به نام خدا

دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)

دانشکده مهندسی کامپیوتر

تحلیل شبکه‌های پیچیده

پروژه نهایی

دانشجو: رضا ساجدی

۴۰۰۱۳۱۰۷۲

استاد: دکتر چهرقانی

پاییز ۱۴۰۱

فهرست مطالب

سؤال اول

قسمت الف

این مجموعه‌داده، زیرمجموعه‌ای از وب‌سایت کتابشناسی علوم کامپیوتر DBLP است که شامل یک گراف ناهمگون[1] غیرجهت‌دار با چهار نوع موجودیت (گره) می‌باشد. از این گراف در مسئله طبقه‌بندی گره‌ها استفاده می‌شود و هدف آن یادگیری یک مدل به‌منظور طبقه‌بندی نویسنده‌ها در چهار زمینه پایگاه‌داده، داده‌کاوی، هوش مصنوعی و بازیابی اطلاعات است.

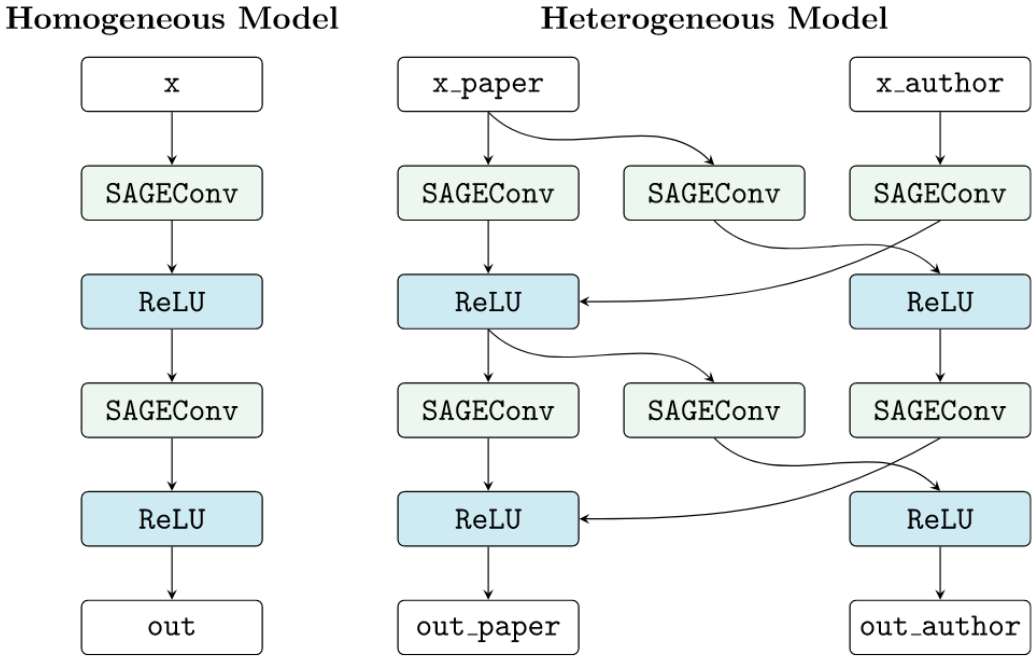
```
DBLP()
Number of graphs: 1
Number of nodes: 26128
Number of edges: 239566

Number of node features: {'author': 334, 'paper': 4231, 'term': 50,
'conference': 1}

Number of edge features: {('author', 'to', 'paper'): 0, ('paper', 'to',
'author'): 0, ('paper', 'to', 'term'): 0, ('paper', 'to', 'conference'):
0, ('term', 'to', 'paper'): 0, ('conference', 'to', 'paper'): 0}

Number of classes: 4
Average node degree: 9.17
Number of training nodes: 400
Number of validation nodes: 400
Number of test nodes: 3257
Is directed: False
Has isolated nodes: False
Has self loops: False

Other information:
HeteroData(
  author={
    x=[4057, 334],
    y=[4057],
    train_mask=[4057],
    val_mask=[4057],
    test_mask=[4057]
  },
  paper={ x=[14328, 4231] },
  term={ x=[7723, 50] },
  conference={
    num_nodes=20,
```

[1] Heterogeneous

```
    x=[20, 1]
  },
  (author, to, paper)={ edge_index=[2, 19645] },
  (paper, to, author)={ edge_index=[2, 19645] },
  (paper, to, term)={ edge_index=[2, 85810] },
  (paper, to, conference)={ edge_index=[2, 14328] },
  (term, to, paper)={ edge_index=[2, 85810] },
  (conference, to, paper)={ edge_index=[2, 14328] }
)
```

