 5e-4                  | 0.6     |
| Pubmed   | 8             | 1e-3                  | 0.6     |

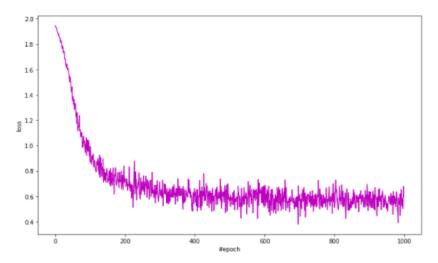
همانطور که مشاهده می شود ابرپارامترها برای دیتاست Cora و Cora دقیقا مشابه یکدیگر است. هم چنین برای تجمیع سرهای مختلف دو تابع Average و concat در این کتابخانه در نظر گرفته شده است که با تنظیم ابرپارامتر Concat به مقدارهای True و False می توان عملگر الحاق یا میانگین گیری را اعمال نمود.

در جدول زیر دقت و نوع تجمیع سرهای خروجی بر روی سه دیتاست ارائه شده است. همانطور که مشاهده می شود تجمیع از نوع average نتایج بهتری را حاصل کرده است.

| dataset  | accuracy | Aggregation type |
|----------|----------|------------------|
| Cora     | 0.8210   | average          |
|          | 0.8080   | concatenation    |
| Citeseer | 0.7110   | average          |
|          | 0.7030   | concatenation    |
| Pubmed   | 0.7910   | average          |
|          | 0.7700   | concatenation    |

برای یافتن تعداد epochهای مناسب برای آموزش مدل، نمودار loss برحسب iteration را رسم می کنیم. شکل ۴ نمودار را نشان می دهد. از هر کجا که تغییرات Loss محسوس نبود همان تعداد epoch را برای آموزش استفاده

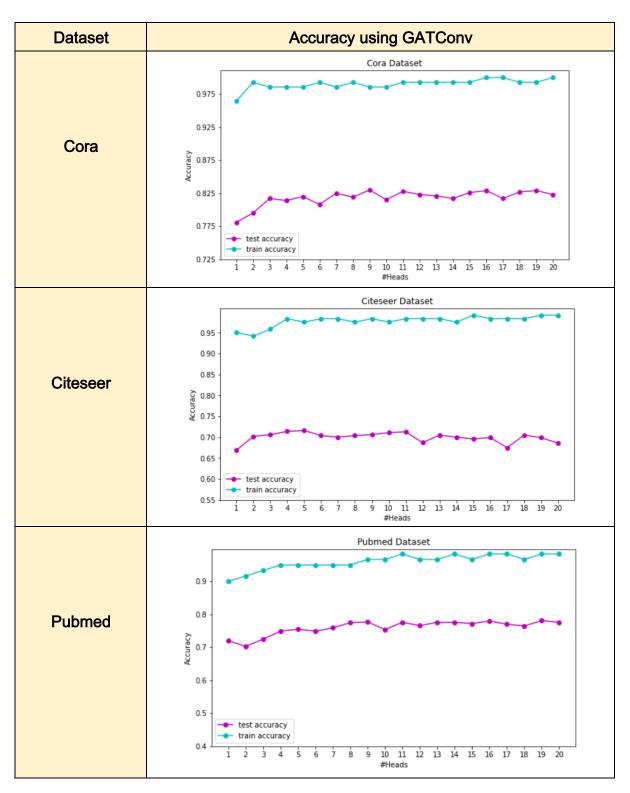
می کنیم. این نمودار برای ۱۰۰۰ تا epoch رسم شد و از حدود ۲۰۰ به بعد تغییرات چندانی در Loss مشاهده نمی شود بنابراین تعداد ۲۰۰ تا epoch را برای آموزش انتخاب می کنیم.



شكل المودار loss برحسب تعداد epochها

قسمت ج)

نمودارهای دقت روی دادههای آموزشی و تست بر اساس تعداد سرها برای سه دیتاست در جدول زیر آورده شده است.



همانطور که مشاهده میشود برای هر سه دیتاست مقدار ماکزیمم دقت در حدود بین ۶ تا ۱۰ برای تعداد سرها اتفاق میافتد. اگر تعداد سرها از این عدد بیشتر باشد مدل پیچیده میشود و اطلاعات زیادی را باید تجمیع کند و اگر کمتر از این تعداد باشد مدل ساده است و به اندازه کافی قوی نیست. به همین دلیل در مقاله GAT نیز تعداد بهینه برای تعداد سرها برای هر سه دیتاست عدد ۸ در نظر گرفته شده است. ما نیز در ادامه برای انجام بخشهای این پروژه عدد ۸ را برای تعداد سرها در نظر می گیریم.

