

# GRAPH NEURAL NETWORK (GNN)

PATRICK SORREL MVOTO KONGO

sorrel.mvoto@facsciences-uy1.cm  
Licencié en physique

Sous le mentorat de Steve Cabrel Teguia Kouam  
Master en Physique

Laboratoire de Physique Atomique ,Moléculaire et Biophysique  
Université de Yaoundé 1

August 2, 2023



# Plan de travail

- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



# Machine learning et graphe

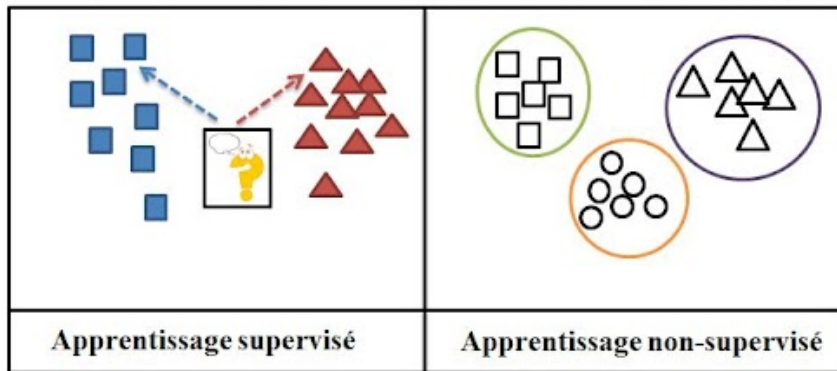


Figure 1: type d'apprentissage automatique



# Motivations

## Challenges

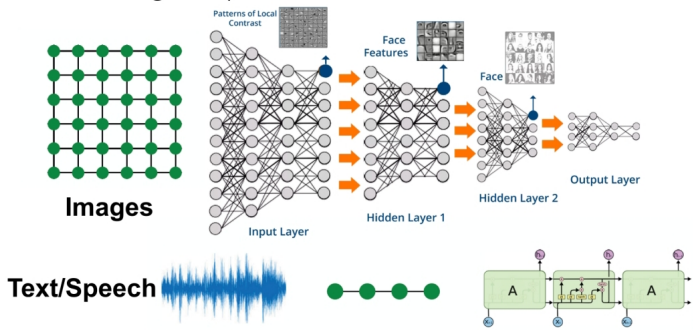


Figure 2: challenges des GNN

- Complexité topologie
- Pas d'ordre évident pour les nœuds, pas de points de référence
- modélisation de la dynamique



# Applications

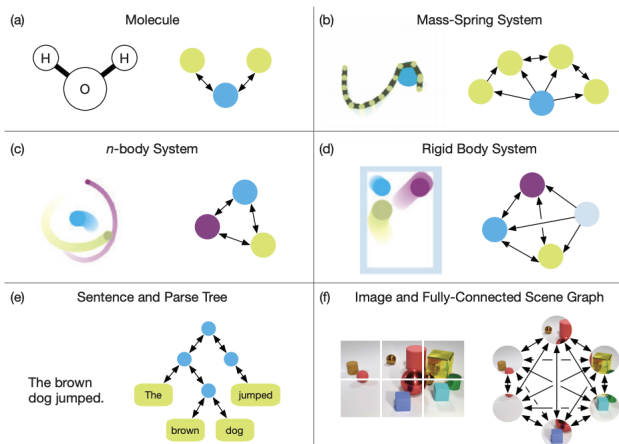


Figure 3: exemples d'applications des GNN



# Taches des GNN

- Recommandation d'images chez Pinterest
- Très large échelles
- Features multiples

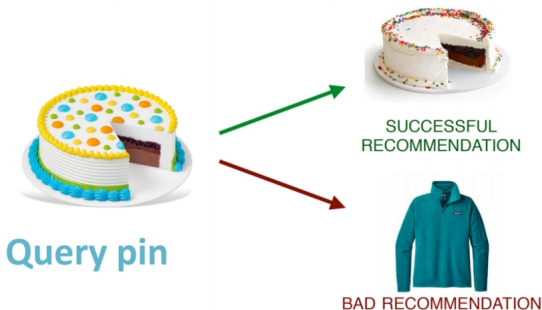


Figure 4: recommandation en ligne



# Taches des GNN

- Sélection de molécule pour antibiotiques
- prédiction de trafic routier

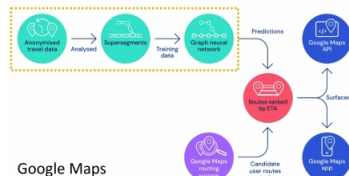
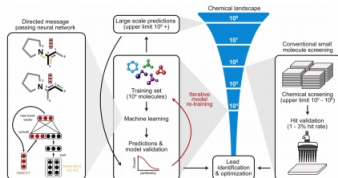