قسمت ب

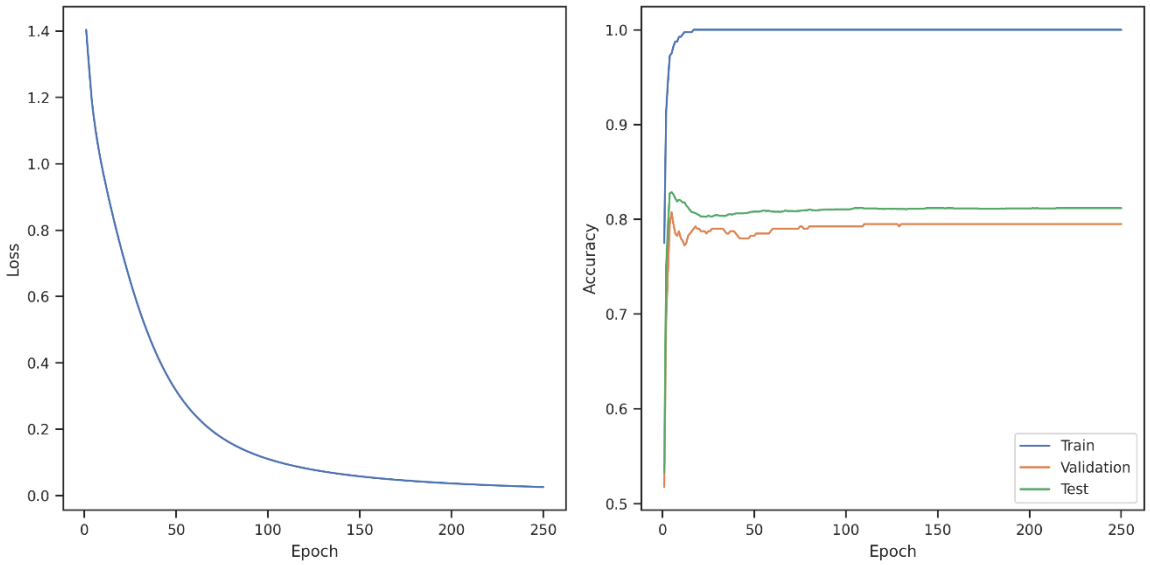
با توجه به اینکه با یک گراف ناهمگون سروکار داریم، لازم است پس از ایجاد هر شبکه عصبی گرافی همگون، آن را با استفاده از تابع to_hetero که در کتابخانه PyG موجود است به یک مدل ناهمگون تبدیل کنیم. با این کار توابع پیام منحصربه‌فردی برای هر نوع یال ایجاد می‌شود. شکل زیر نمونه‌ای از یک GNN همگون و ناهمگون را در کنار یکدیگر نمایش می‌دهد.



شبکه‌های پیچشی گرافی (GCN)

برای ایجاد یک شبکه پیچشی گرافی همگون از ماژول GCNConv استفاده می‌شود. اما این ماژول در کتابخانه PyG به گونه‌ای پیاده‌سازی شده است که امکان تبدیل به یک شبکه ناهمگون را ندارد. برای حل این مشکل، از گونه کلی‌تر یعنی SAGEConv استفاده می‌کنیم و اگر پارامتر تجمیع را با میانگین مقداردهی کنیم، مشابه GCN می‌شود.

ابتدا با استفاده از نمودار زیان برحسب دوره[۲] مقدار مناسب برای تعداد دوره‌ها را مشخص می‌کنیم. با توجه به نمودار زیر که با مقدار نرخ یادگیری ۰/۰۰۵ و دو لایه پیچشی ایجاد شده است، به‌نظر می‌رسد که مقدار ۱۰۰ برای تعداد دوره‌ها مناسب باشد؛ زیرا پس از آن مقدار زیان، کاهش چندانی ندارد و همگرایی رخ داده است.



