# Graph Convolution networks 코드 리뷰 및 실습

성균관대학교 인공지능연구소 딥러닝 특강(심화) - 박호건교수님 수업 1일차 실습자료

# 목차

- 0. 준비물
- 1. 세팅
- 2. 셀(shell)별 코드 소개
- 3. 세부 코드 분석
- 4. 결과

# 0. 준비물

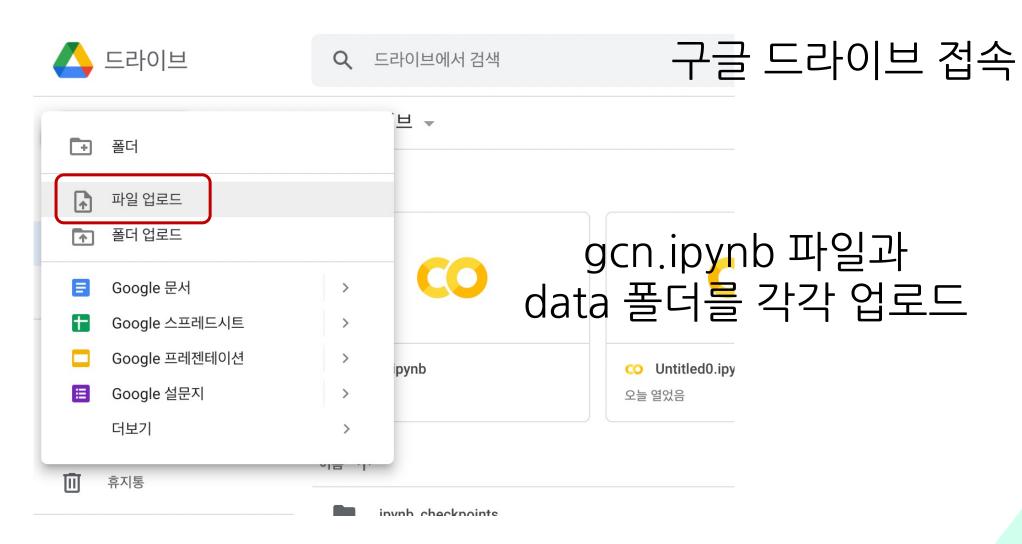


1. Colab(코랩) 실습 파일 gcn.ipynb

2. 데이터가 들어있는 폴더 data

# 1. 셋팅

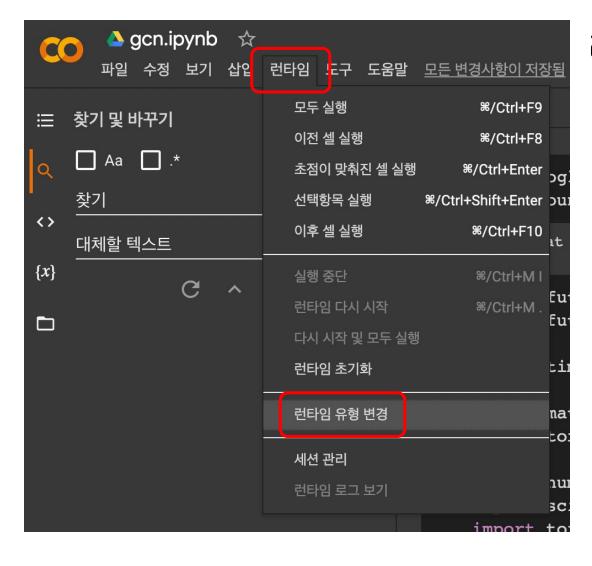
# https://drive.google.com/drive/my-drive