قسمت د)

برای انجام این بخش در کد منبع GATconv بخشی که مربوط به محاسبه الحاق میباشد را Generalize می-کنیم تا بتوان هر تابعی را به جای آن قرار داد. قسمتی از کد GATConv که مربوط به این بخش است در شکل زیر نشان داده شده است:

```
# Next, we compute node-level attention coefficients, both for source
# and target nodes (if present):
alpha_src = (x_src * self.att_src).sum(dim=-1)
alpha_dst = None if x_dst is None else (x_dst * self.att_dst).sum(-1)
alpha = (alpha_src, alpha_dst)
```

در واقع باید خط سوم این تکه کد را به شکل زیر تغییر بدهیم:

```
# Next, we compute node-level attention coefficients, both for source
# and target nodes (if present):
alpha_src = (x_src * self.att_src).sum(dim=-1)
alpha_dst = None if x_dst is None else (x_dst * self.att_dst).sum(-1)
alpha = self.agg_func(alpha_src, alpha_dst)
```

که در آن Self.agg\_func یک تابع است که به عنوان ورودی به مدل داده می شود و ما برای انجام این بخش توابع min, max, sum, mean, hadamard را تعریف کرده و به عنوان ورودی می دهیم.

| لتلف در جدول زیر آورده شده است: | مختلف و با استفاده از توابع مخ | آمده بر روی مجموعه دادههای | دقت به دست |
|---------------------------------|--------------------------------|----------------------------|------------|
|                                 |                                | J . 277 7.                 | •          |

| Pubmed | Citeseer | Cora   |          |
|--------|----------|--------|----------|
| 0.7810 | 0.6990   | 0.8180 | min      |
| 0.7920 | 0.7130   | 0.8150 | max      |
| 0.7790 | 0.7020   | 0.8320 | sum      |
| 0.7910 | 0.7050   | 0.8190 | mean     |
| 0.7870 | 0.7130   | 0.8200 | hadamard |

برای انجام concat از آنجایی که عمل concat ابعاد را ۲ برابر میکند یک راه حل این است که یک تبدیل خطی روی alpha\_src و alpha\_dst قبل از concatenation بزنیم تا ابعاد هر کدام نصف شود:

```
self.lin_batch_reduce = Linear(batch_dim, int(batch_dim/2), bias=False, we ight_initializer='glorot')
```

سپس تغییرات روی مقادیر آلفا را به این صورت اعمال می کنیم:

```
alpha_src = (x_src * self.att_src).sum(dim=-1).transpose(0, -1)
alpha_src = self.lin_batch_reduce(alpha_src).transpose(-1, 0)
alpha_dst = None if x_dst is None else (x_dst * self.att_dst).sum(-1).transpose(0, -1)
if alpha_dst is not None: alpha_dst = self.lin_batch_reduce(alpha_dst).transpose(-1, 0)
alpha = self.agg_func(alpha_src, alpha_dst)
```

قسمت ه)

در این بخش هر یک از سرهای توجه از یک تابع مجزا استفاده می کند. به همین دلیل روی هر کدام از هدها یکی از توابع پنج گانه گفته شده را اعمال کرده و در نهایت نتایج را کنار هم قرار می دهیم. برای انجام این بخش یک فانکشن به صورت زیر تعریف شده است:

```
def five_head_func(alpha_src,alpha_dst):
    alpha_1 = mymin(alpha_src[:,0:1], alpha_dst[:,0:1])
    alpha_2 = mymax(alpha_src[:,1:2], alpha_dst[:,1:2])
    alpha_3 = mean(alpha_src[:,2:3], alpha_dst[:,2:3])
    alpha_4 = hadamard(alpha_src[:,3:4], alpha_dst[:,3:4])
    alpha_5 = mysum(alpha_src[:,4:5], alpha_dst[:,4:5])
    tensors= [alpha_1,alpha_2,alpha_3,alpha_4,alpha_5]
    alpha = torch.cat(tensors, 1)

return alpha
```

و این تابع به جای self.agg\_func که در قسمت قبل توضیح داده شد قرار می گیرد. نتایج حاصل به صورت جدول زیر است:

| Dataset  | Accuracy |
|----------|----------|
| Cora     | 0.8360   |
| Citeseer | 0.7120   |
| Pubmed   | 0.7870   |

همانطور که مشاهده می شود دقت برای دو دیتاست اول مقدار کمی افزایش و برای دیتاست سوم کمی کاهش پیدا کرده است.

