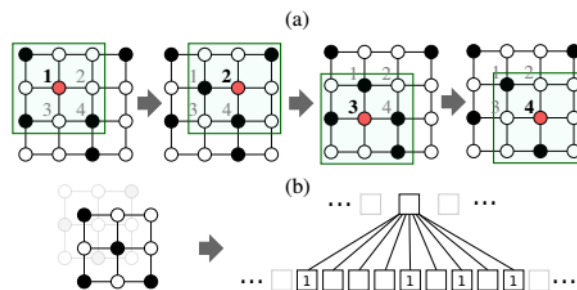


# 1 Convolutional neural networks (CNN) für Graphen

## 1.1 Einleitung

- Anwendungsfälle:
  1. Aus einer Menge von Graphen soll eine Funktion für Klassifizierungs- oder Regressionsprobleme gelernt werden, die auf nicht bekannte Graphen angewendet werden kann
  2. lerne Graph-Repräsentationen, um auf Graph-Eigenschaften (fehlende Kanten, Knodeigenschaften) unbekannter Graphen zu schließen
- Graphrepräsentation:
  - Graphen können gerichtet oder ungerichtet sein
  - Graphen können zyklisch sein
  - Graphen können mehrere unterschiedliche Kantentypen besitzen (mehrere Perceptive-Field-Layer)
  - Graphen können mehrere diskrete oder kontinuierliche Werte an ihren Knoten haben
- Methode berechnet lokal verbundene Nachbarschaften der Graphen und benutzt sie als die *Receptive Fields* des CNN
- die Methode kann für Graphen mit gewichteten Kanten erweitert werden



- Idee: repräsentiere Bilder als Graph
  - ein Bild kann als Graph repräsentiert werden, indem die Knoten jeweils einen Pixel repräsentieren und es eine Kante zwischen zwei Knoten gibt, wenn deren Pixel benachbart sind
  - die lokale Nachbarschaft eines Pixels wird repräsentiert als ein Quadrat um den Punkt (hier  $3 \times 3$ )
  - Aus der Nachbarschaft kann ein Merkmal ermittelt werden
- üblicherweise gibt es keine räumliche Anordnung einer Graph-Repräsentation
- Probleme:

1. Welche Nachbarschaften um welche Knoten und in welcher Reihenfolge bilden die Receptive Fields?
  2. Wie können die einzelnen Nachbarschafts-Graphen in einem Vektor repräsentiert werden (Normalisierung)?
- Verfahren:
    1. bestimme eine Knoten-Auswahl inklusive Reihenfolge
    2. bestimme den Nachbarschafts-Graphen um diesen Knoten mit genau  $k$  Knoten
    3. normalisiere die Nachbarschafts-Graphen
    4. füttere sie in ein CNN

## 1.2 Grundlagen

- Graph  $G = (V, E)$  mit  $V = \{v_1, \dots, v_n\}$  und  $E \subseteq V \times V$ , wobei  $n$  Anzahl der Knoten und  $m$  Anzahl der Kanten
- Adjazenzmatrix  $A$  mit Größe  $n \times n$ , wobei  $A_{i,j} = 1$ , falls eine Kante von  $v_i$  nach  $v_j$  existiert (sonst 0)  $\Rightarrow v_i$  und  $v_j$  sind adjazent
- ein Weg ist eine Sequenz von Knoten, bei der benachbarte Knoten adjazent sind
- $d(u, v)$  beschreibt die minimale Distanz zwischen von  $u$  nach  $v$
- $N_1(v)$  beschreibt die 1-Nachbarschaft um einen Knoten, d.h. alle Knoten die adjazent sind zu  $v$

### 1.2.1 Beschriftung und Partitionierung

- eine Graph-Beschriftung  $l : V \rightarrow S$  bildet einen Knoten auf eine sortierbare Einheit ab
- induziert ein *Ranking*  $r : V \rightarrow \{1, \dots, |V|\}$  mit  $r(u) < r(v)$  genau dann, wenn  $l(u) > l(v)$
- falls  $l$  injektiv, dann gibt es eine totale Ordnung der Knoten in  $G$  und eine eindeutige Adjazenzmatrix  $A^l$ , bei der die Knoten die Position  $r(v)$  haben
- eine Graph-Beschriftung induziert eine Partitionierung  $\{V_1, \dots, V_k\}$  mit  $u, v \in V_i$  falls  $l(u) = l(v)$
- Metriken:
  - Anteil an kürzesten Wegen von  $v$  zu  $v$  (*Betweenness centrality*)
  - Grad der Knoten (Anzahl adjazenter Knoten)
  - ...

## 1.3 Lernen von Graphen

### 1.3.1 Knotenauswahl

- Auswahl an Knoten, für die ein Receptive Field erstellt werden soll
  - Gegeben: Graph-Beschreibung  $l$ , Abstand  $s$ , Anzahl  $w$  an Receptive Fields
1. sortiere die Knoten auf Basis von  $l$
  2. iteriere über die sortierte Knotenmenge mit Abständen  $s$ , bis  $w$  Knoten ausgewählt wurden

### 1.3.2 Nachbarschaftssuche

- Gegeben: Knoten  $v$ , Größe  $k$  des Receptive Fields
1. setze initiale Knotenmenge  $N$  auf  $v$
  2. wiederhole bis  $|N| > k$ :
    - a) berechne für alle Knoten  $i$  in  $N$  die Nachbarschaften  $N_1(i)$  und füge sie zu  $N$  hinzu
- Bemerkung: im Allgemein gilt  $|N| \neq k$

### 1.3.3 Normalisierung

- Gegeben: Menge von Graphen  $\mathcal{G}$  mit  $k$  Knoten, Distanzmetriken für Matrizen  $d_A$  und Graphen  $d_G$
- Optimierungsproblem:  $\min_l \sum_{G \in \mathcal{G}} \sum_{G' \in \mathcal{G}} (d_A(A^l(G), A^l(G')) - d_g(G, G'))$

## 1.4 Auswertung

- CNNs mit Bildern können identisch über CNNs mit Graphen dargestellt werden
- Methode funktioniert teilweise deutlich besser als State-of-the-Art Graph-Kerne (z.B. bei Klasifizierungsproblemen)

## 1.5 Zukünftige Arbeiten

- gewichtete Kanten (oder allgemeiner Graphen mit Kanteneigenschaften)
- Graphen auf andere Netze übertragen, z.B. RNNs
- kombiniere unterschiedliche Receptive Field-Größen