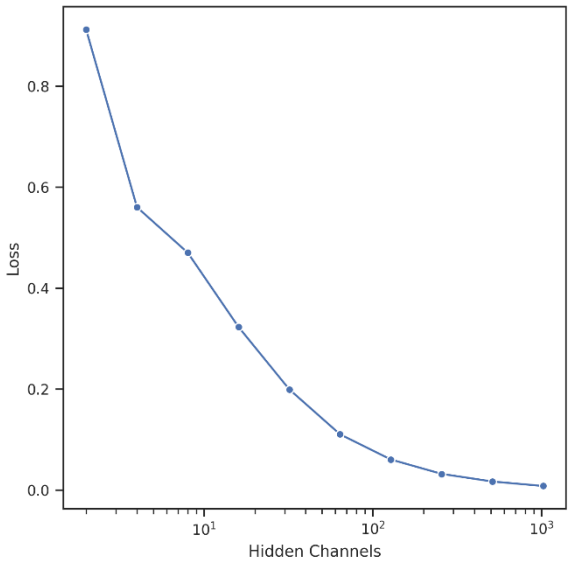
برای تشخیص مقدار مناسب برای تعداد ویژگی‌های مربوط به هر لایه پنهان، نمودار دقت بر حسب تعداد لایه‌های پنهان را رسم می‌کنیم. مقادیر مختلف برای ویژگی‌های لایه پنهان از ۲ تا ۱۰۲۴ در مقیاس لگاریتمی مورد آزمایش قرار گرفته است. در اصل یادگیری ماشین، برای تنظیم هایپرپارامترهای یک مدل باید از مجموعه‌داده اعتبارسنجی[۳] استفاده کنیم. بنابراین با توجه به منحنی نارنجی یا مقادیر موجود در ستون اعتبارسنجی در جدول زیر، به‌ازای مقادیر ۶۴ یا ۲۵۶

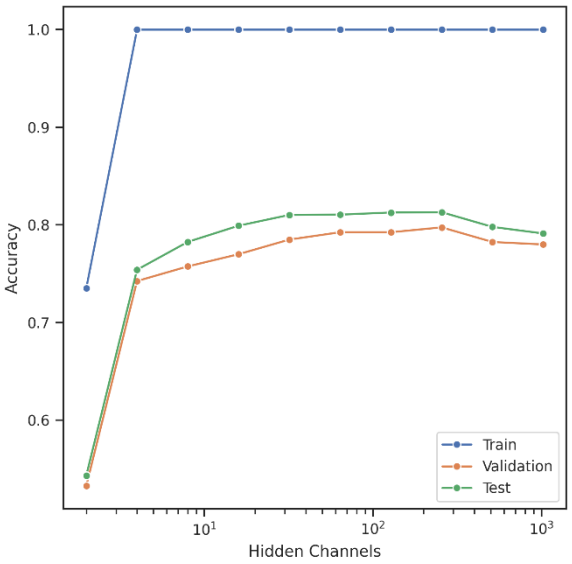
---

[2] Epoch

[3] Validation

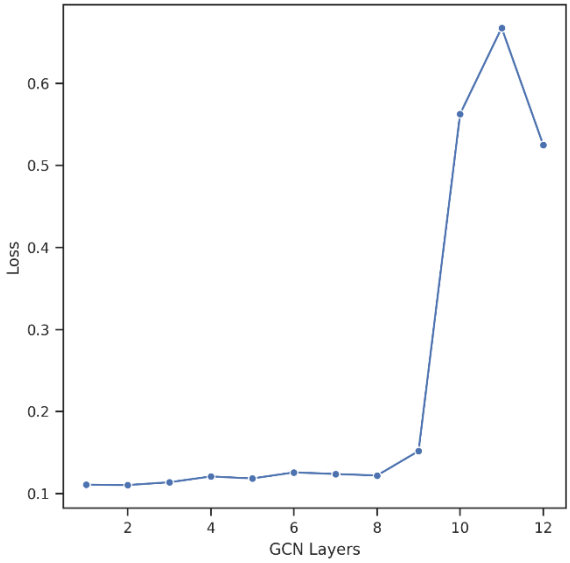
بیشترین دقت را خواهیم داشت و با توجه به اینکه تفاوت دقت‌های حاصل از این دو مقدار بسیار ناچیز است، مقدار ۶۴ را برای این هایپرپارامتر انتخاب می‌کنیم تا مدل ساده‌تری حاصل شود.