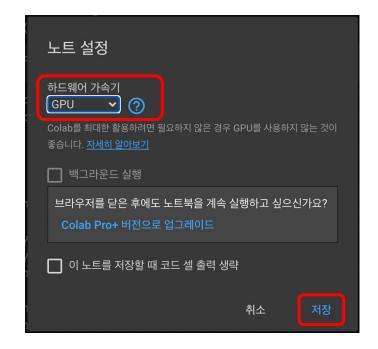
# 1. 셋팅



#### 1. 세팅



# 런타임 -> 런타임 유형변경 클릭! 하드웨어 가속기 GPU로 변경 후 저장

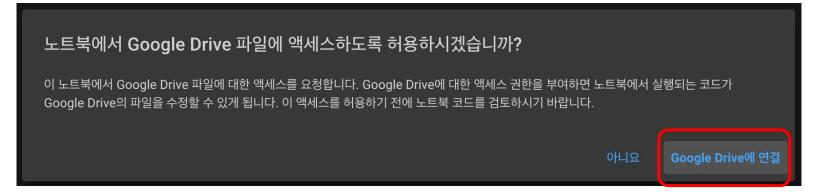


#### 1. 세팅

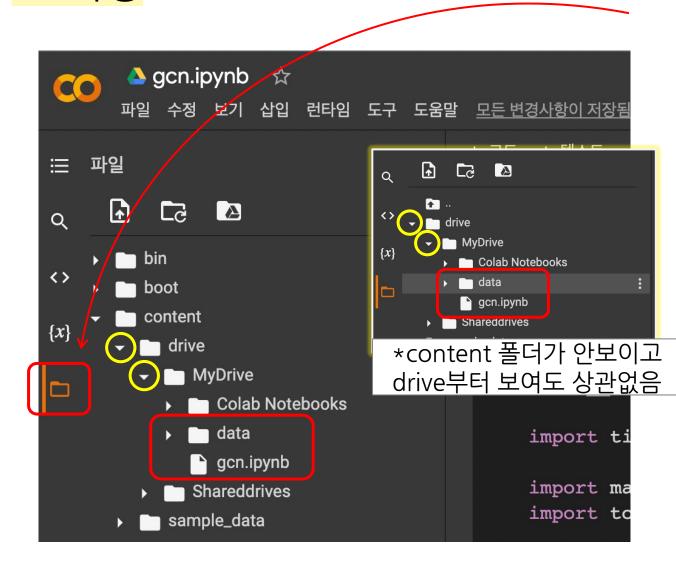
# A gcn.ipynb ☆ 파일 수정 보기 삽입 런타임 도구 도움말 모든 변경사항이 저장됨 □ + 코드 + 텍스트 □ from google.colab import drive drive.mount()'/content/drive') ↔ Mounted at /content/drive

# 첫번째 셀(shell) 실행!

# Google Drive에 연결 -> 로그인 -> 계속



# 1. 세팅



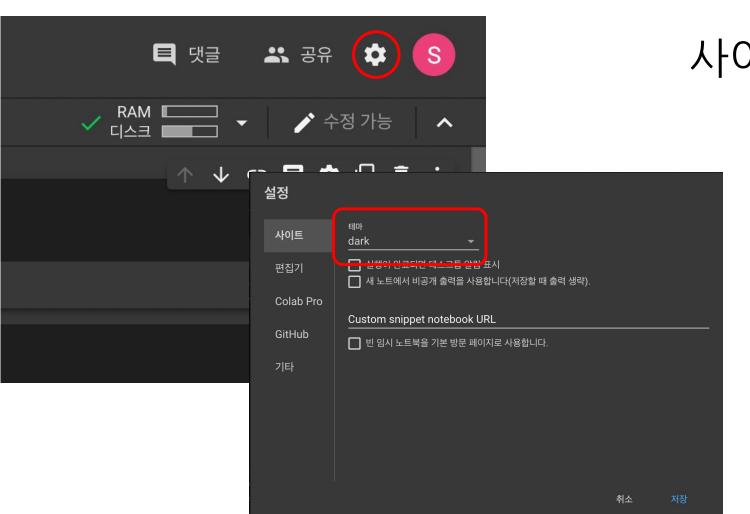
# 왼쪽 하단의 파일 창 클릭 파일 옆 세모 클릭

content

- drive
  - MyDrive
    - . . .
    - data
    - gcn.ipynb

아까 업로드한 data와 gcn.ipynb 파일이 보인다면 연결 성공!

