Графовые свёрточные нейронные сети

Александр Колодезный БПМИ192

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (Москва)

23 ноября 2021 г.

Graph Convolutional Network

Вид одного слоя

$$\mathbf{h}_v^{\ell+1} = \phi^{\ell+1} \Big(\mathbf{h}_v^{\ell}, \ \Psi(\{\psi^{\ell+1}(\mathbf{h}_u^{\ell}) \mid u \in \mathcal{N}_v\}) \Big)$$

- ▶ Ψ permutation-invariant функция
- lacktriangledown ϕ^{l+1} и ψ^{l+1} некоторый функция на l-ом слое

Graph Convolutional Network

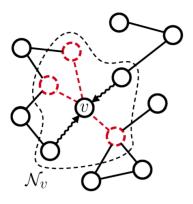
$$\mathbf{h}_v^{\ell+1} = \sigma(\mathbf{W}^{\ell+1} \sum_{u \in \mathcal{N}(v)} \mathbf{L}_{uv} \mathbf{h}_u^{\ell}),$$

- ▶ σ сигмоида
- $ightharpoonup W^{l+1}$ обучаемая матрица
- ► *L*_{uv} нормированный Лаплассиан

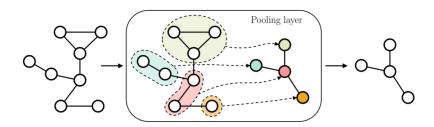
Sampling

Виды

- Для каждой вершины выбираем случайное подмножество соседних, которые будут влиять на новое значение h_v. (GraphSAGE).
- Выбирать случайное множество вершин всего графа и обучаться только на полученном ими подграфе (FastGCN).



Pooling



- Сжатие кластеров вершин в одну
- Уменьшает размеры графа
- Уменьшает вычислительную стоимость

Differentiable Pooling

Обучаем для каждой вершины попадание в кластера

$$\mathbf{S}^{\ell+1} = \operatorname{softmax}(\operatorname{GNN}(\mathbf{A}^{\ell}, \mathbf{H}^{\ell})),$$

 Пересчитываются embedding для новых вершин, и новая матрица смежности

$$\mathbf{H}^{\ell+1} = \mathbf{S}^{\ell+1} \mathbf{H}^{\ell}$$
 and $\mathbf{A}^{\ell+1} = \mathbf{S}^{\ell+1} \mathbf{A}^{\ell} \mathbf{S}^{\ell+1}$.

Новая матрица смежности оказывается полной



Спасибо за внимание!

Графовые свёрточные нейронные сети

Александр Колодезный БПМИ192

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (Москва)

23 ноября 2021 г.