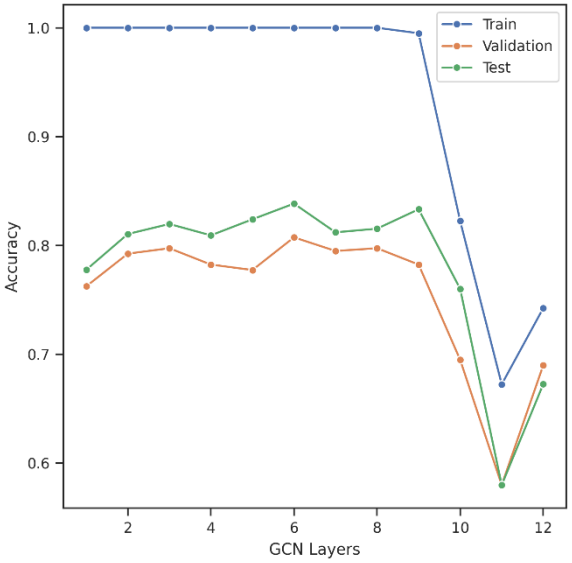




Hidden Channels	Loss	Train	Validation	Test
2	0.9125	0.735	0.5325	0.5431
4	0.5606	1.000	0.7425	0.7541
8	0.4704	1.000	0.7575	0.7826
16	0.3232	1.000	0.7700	0.7992
32	0.1995	1.000	0.7850	0.8103
64	0.1104	1.000	0.7925	0.8106
128	0.0605	1.000	0.7925	0.8127
256	0.0320	1.000	0.7975	0.8130
512	0.0169	1.000	0.7825	0.7980
1024	0.0080	1.000	0.7800	0.7912

برای تشخیص تعداد مناسب لایه‌های پیچشی، مقادیر مختلف را آزمایش کرده و نمودار دقت را رسم می‌کنیم. با توجه به منحنی نارنجی و جدول مربوطه، هنگامی که ۶ لایه پیچشی داشته باشیم، بیشترین دقت حاصل می‌شود. اما از آنجا که در صورت سؤال درخواست شده است که تنها مقادیر ۱ تا ۳ را درنظر بگیریم، مقدار ۳ که در این بازه بیشترین دقت را دارد انتخاب می‌کنیم.

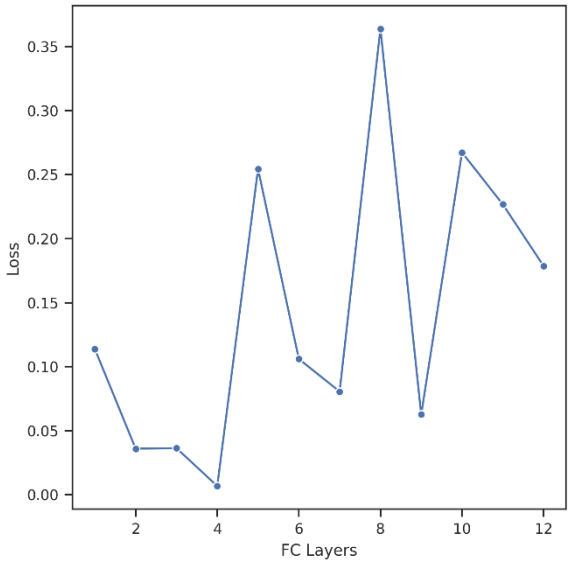


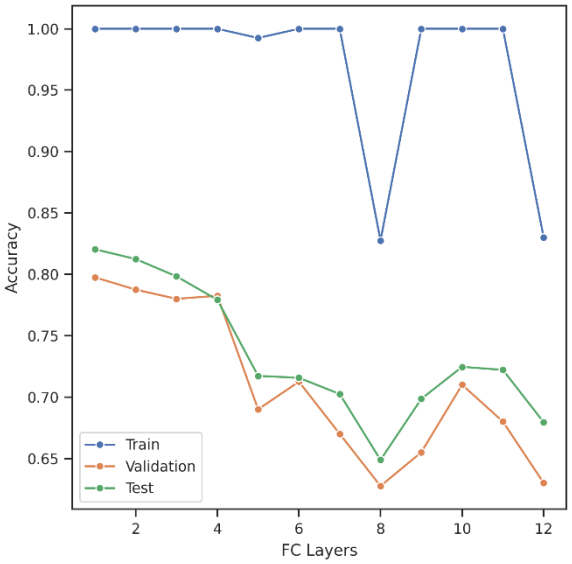


GCN Layers	Loss	Train	Validation	Test
1	0.1109	1.0000	0.7625	0.7777
2	0.1104	1.0000	0.7925	0.8106
3	0.1138	1.0000	0.7975	0.8198
4	0.1209	1.0000	0.7825	0.8093
5	0.1185	1.0000	0.7775	0.8241
6	0.1258	1.0000	0.8075	0.8385
7	0.1239	1.0000	0.7950	0.8121
8	0.1220	1.0000	0.7975	0.8155
9	0.1518	0.9950	0.7825	0.8333
10	0.5627	0.8225	0.6950	0.7602
11	0.6678	0.6725	0.5800	0.5800
12	0.5251	0.7425	0.6900	0.6727

Y

برای ایجاد لایه کاملاً متصل[4]، از ماژول Linear استفاده می‌شود. با توجه به منحنی نارنجی در شکل زیر و جدول مربوطه، زمانی که تنها از یک لایه کاملاً متصل استفاده کنیم، بیشترین دقت حاصل می‌شود.