#### \* 별첨 - 다크모드 사용법



설정 사이트 - *테마 dark* 선택 저장

> 하얀 화면을 오래보면 눈이 아프기때문에 또는 개인의 취향으로

```
from google.colab import drive
drive.mount('/content/drive')

Mounted at /content/drive
```

첫번째 셀:데이터 업로드를 위해 구글드라이브와 연동하는 코드

```
[ ] from __future__ import division
    from __future__ import print_function

import time

import torch

import numpy as np
 import scipy.sparse as sp
 import torch.optim as optim

import torch.nn as nn
 import torch.nn.functional as F
 from torch.nn.parameter import Parameter
 from torch.nn.modules.module import Module
```

두번째 셀: 여러 기능들이 들어있는 라이브러리 설치

```
#layers
   class GraphConvolution(Module):
       Simple GCN layer, similar to https://arxiv.org/abs/1609.02907
       def init (self, in features, out features, bias=True):
           super(GraphConvolution, self).__init__()
           self.in features = in features
           self.out features = out features
           self.weight = Parameter(torch.FloatTensor(in features, out features))
               self.bias = Parameter(torch.FloatTensor(out features))
               self.register parameter('bias', None)
           self.reset parameters()
       def reset parameters(self):
           stdv = 1. / math.sqrt(self.weight.size(1))
           self.weight.data.uniform (-stdv, stdv)
           if self.bias is not None:
               self.bias.data.uniform (-stdv, stdv)
       def forward(self, input, adj):
           support = torch.mm(input, self.weight)
           output = torch.spmm(adj, support)
           if self.bias is not None:
               return output + self.bias
           else:
               return output
       def __repr__(self):
           return self. class . name + ' (' \
                  + str(self.in features) + ' -> ' \
                  + str(self.out features) + ')'
```

세번째 셀:

#layers

Graph neural network의 각 층을 구현하는 코드

```
class GCN(nn.Module):
    def __init__(self, nfeat, nhid, nclass, dropout):
        super(GCN, self).__init__()

        self.gc1 = GraphConvolution(nfeat, nhid)
        self.gc2 = GraphConvolution(nhid, nclass)
        self.dropout = dropout

def forward(self, x, adj):
        x = F.relu(self.gc1(x, adj))
        x = F.dropout(x, self.dropout, training=self.training)
        x = self.gc2(x, adj)
        return F.log_softmax(x, dim=1)
```

네번째 셀:

#model

layers에서 만든 층을 불러와 모델을 조립하는 코드

```
#utils
   def encode onehot(labels):
       classes = set(labels)
       classes dict = {c: np.identity(len(classes))[i, :] for i, c in
                       enumerate(classes)}
       labels onehot = np.array(list(map(classes dict.get, labels)),
                                dtype=np.int32)
       return labels onehot
   def load_data(path="/content/drive/MyDrive/data/cora/", dataset="cora"):
       print('Loading {} dataset...'.format(dataset))
       idx_features_labels = np.genfromtxt("{}{}.content".format(path, dataset),
                                           dtype=np.dtype(str))
       features = sp.csr_matrix(idx_features_labels[:, 1:-1], dtype=np.float32)
       labels = encode_onehot(idx_features_labels[:, -1])
       idx = np.array(idx_features_labels[:, 0], dtype=np.int32)
       idx map = {j: i for i, j in enumerate(idx)}
       edges_unordered = np.genfromtxt("{}{}.cites".format(path, dataset),
                                       dtype=np.int32)
       edges = np.array(list(map(idx map.get, edges unordered.flatten())),
                        dtype=np.int32).reshape(edges unordered.shape)
       adj = sp.coo matrix((np.ones(edges.shape[0]), (edges[:, 0], edges[:, 1])),
                            shape=(labels.shape[0], labels.shape[0]),
                           dtype=np.float32)
       adj = adj + adj.T.multiply(adj.T > adj) - adj.multiply(adj.T > adj)
       features = normalize(features)
       adj = normalize(adj + sp.eye(adj.shape[0]))
       idx train = range(140)
       idx val = range(200, 500)
```

#### 다섯번째 셀:

#utils

데이터를 불러와 가공하고 정확도 측정하는 등 학습과 테스트에 필요한 여러가지 기능들을 구현

```
[ ] #Training
   import easydict
   args = easydict.EasyDict({"no-cuda":False, "fastmode":False, "seed":42, \
                              "epochs":200, "lr":0.01, "weight decay":5e-4, \
                              "hidden":16, "dropout":0.5, "cuda":True})
   np.random.seed(args.seed)
   torch.manual_seed(args.seed)
   if args.cuda:
        torch.cuda.manual seed(args.seed)
   # Load data
   adj, features, labels, idx train, idx val, idx test = load data()
   # Model and optimizer
   model = GCN(nfeat=features.shape[1],
                nhid=args.hidden,
               nclass=labels.max().item() + 1,
                dropout=args.dropout)
   optimizer = optim.Adam(model.parameters(),
                           lr=args.lr, weight_decay=args.weight_decay)
    if args.cuda:
```