Figure 5: prédictions et sélection des molécules





- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



# Graphe et extraction des données

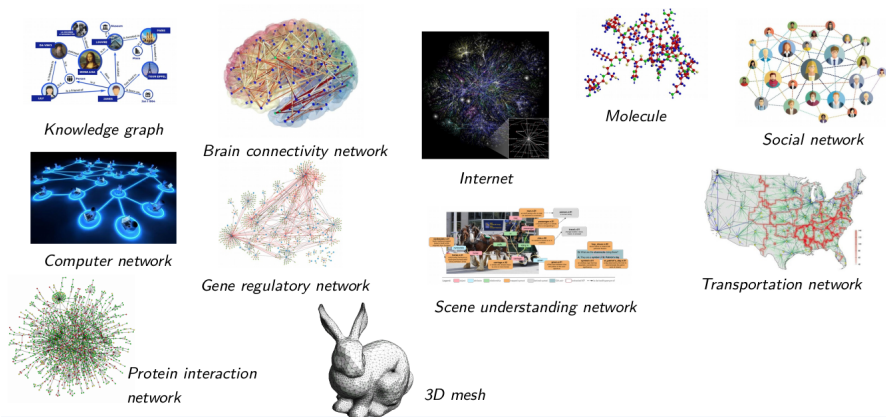


Figure 6: exemple de graphes

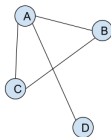


# Représentation d'un graphe

## Graphe

représentation visuelle d'un ensemble d'objets et des relations qui existent entre ces objets.

Undirected Graph



Directed Graph

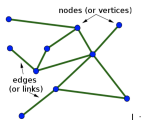
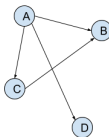


Figure 7: exemples et partie d'un graphe



# Graphe :matrice adjacente

Structure :

- La **matrice adjacente**  $A = A_{i,j} \in \{0, 1\}^{n \times n}$ 
  - $A_{i,j} = 1$  si  $(i,j) \in E$ , et 0 Sinon
- De manière facultative la représentation de la **matrice des caractéristiques des nœuds/arêtes**

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

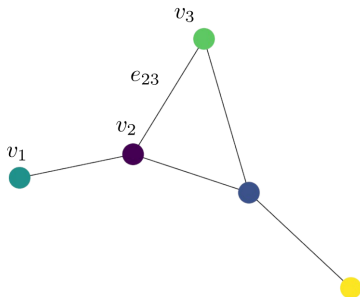


Figure 8: représentation d'un graphe



- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



# Message et agrégation

## phase de message passing

Consiste à propager l'information (ou le "message") entre les nœuds du graphe en utilisant les représentations des nœuds et des arêtes. Cette étape permet aux nœuds du graphe de communiquer et de partager de l'information.

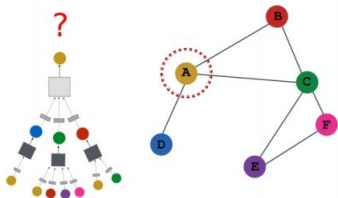


Figure 9: propagation du message



# Message et agrégation

## phase d'agrégation

Consiste à agréger les informations mises à jour pour chaque nœud afin de calculer une représentation globale du graphe