FC Layers	Loss	Train	Validation	Test
1	0.1138	1.0000	0.7975	0.8204
2	0.0359	1.0000	0.7875	0.8124
3	0.0364	1.0000	0.7800	0.7983
4	0.0068	1.0000	0.7825	0.7792
5	0.2545	0.9925	0.6900	0.7172
6	0.1060	1.0000	0.7125	0.7157
7	0.0806	1.0000	0.6700	0.7025
8	0.3639	0.8275	0.6275	0.6488
9	0.0627	1.0000	0.6550	0.6985
10	0.2674	1.0000	0.7100	0.7246
11	0.2268	1.0000	0.6800	0.7221
12	0.1787	0.8300	0.6300	0.6795

[4] Fully-connected layer

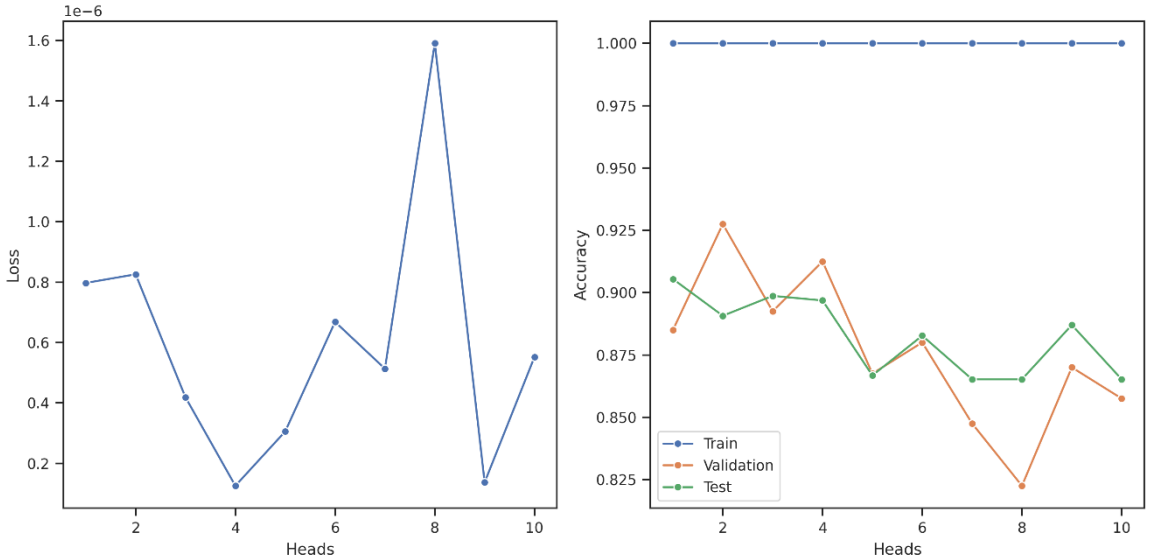
بنابراین GNN نهایی که متشکل از ۳ لایه GCN با تعداد ویژگی‌های پنهان ۶۴ و یک لایه کاملاً متصل است، دارای دقت ۸۲ درصد بر روی مجموعه‌داده آزمون[5] است.

```
GCN:
Accuracy: 0.8204
Computation Time: 14.5502s
```

با بررسی و تحلیل نمودارهای حاصل از مراحل قبل، می‌توان نتیجه گرفت که همیشه با افزایش یا کاهش مقادیر مربوط به هایپرپارامترها، دقت مدل افزایش یا کاهش پیدا نمی‌کند. برای هر هایپرپارامتر یک مقدار بهینه وجود دارد که با آزمون مقادیر مختلف یا گریدسرچ می‌توان آنها را پیدا کرد.

شبکه‌های توجه گرافی (GAT)

بررسی مقادیر مختلف برای تعداد سرهای مکانیزم توجه، نشان می‌دهد که زمانی که تعداد ۲ سر داشته باشیم، بیشترین میزان دقت را بر روی مجموعه‌داده اعتبارسنجی خواهیم داشت.