#### 마지막 셀:

#Training

모델을 초기화하고 학습 데이터를 넣어 파라미터들을 학습시키는 코드

#test

학습이 완료된 모델에 테스트 데이터를 넣어 정확도를 측정함

# 3. 코드 분석 - import

```
from future import division
from future import print function
import time #시간측정 기능
import math #수학식 기능 (ex log, 삼각함수, 루트, …)
import torch
import numpy as np
import scipy.sparse as sp
import torch.optim as optim
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F
from torch.nn.parameter import Parameter
from torch.nn.modules.module import Module
```

#### \_\_future\_\_ 파이썬 2와 3의 문법이 호환 가능하도록 도와줌 예시) 파이썬 2 - print "hello gcn" 파이썬 3 - print("hello gcn")

파이썬 2 - 5 / 2 = 2 파이썬 3 - 5 / 2 = 2.5

torch: 머신러닝을 도와주는 기능 numpy: 행렬연산을 도와주는 기능

scipy : 과학계산을 도와주는 기능 (선형대수,확률분포 등)

torch.optim : 옵티마이저 패키지 torch.nn : 함수들이 담긴 클래스

torch.nn.functional : 활성화 함수 등이 담긴 패키지

torch.nn.parameter : 파라미터 관련 클래스

torch.nn.modules.module : 순전파,역전파 자동화 패키지

# 3. 코드 분석 - layers 1

	Table 1: Dataset statistics, as reported in Yang et al. (2016).						
Dataset	Type	Nodes	Edges	Classes	Features	Label rate	
Citeseer Cora	Citation network Citation network	3,327 2,708	4,732 5,429	6 7	3,703 1,433	$0.036 \\ 0.052$	
Pubmed NELL	Citation network Knowledge graph	19,717 65,755	44,338 266,144	$\begin{array}{c} 3 \\ 210 \end{array}$	500 5,414	$0.003 \\ 0.001$	

```
#layers
                                  Module을 상속하는 클래스를 만듬
class GraphConvolution(Module):
   Simple GCN layer, similar to https://arxiv.org/abs/1609.02907
         클래스가 기본적으로 가지고 있을 변수들 선언해주는 초기화 메서드
   def init (self, in features, out features, bias=True):
       super(GraphConvolution, self). init ()
       self.in features = in features
       self.out features = out features
       self.weight = Parameter(torch.FloatTensor(in features, out features))
       if bias:
           self.bias = Parameter(torch.FloatTensor(out features))
       else:
           self.register parameter('bias', None)
       self.reset parameters()
```

super: 부모 클래스의 init도 상속받음 인자는 상속받는 자식의 이름 (python2) \*Super 하지 않을 경우, 상속받은 부모 클래스의 init 위로 새로 선언한 init이 덮어쓰여진다. (부모 init 사라짐)

in\_feature : 층에 들어오는 입력값의 feature dimension

out\_features : 층에서 나가는 출력값의 feature dimension

weight : 파라미터 bias : 절편(편향)

