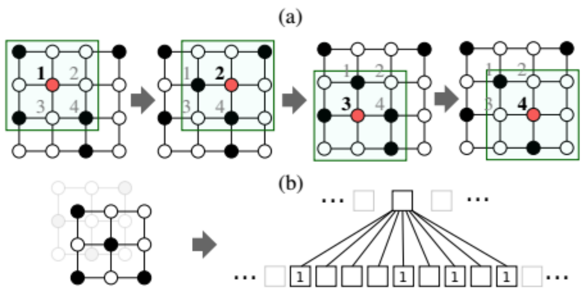
1 Convolutional neural networks (CNN) für Graphen

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, Knoteneigenschaften) 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 3×3)
    - 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 Fiels?
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 $l : V \to S$ bildet einen Knoten auf eine sortierbare Einheit ab
- induziert ein *Ranking* $r : V \to \{1, \dots, |V|\}$ 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 Partionierung $\{V_1, \dots V_k\}$ mit $u, v \in V_i$ falls $l(u) = l(v)$
- Metriken:
  - Anteil an kürzesten Wegen von v zu v (*Betweeness 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 Reciptive 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: $\min_l \sum_{G \in \mathcal{G}} \sum_{G' \in \mathcal{G}} (d_A(A^l(G), A^l(G') - d_g(G, G')))$
- weitermache

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

2 Graph-Kerne

-