[5] Test

Heads	Loss	Train	Validation	Test
1	0.0	1.0	0.8750	0.9033
2	0.0	1.0	0.9275	0.8907
3	0.0	1.0	0.8925	0.8987
4	0.0	1.0	0.9150	0.8971
5	0.0	1.0	0.8675	0.8667
6	0.0	1.0	0.8800	0.8830
7	0.0	1.0	0.8475	0.8652
8	0.0	1.0	0.8200	0.8652
9	0.0	1.0	0.8675	0.8873
10	0.0	1.0	0.8575	0.8649

درنهایت GNN حاصل که متشکل از ۳ لایه GAT با تعداد ویژگی‌های پنهان ۶۴ و تعداد سر ۲ است، دارای دقت ۸۹ درصد بر روی مجموعه‌داده آزمون است.

```
GAT:
Accuracy: 0.8907
Computation Time: 12.7384s
```

با توجه به اینکه زیرفضای متناسب با هر سر اهمیت متفاوتی دارد، می‌توان برای هر یک از آنها یک ضریب قابل آموزش درنظر گرفت و تجمیع آنها را به‌صورت وزن‌دار انجام داد. بدین منظور کافی است یک لایه Linear بعد از لایه GAT قرار داد؛ زیرا لایه GAT به‌ازای هر سر، کانال‌های خروجی متفاوتی ایجاد می‌کند و با اتصال آنها به لایه Linear وزن‌هایی متناسب با اهمیتشان یادگرفته شده و به آنها اختصاص داده می‌شود. دقت این GNN به ۹۱ درصد رسیده است.

```
GAT using learnable coefficient:
Accuracy: 0.9116
Computation Time: 12.8774s
```

شبکه‌های توجه گرافی ۲ (GAT-V2)

در نسخه دوم GAT ضرایب توجه برخلاف نسخه اول که لایه‌های خطی درست پس از یکدیگر اعمال می‌شدند، به‌صورت پویا محاسبه می‌شود.

```
GATv2 using Hadamard:
Accuracy: 0.9143
Computation Time: 15.5159s


GATv2 using Min:
Accuracy: 0.9183
Computation Time: 17.0286s


GATv2 using Max:
Accuracy: 0.9245
Computation Time: 17.0818s
```

قسمت ج

در جدول زیر مدل‌های ساخته شده به‌ترتیب دقت بیان شده است. دقت شبکه‌های GAT به‌طور قابل ملاحظه‌ای از GCN بیشتر است؛ زیرا برخلاف GCN که اهمیت پیوندها تنها براساس ساختار گراف و بدون درنظر گرفتن ویژگی گره‌ها تعیین می‌شود، در GAT به ویژگی گره‌ها نیز توجه می‌شود و برای هر گره لینک‌های ورودی به آن از اهمیت یکسانی برخوردار نیستند و لینک‌های با اهمیت بیشتر توجه بیشتری کسب می‌کنند و هنگام تجمیع پیام‌ها، وزن بیشتری به آنها اختصاص داده می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌شود، دقت شبکه‌های GAT ایجاد شده تفاوت چندانی با یکدیگر ندارد. عملکرد نسخه دوم شبکه‌های GAT به‌دلیل محاسبه ضرایب توجه به‌صورت پویا کمی بهتر است. در مجموع نتایج ارزیابی ما نشان می‌دهد که نسخه دوم شبکه GAT با استفاده از عملگر Max با دقت ۹۲ درصد بهترین عملکرد را بر روی این مجموعه‌داده داشته است.

GNN	Accuracy
GATv2 using Max	0.9245
GATv2 using Min	0.9183
GATv2 using Hadamard	0.9143
GAT using learnable coefficient	0.9116
GAT	0.8907
GCN	0.8204

سؤال دوم

Simplifying Graph Convolutional Networks

DBLP

قسمت الف

شبکه‌های پیچشی گرافی (GCN) و گونه‌های مختلف آنها روش‌هایی هستند که برای یادگیری تعبیه یا بازنمایی گراف‌ها استفاده می‌شوند. این روش‌ها عملکرد خوبی داشته‌اند و از این جهت توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. این روش‌ها الهام گرفته از رویکردهای اخیر یادگیری عمیق هستند و از آنجا که گراف‌ها ساختاری منعطف دارند، می‌توان آنها را گونه‌های تعمیم‌یافته درنظر گرفت. این شبکه‌ها از لایه‌های مختلفی تشکیل شده‌اند که بعضی از آنها ممکن است غیر ضروری باشند و بدون اینکه کارایی مدل را به‌طور قابل توجهی بهبود دهند تنها منجر به افزایش پیچیدگی محاسباتی شوند. در این پژوهش با حذف برخی لایه‌های غیرضروری در GCN و ساده‌سازی آن مدلی با نام SGC ارائه می‌شود که دقت آن نزدیک به مدل اصلی است و می‌تواند بسیار سریع‌تر عمل کند.