reset\_parameters : 파라미터 초기화 함수

# 3. 코드 분석 - layers2

#### 파라미터 초기화를 해주는 이유! 초기 파라미터가 0이나 1이면 학습이 치우치는 현상이 발생

```
모델 파라미터를 초기화해주는 메소드
def reset parameters(self):
   stdv = 1. / math.sqrt(self.weight.size(1))
                                                                weight 크기 = in feature * out feature
   self.weight.data.uniform (-stdv, stdv)
                                               \sqrt{weight.size(1)} 의 첫번째 값 = in_feature = 1,433
   if self.bias is not None:
      self.bias.data.uniform (-stdv, stdv)
                                               tensor.data.uniform_ : 범위 사이에 균등하게 값이 분포
                                               입력 개수의 표준편차로 나누어 주는 것이 일반적
def forward(self, input, adj):
   support = torch.mm(input, self.weight)
                                               모델 통과 메소드
   output = torch.spmm(adj, support)
                                               torch.mm 벡터곱
   if self.bias is not None:
                                               torch.spmm 벡터곱 *요소에 0이 있을 경우 더 빨리 계산해주는 함수
      return output + self.bias
   else:
                                               바이어스가 있으면? 더해준다
      return output
                                               객체를 사용자가 이해할 수 있는 문자열로 반환하는 메소드
         (self):
    repr
   return self. class . name + ' (' \
                                               이 클래스의 객체 gc1에 대해 (다음페이지에 나옵니다)
         + str(self.in features) + ' -> ' \
                                               gc1.__repr__ 실행 시
         + str(self.out features) + ')'
                                               GraphConvolution (1433 -> 16)
```

#### 3. 코드 분석 - model

```
#model
 class GCN(nn.Module):
    def init (self, nfeat, nhid, nclass, dropout):
        super(GCN, self). init ()
        self.gc1 = GraphConvolution(nfeat, nhid)
        self.gc2 = GraphConvolution(nhid, nclass)
        self.dropout = dropout
def forward(self, x, adj):
    x = F.relu(self.gcl(x, adj))
    x = F.dropout(x, self.dropout, training=self.training)
    x = self.gc2(x, adj)
    return F.log softmax(x, dim=1)
```

GCN 클래스 생성(nn.module 상속) 초기화 메소드

nfeat, nhid를 인자로하는 GraphConvolution 클래스 객체 gc1 생성 (Cora data 에서 nfeat = 1,433, nhid = 16)

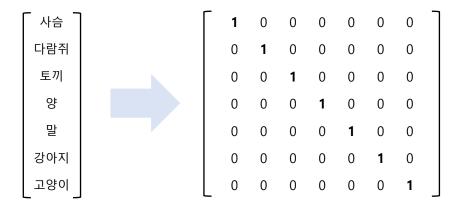
Nhid, nclass를 인자로하는 GraphConvolution 클래스 객체 gc1 생성 (nhid = 16, nclass= 7)

드롭아웃 : 모델의 일반화(보편성)를 위해 일정 비율의 인풋 값들을 없애는 기술

모델 순전파 진행 메소드

입력값 x가 위 초기화 메소드에서 생성된 gc1 층을 지나고 dropout 층을 지나고 gc2층을 지 나고 소프트맥스 층을 지나는 순서로 모델 설정

#### 3. 코드 분석 - Utils



원-핫 인코딩 함수 (각자 다른 위치에 1 하나를 가지는 벡터)

labels 모든 입력값의 정답들 set 집합, 중복되지않는 요소 추출 = 레이블의 종류 7개

np.identity(len(7)) = 대각값에 1을 가지는 7x7행렬 위 행렬의 각 줄과 각 레이블을 하나씩 매칭시킨다.

모든 레이블을 원핫인코딩 벡터로 변경한다.

원핫인코딩으로 변경된 레이블벡터를 반환한다.

#### 3. 코드 분석 - Utils

데이터 읽어오기 함수 데이터가 들어있는 위치와 이름을 인자로 넣어줌

위치에 들어있는 content.txt파일의 내용을 쉼표로 구분하여 넘파이배열로 불러온다.

불러온 data의 첫줄과 끝줄만 빼고 features 변수에 넣는다. 마지막 줄은 label 변수에 넣는다. 첫번째 줄은 idx 변수에 넣는다.

입력값의 이름과 순번(인덱스)의 위치를 바꾼다. (1380 = 1번 이라고 저장된 것을 1번 = 1380으로 바꿈)

cites.txt 파일에 들어있는 내용을 쉼표로 구분하여 넘파이배 열로 불러온다.

엣지 데이터를 1차원으로 바꾸고 이름대신 순번으로 바꿔준다.