#### قسمت و)

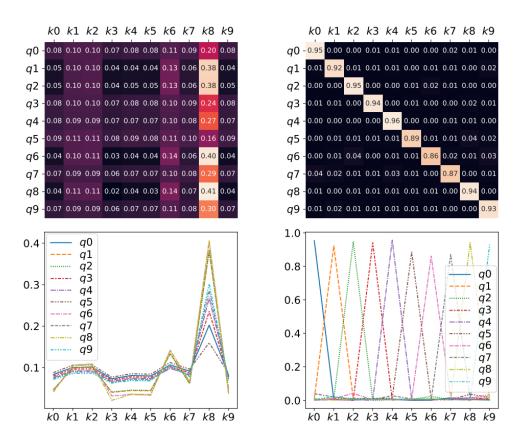
در GAT، هر گره با داشتن بازنمایی خودش به عنوان کوئری، به همسایگان خود توجه می کند. در این مقاله نشان داده شده است که GAT نوع بسیار محدودی از توجه را محاسبه می کند و در واقع رتبهبندی امتیازات توجه به نود کوئری(مورد سوال) بستگی ندارد. این نوع توجه محدود به "توجه ایستا" معروف است و مقاله آن را از "توجه پویا" که قدرت بیان آن بسیار بالاتر از توجه ایستا است، متمایز می کند.

در توجه ایستا برای هر نودی که کوئری باشد تابع توجه نسبت به امتیازات همسایهها یکنوا<sup>۲</sup>است. این بدان معناست که رتبهبندی ضرایب توجه در بین تمامی نودهای گراف به اشتراک گذاشته میشود و به نود کوئری بستگی ندارد.

این مسئله در شکل ۵ که از مقاله مذکور اقتباس شده است، نشان داده شده است. با توجه به این شکل، در یک نمودار دو بخشی کامل از گرههای کوئری که با آنها را با  $\{q0, ..., q9\}$  نشان میدهیم و "گره های کلید" که آنها را با  $\{k0, ..., k9\}$  استاندارد را نمایش میدهد که رتبه بندی ضرایب توجه برای همه گره های گراف به اشتراک گذاشته می شود و به گره کوئری بستگی ندارد. به عنوان مثال، تمام کوئریها در GATv2 استاندارد بیشتر به کلید ۸ ( $\{k0, ..., k9\}$ ) مربوط می شوند. در مقابل،  $\{k0, ..., k9\}$  که در قسمت سمت راست شکل است، در واقع می تواند توجه پویا را محاسبه کند، به طوری که هر کوئری دارای رتبه بندی متفاوتی از ضرایب توجه کلیدها است.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Static attention

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> monotonic



شکل ۵ مقایسه توجه ایستا و پویا

به دلیل اینکه GAT ها از مکانیزم توجه ایستا استفاده می کنند، مسائل گرافی سادهای وجود دارد که نمی توانند آنها را بیان کنند. نشان داده شده است که توجه ایستا حتی از فیت شدن دادههای آموزشی در GAT جلوگیری می کنند. طبق تعریف توجه ایستا که در مقاله ارائه شده است، توجه ایستا بسیار محدود است زیرا هر تابع  $f \in F$  یک کلید دارد که همیشه بدون توجه به کوئری انتخاب می شود. چنین توابعی نمی توانند موقعیتهایی را مدل کنند که در آن کلیدهای مختلف ارتباط متفاوتی با کوئری های مختلف دارند.

برای حذف این محدودیت، این مقاله یک راه حل ساده را با اصلاح ترتیب عملیات معرفی می کند و GATv2 را پیشنهاد می دهد که به شدت گویاتر از GAT است. محاسبه ی امتیاز توجه در GAT به صورت زیر انجام می شود:

$$e(\mathbf{h}_i, \mathbf{h}_i) = \text{LeakyReLU}(\mathbf{a}^{\top} \cdot [\mathbf{W}\mathbf{h}_i || \mathbf{W}\mathbf{h}_i])$$