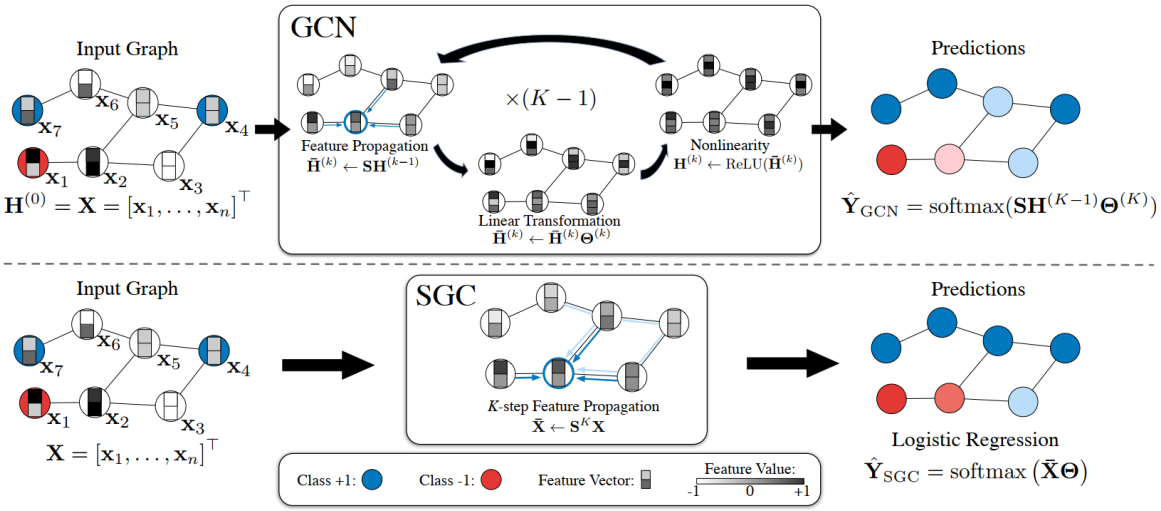
تفاوت این دو مدل در شکل زیر مشهود است. هر لایه از یک شبکه پیچشی K لایه‌ای طی سه مرحله تعبیه حاصل از لایه قبل را برای هر گره بروزرسانی می‌کند. در مرحله اول، انتشار ویژگی‌ها[6] انجام می‌شود. یعنی در ابتدای هر لایه، ویژگی‌های هر گره با بردارهای ویژگی گره‌های همسایه‌های محلی آن با استفاده از میانگین، تجمیع می‌شود. تفاوت GCN و MLP نیز در وجود همین مرحله است. در مرحله دوم، تبدیل ویژگی‌ها[7] انجام می‌شود. بردارهای تعبیه حاصل از مرحله قبل، با استفاده از ماتریسی از وزن‌ها که یادگرفته می‌شود، تبدیل می‌شوند (شبیه MLP). در مرحله سوم نیز بردارهای تعبیه از یک تابع فعال‌ساز غیرخطی عبور داده می‌شوند. پس از اینکه این سه مرحله در K لایه از GCN انجام شد، تعبیه نهایی هر گره مشخص می‌شود. در آخر با عبور این تعبیه‌ها از تابع SoftMax نرمال‌سازی انجام شده و طبقه هر گره مشخص می‌شود.

---

[6] Feature propagation

[7] Feature transformation

در شبکه SGC معادل با یک شبکه GCN متشکل از K لایه، تنها انتشار ویژگی‌ها انجام می‌شود و دیگر مانند قبل در هر لایه خبری از تبدیل ویژگی‌ها و عبور از تابع فعال‌ساز نیست. انتشار ویژگی‌ها را نیز می‌توان خیلی سریع با استفاده از ضرب ماتریسی انجام داد. بدین صورت که ماتریس مجاورت نرمال‌شده (S) به‌توان K می‌رسد و در ماتریس ویژگی‌ها (X) ضرب می‌شود. درنهایت ماتریس حاصل، از یک لایه خطی عبور داده می‌شود (در ماتریس ضرایب یاد گرفته شده ضرب می‌شود) و پس از عبور از تابع SoftMax طبقه هر گره مشص می‌شود.



برای مقایسه دقت و زمان اجرای GCN و SGC مجموعه‌داده DLBP انتخاب شده است. این مجموعه‌داده، زیرمجموعه‌ای از وب‌سایت کتابشناسی علوم کامپیوتر DBLP است که شامل یک گراف ناهمگون غیرجهت‌دار با چهار نوع موجودیت نویسندگان (۴۰۵۷ گره)، مقالات (۱۴۳۲۸ گره)، اصطلاحات (۷۷۲۳ گره) و کنفرانس‌ها (۲۰ گره) می‌باشد. از این گراف در مسئله طبقه‌بندی گره‌ها استفاده می‌شود و هدف آن یادگیری یک مدل به‌منظور طبقه‌بندی نویسنده‌ها در چهار زمینه پایگاه‌داده، داده‌کاوی، هوش مصنوعی و بازیابی اطلاعات است. این گراف به‌صورت دوبخشی است؛ یعنی بین گره‌های هم‌نوع، هیچ یالی وجود ندارد. یال‌ها نیز فاقد ویژگی هستند. اطلاعات بیشتر درمورد این گراف در سؤال اول ذکر شده است و از بازگویی آنها خودداری می‌کنیم.