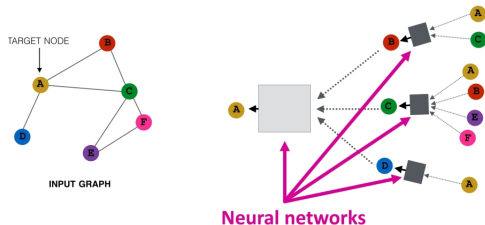


Figure 10: agrégation





# Message et agrégation

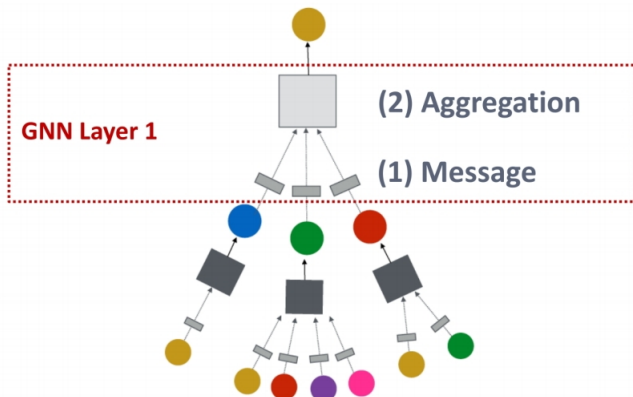


Figure 11: message et agrégation



- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



# Connexion et couche de GNN

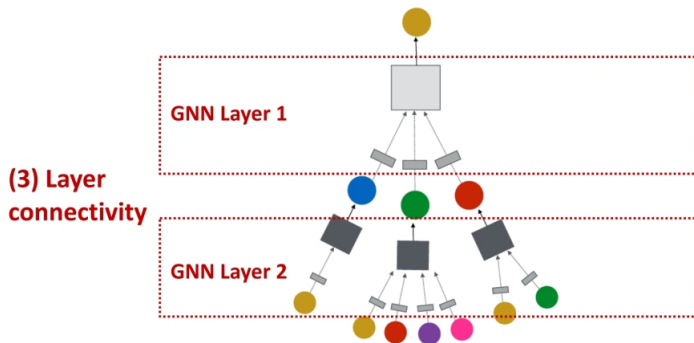


Figure 12: Connexion et couche



# Connexion et couche de GNN

## Connexion et couche

- Connexion : Cette étape consiste à agréger les embeddings des nœuds voisins pour mettre à jour l'embedding d'un nœud donné. Cela permet de propager l'information à travers le graphe
- Couche : (classiquement une couche fully-connected) est appliquée sur l'embedding résultant de l'étape de connexion. Cette couche permet d'apprendre de nouvelles représentations et caractéristiques.



- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - **Embedding**
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



# Embedding

- Embeddings = plongements
- Objectif : apprendre des représentations indépendantes des tâches
- On veut une représentation vectorielle des nœuds
  - similarité d'embedding = similarité dans le réseau (proximité, symétrie)
  - encoder l'information structurelle

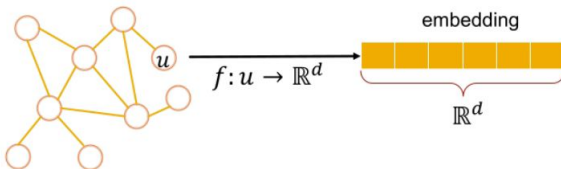


Figure 13: embedding



- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - **Entraînement**
- 3 Exemple de programme



# Entraînement

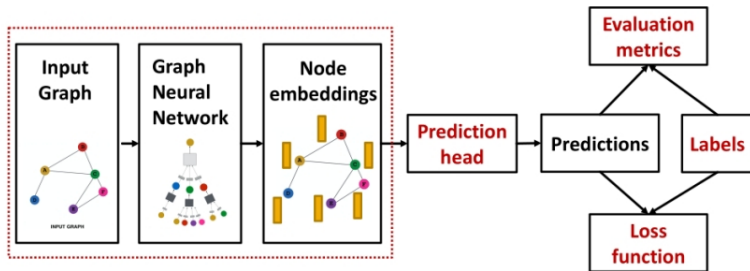


Figure 14: modèle d'entraînements





- 1 Intérêt de l'utilisation des GNN
- 2 Principe de fonctionnement GNN
  - Graphe et extraction des données
  - Message et agrégation
  - Connexion et Couche de GNN
  - Embedding
  - Entraînement
- 3 Exemple de programme



# Exemple de programme

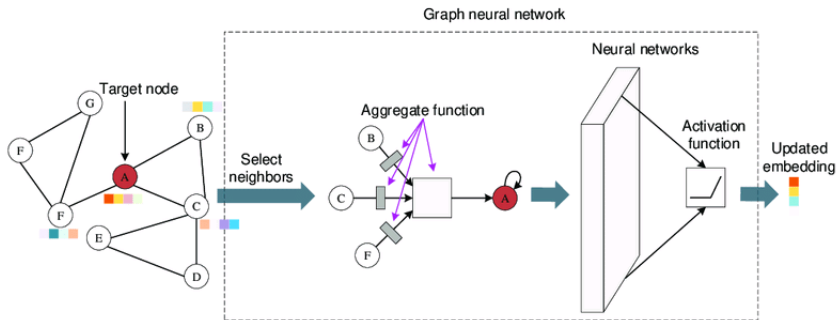


Figure 15: représentation d'une GNN



# Références

- (<https://cedric.cnam.fr/vertigo/cours/RCP217/docs/RCP217-GraphML1.pdf>)
- (<https://www.keaipublishing.com/en/journals/aiopen>)
- (<https://cedric.cnam.fr/vertigo/cours/RCP217/docs/RCP217-GraphML2.pdf>)
- (<http://DataScientest.com>)



# Remerciement

Merci pour votre aimable attention  
[sorrel.mvoto@facsciences-uy1.cm](mailto:sorrel.mvoto@facsciences-uy1.cm)