인접행렬생성 coo\_matrix는 희소한 행렬을 인덱스만 표기함으로써 간단하게 저장하는 자료형태임

#### 3. 코드 분석 -Utils

```
adj = adj + adj.T.multiply(adj.T > adj) - adj.multiply(adj.T > adj)
features = normalize(features)
adj = normalize(adj + sp.eye(adj.shape[0]))
idx train = range(140)
idx val = range(200, 500)
idx test = range(500, 1500)
features = torch.FloatTensor(np.array(features.todense()))
labels = torch.LongTensor(np.where(labels)[1])
adj = sparse mx to torch sparse tensor(adj)
idx train = torch.LongTensor(idx train)
idx val = torch.LongTensor(idx val)
idx test = torch.LongTensor(idx test)
return adj, features, labels, idx train, idx val, idx test
```

인접행렬이 아직 대각 위 부분만 있기때문에 전치행렬 구해서 더해줌

features 정규화(<mark>값들을 0과1사이로 맞춰줌)</mark> 인접행렬에 단위행렬 더해서 정규화

트레이닝 데이터 140개 벨리데이션 데이터 300개 테스트 데이터 1000개

희소행렬로 묶어둔 걸 원래행렬로 불러오면서 텐서로 변환 원핫인코딩으로 변환한 label에서 1이 들어있는 위치 반환 인접행렬 텐서로 변환

#### 3. 코드 분석 - Utils

```
def normalize(mx):
    """Row-normalize sparse matrix"""
    rowsum = np.array(mx.sum(1))
    r_inv = np.power(rowsum, -1).flatten()
    r_inv[np.isinf(r_inv)] = 0.
    r_mat_inv = sp.diags(r_inv)
    mx = r_mat_inv.dot(mx)
    return mx

def accuracy(output, labels):
    preds = output.max(1)[1].type_as(labels)
    correct = preds.eq(labels).double()
    correct = correct.sum()
    return correct / len(labels)
```

정규화 함수

한 행이 하나의 데이터이기때문에 행을 기준으로 normalize rowsum = 행의 총합

r\_inv = 역수 취해준 뒤 1차원으로 변경 무한대 값 -> 0으로 바꿔줌 (0을 역수로 취해서 무한대가 나옴) 원래의 메트릭스와 고친 값을 곱함

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix} = > \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 1/1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$mx \qquad rowsum \qquad r_mat_inv \qquad mx \qquad \qquad \Delta \lesssim \chi$$

정확도 구하는 함수 1차원의 최대값을 구하고 타입을 labels의 타입으로 변경 같은지 비교하고 64비트 float 타입으로 바꾼다. 정답을 맞춘 갯수를 세고 전체 값으로 나눈다.

# 3. 코드 분석 - Training

```
#Training
import easydict
args = easydict.EasyDict({"no-cuda":False, "fastmode":False, "seed":42, \
                          "epochs":200, "lr":0.01, "weight decay":5e-4, \
                          "hidden":16, "dropout":0.5, "cuda":True})
np.random.seed(args.seed)
torch.manual seed(args.seed)
if args.cuda:
    torch.cuda.manual seed(args.seed)
# Load data
adj, features, labels, idx train, idx val, idx test = load data()
# Model and optimizer
model = GCN(nfeat=features.shape[1],
            nhid=args.hidden,
            nclass=labels.max().item() + 1,
            dropout=args.dropout)
optimizer = optim.Adam(model.parameters(),
                       lr=args.lr, weight decay=args.weight decay)
```

하이퍼 파라미터 조절해주는 부분

(일반적인 코드의 argument 인데 colab 특성상 커멘 드라인으로 입력값을 줄 수 없어서 easydict 로 대체)

랜덤 시드 고정

재현이 가능하도록 랜덤시 나오는 숫자가 늘 같도록 시드값을 고정하는 부분

Utils에서 만든 load\_data() 함수를 사용해 데이터를 불러오는 부분

Model에서 만든 GCN모델을 불러와 초기화 하는 부 분

Import 한 최적화기 패키지를 이용하여 사용하고자 하는 Adam optimizer 불러오기

# 3. 코드 분석 - Training

```
def train(epoch):
    t = time.time()
    model.train()
    optimizer.zero_grad()
    output = model(features, adj)
    loss_train = F.nll_loss(output[idx_train], labels[idx_train])
    acc_train = accuracy(output[idx_train], labels[idx_train])
    loss_train.backward()
    optimizer.step()
```

```
학습 함수
현재 시간 저장
모델 학습모드로 바꿈
옵티마이저 0으로 초기화
모델에 데이터를 넣어주는 코드
import했던 Funtional에서 nll_loss 함수 불러와 로스 계산
Train 정확도 구하기
loss를 가지고 역전파진행 ( gradient 계산 )
파라미터 갱신
```