در واقع مشکل اصلی در GAT از این جا نشأت می گیرد که لایههای W و a پشت سر هم اعمال می شوند و چون هر دو تبدیل خطی هستند، طبق خواصی که تبدیل خطی دارد می توانند به یک لایه منفرد ادغام "شوند. برای حل این مشکل GATv2 یک راه حل ساده ارائه می دهد و آن هم این است که لایه ی a بعد از غیر خطی ساز

.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> collapse

(LeakyReLU) اعمال شود و لایه ی W بعد از Concatenation اعمال شود. بنابراین فرمولی که W از آن برای محاسبه توجه استفاده می کند به این صورت است:

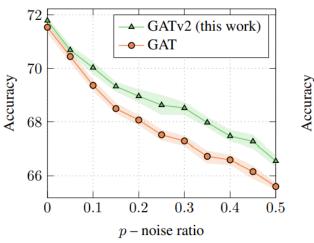
$$e(\boldsymbol{h}_i, \boldsymbol{h}_j) = \boldsymbol{a}^{\top} \text{LeakyReLU}(\boldsymbol{W} \cdot [\boldsymbol{h}_i || \boldsymbol{h}_j])$$

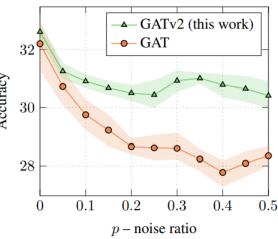
این اصلاح ساده تفاوت قابل توجهی در قدرت بیان تابع توجه ایجاد می کند. پیچیدگی محاسباتی GATv2 برابر بیان اصلاح ساده تفاوت قابل توجهی در قدرت بیان تابع توجه ایجاد می توانند ادغام شوند، محاسبات با GAT می باشد:  $O(|\mathcal{V}|dd' + |\mathcal{E}|d')$  که البته چون در GAT لایه های خطی می توانند ادغام شوند، محاسبات در GAT سریع تر صورت می گیرد.

یک تفاوت دیگر GATv2 نسبت به GAT که در واقع یک مزیت است، این است که GATv2 نسبت به نویز یالها مقاوم تر است زیرا مکانیسم توجه پویا به آن کمک می کند تا یالهای نویزی را کاهش دهد در حالی که عملکرد GAT استاندارد در صورت وجود چنین یالهایی بسیار کاهش پیدا می کند.

این مسئله در شکل زیر نشان داده شده است. نویسندگان مقاله بر روی دو دیتاست مقاومت توجه پویا و ایستا در برابر نویز را آزمودند و نتایج آن در دو نمودار گزارش شده است. دقت پیشبینی گره بر حسب نسبت نویز در این نمودارها گزارش شده است. همانطور که مشاهده میشود با افزایش میزان نویز دقت در هر دوی GAT و GATv2 کاهش پیدا میکند اما میزان و شیب این کاهش در GATv2 بسیار کمتر است.

نویسندگان ادعا می کنند که توانایی انجام توجه پویا به مدل ها کمک می کند تا بین یالهای داده شده و یالهای نویز تمایز قائل شود، زیرا گرههای مبدا و مقصد را به طور جداگانه امتیاز می دهد. این نتایج به وضوح استحکام توجه پویا را نسبت به توجه ایستا در مواجه با نویز، که در واقعیت هم رایج هستند، نشان می دهد.





# قسمت ز)

دقتهای به دست آمده برای سه دیتاست با استفاده از GAT و GATV2 در جدول زیر آورده شده است. همانطور که مشاهده می شود برای دو دیتاست Cora و Citeseer دقتها در GATv2 نسبت به GAT مقدار کمی افزایش داشته در مورد دیتاست Pubmed دقتها در GATv2 نسبت به GAT مقدار کمی کاهش داشته اند.

| dataset  | GATv2 Accuracy | GAT Accuracy | Aggregation |
|----------|----------------|--------------|-------------|
| Cora _   | 0.8220         | 0.8210       | Avg         |
|          | 0.8300         | 0.8080       | concat      |
| Citeseer | 0.7120         | 0.7110       | Avg         |
|          | 0.7080         | 0.7030       | concat      |
| Pubmed - | 0.7880         | 0.7910       | Avg         |
|          | 0.7550         | 0.7700       | concat      |

نمودارهای دقت روی دادههای آموزشی و تست برای تعداد هدهای از ۱ تا ۲۰ با استفاده از GAT و GATv2 در جدول صفحه بعد آورده شده است. همانطور که مشاهده میشود به طور کلی دقتها (به خصوص در دو دیتاست اول) با استفاده از روش GATv2 بالاتر از GAT هستند.