قسمت ب

پیاده‌سازی SGC با ارثبری از کلاس MessagePassing از کتابخانه PyG انجام شده است. برای ایجاد شبکه پیچشی نیز از ماژول آماده SAGEConv می‌توان استفاده نمود (دلیل اینکه چرا از ماژول GCNConv استفاده نشده است، در سؤال اول توضیح داده شد). با مشاهده کدهای مقاله اصلی و برداشت خود از مقاله، این دو مدل را پیاده‌سازی کرده‌ایم. مطابق با دستورات آزمایش، تعداد لایه‌های GCN و تعداد بازنشرها در SGC برابر با ۲ درنظر گرفته شده است (K=2). مقایسه این دو مدل باید از منظر دقت و زمان اجرا انجام شود. هرچه تعداد دوره‌ها برای یک مدل کمتر باشد، طبیعی است که زمان کمتری مصرف می‌کند. بنابراین تعداد دوره‌ها برای هر دو مدل را یکسان و برابر با ۱۰۰ درنظر گرفتیم تا مقایسه عادلانه‌ای انجام شود. در عوض نرخ یادگیری مدل‌ها متفاوت است و آنها را با کمک گرفتن از نمودار زیان برحسب دوره (مانند سؤال اول) به‌گونه‌ای تنظیم کرده‌ایم که در ۱۰۰ دوره به آستانه همگرایی برسند. برای اجرا از محیط گوگل کولب و GPU استفاده شده است. درنهایت نتایج ذیل حاصل گردید:

```
GCN:
Accuracy: 0.7817
Computation Time: 23.9660s


SGC:
Accuracy: 0.7657
Computation Time: 15.4944s
```

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، تفاوت دقت SGC و GCN کمتر از ۲ درصد است. در عوض SGC تقریباً ۱/۵ برابر سریع‌تر عمل کرده است. با اینکه در مقاله اصلی بر روی مجموعه‌داده DBLP آزمایشی انجام نشده است، با بررسی مشابهت‌ها می‌توان نتیجه گرفت که نتایج آزمایش ما با نتایج مقاله اصلی تقریباً همخوانی دارد و قابل قبول است.

قسمت ج

ملاحظه شد که در SGC برخی از پیچیدگی‌های غیرضروری GCN کاهش یافت و این امر منجر به کاهش زمان اجرا گردید بدون اینکه دقت تغییر چندانی کند. SGC طی K مرحله، فرآیند انتشار ویژگی‌ها را با درنظر گرفتن همسایه‌های محلی هر گره انجام می‌دهد. در برخی کاربردها یا مجموعه‌داده‌ها، ممکن است انتشار ویژگی‌ها و درنظر گرفتن همسایه‌های محلی، تأثیر چندانی بر روی دقت مدل نداشته باشد و صرفاً با درنظر گرفتن ویژگی گره‌ها بتوان یک مدل یادگیری پرسرعت با دقت مناسب به‌دست آورد. برهمین اساس شبکه‌ای با استفاده از دو لایه خطی ایجاد کردیم (شبیه MLP) و با اجرای آن بر روی مجموعه‌داده DBLP نتایج زیر حاصل گردید:

```
Our GNN:
Accuracy: 0.7639
Computation Time: 0.8900s
```

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، دقت این شبکه تقریباً با SGC برابر است اما زمان اجرای آن بسیار کمتر است. در این مورد تقریباً ۱۵ برابر سریع‌تر عمل کرده است. البته لازم به‌ذکر است که این نتایج تنها مربوط به DBLP است و مجموعه‌داده‌های دیگر ممکن است نتایج متفاوتی داشته باشند.

بنابراین نتیجه نهایی که می‌توان از این آزمایش‌ها گرفت این است که برای هر کاربرد یا مجموعه‌داده، بهتر است قبل از اینکه مستقیم به سراغ مدل‌های پیچیده برویم، مدل‌های ساده‌تر را نیز امتحان کنیم. شاید خیلی از این پیچیدگی‌ها غیرضروری باشند و دقت را به‌طور قابل ملاحظه‌ای افزایش ندهند و صرفاً منجر به افزایش زمان اجرا شوند.