벨리데이션 loss 계산 벨리데이션 정확도 계산 에폭에 따른 학습 로스,학습 정확도, 벨리데이션 로스, 벨리 데이션 정확도, 시간 출력

# 3. 코드 분석 - Training

```
def test():
    model.eval()
    output = model(features, adj)
    loss test = F.nll loss(output[idx test], labels[idx test])
    acc test = accuracy(output[idx test], labels[idx test])
    print("Test set results:",
          "loss= {:.4f}".format(loss test.item()),
          "accuracy= {:.4f}".format(acc test.item()))
# Train model
t total = time.time()
for epoch in range(args.epochs):
    train(epoch)
print("Optimization Finished!")
print("Total time elapsed: {:.4f}s".format(time.time() - t total))
# Testing
test()
```

테스트 함수 모델 테스트모드로 전환 모델에 데이터 넣어주는 코드 결과에 대한 loss 계산 결과에 대한 정확도 계산 테스트 정확도 출력

Main 현재시간 저장 에폭 수만큼 train 함수 진행 총 걸린 시간 출력 test 함수 진행

#### 4. 결과

```
Loading cora dataset...
Epoch: 0001 loss train: 1.9418 acc train: 0.2000 loss val: 1.9047 acc val: 0.3500 time: 0.0077s
Epoch: 0002 loss train: 1.9225 acc train: 0.2929 loss val: 1.8947 acc val: 0.3500 time: 0.0108s
Epoch: 0003 loss train: 1.9123 acc train: 0.2929 loss val: 1.8855 acc val: 0.3500 time: 0.0076s
Epoch: 0004 loss train: 1.9040 acc train: 0.2929 loss val: 1.8767 acc val: 0.3500 time: 0.0084s
Epoch: 0005 loss train: 1.8931 acc train: 0.2929 loss val: 1.8681 acc val: 0.3500 time: 0.0100s
Epoch: 0191 loss train: 0.4459 acc train: 0.9571 loss val: 0.6923 acc val: 0.8267 time: 0.00968
Epoch: 0192 loss train: 0.4488 acc train: 0.9429 loss val: 0.6899 acc val: 0.8300 time: 0.0105s
Epoch: 0193 loss train: 0.4289 acc train: 0.9286 loss val: 0.6884 acc val: 0.8300 time: 0.0097s
Epoch: 0194 loss train: 0.4162 acc train: 0.9500 loss val: 0.6870 acc val: 0.8300 time: 0.0118s
Epoch: 0195 loss train: 0.4145 acc train: 0.9500 loss val: 0.6862 acc val: 0.8267 time: 0.0109s
Epoch: 0196 loss train: 0.3705 acc train: 0.9429 loss val: 0.6855 acc val: 0.8233 time: 0.0102s
Epoch: 0197 loss train: 0.4360 acc train: 0.9357 loss val: 0.6851 acc val: 0.8200 time: 0.0098s
Epoch: 0198 loss train: 0.4056 acc train: 0.9571 loss val: 0.6847 acc val: 0.8233 time: 0.0100s
Epoch: 0199 loss train: 0.4111 acc train: 0.9357 loss val: 0.6836 acc val: 0.8267 time: 0.0099s
Epoch: 0200 loss train: 0.4426 acc train: 0.9143 loss val: 0.6825 acc val: 0.8267 time: 0.0105s
Optimization Finished!
Total time elapsed: 2.2469s
Test set results: loss= 0.7285 accuracy= 0.8390
```

에폭에 따라 줄어드는 loss, 올라가는 정확도를 확인 할 수 있다. 전체 학습시간은 2.24초

> 벨리데이션 정확도 0.8267 테스트 정확도 0.83

학습 정확도 0.9143 학습데이터셋에 과적합은 피하기 어렵다. Val 정확도로 학습 중 test 정확도를 예측해볼 수 있다.

# 감사합니다.

질문함 : lsy7451@g.skku.edu