

Etat de l'art des réseaux de convolutions de graphes et leurs nuances.

Cléa HAN - Léa TRIQUET - Adrien ZABBAN

27 octobre 2023

1 Introduction

Ce rapport se penche sur trois des méthodes les plus prometteuses et influentes dans le domaine du deep learning avec des graphes : Graph Convolutional Networks [1] (GCN), Simplifying Graph Convolutional Networks [2] (SGC) et les Graph Isomorphism Network [3] (GIN). Ces approches ont démontré leur capacité à extraire des informations pertinentes à partir de données de graphes, permettant ainsi de résoudre une multitude de problèmes, tels que la classification de nœuds, la prédiction de liens, la recommandation de contenu, et bien d'autres.

Au cours de ce rapport, nous explorerons en détail le fonctionnement de ces trois méthodes, en mettant l'accent sur leurs principes fondamentaux, leurs avantages et leurs domaines d'application. Nous discuterons également des défis et des opportunités inhérents à l'utilisation du deep learning dans des contextes de données de graphes, ainsi que des tendances futures dans ce domaine en constante évolution.

2 Les différentes méthodes

2.1 Graph Convolutional Networks (GCN)

Un Graph Convolution Network (GCN) est un type de réseau de neurones artificiels conçu pour traiter des données structurées sous forme de graphes. Ils utilisent des opérations de convolution spécialement adaptées aux graphes pour propager l'information entre les nœuds du graphe, ce qui leur permet de capturer les relations et les dépendances entre les entités interconnectées. L'équation 1 représente la règle de propagation de la couche l à la couche $l + 1$.

$$H^{(l+1)} = \sigma(\tilde{D}^{-\frac{1}{2}} \tilde{A} \tilde{D}^{-\frac{1}{2}} H^{(l)} W^{(l)}) \quad (1)$$

où $\tilde{A} = A + I_n$ est la matrice d'adjacence au quelle on ajoute des connections sur les noeuds vers eux-mêmes. $\tilde{D}_{ii} = \sum_j \tilde{A}_{ij}$ qui est une matrice diagonale des degrés des noeuds du graphe. $W^{(l)}$ sont les poids de la couche l et $H^{(l)}$ est la sortie de la couche $l - 1$, $H^{(0)} = X$. σ est une fonction d'activation.

Par exemple, un petit réseaux de convolutions de graphes pourrait suivre l'équation 2

$$Z_{GCN} = \text{softmax}(\hat{A} \text{ReLU}(\hat{A} X W^{(0)}) W^{(1)}) \quad (2)$$

où $\hat{A} = \tilde{D}^{-\frac{1}{2}} \tilde{A} \tilde{D}^{-\frac{1}{2}}$

2.2 Simplifying Graph Convolutional Networks (SGC)

Les modèles SGCs sont construits à partir d’une linéarisation des GCNs en faisant l’hypothèse que les non linéarités principalement apportées par les ReLU entre les différentes couches d’un GCN n’apportent pas d’informations significatives. Ainsi, les modèles SGCs retirent ces non linéarités et conservent uniquement un Softmax en dernière couche, afin de pouvoir obtenir des résultats sous forme d’une distribution de probabilités.

Nous pouvons modéliser le SGC sous la forme de l’expression simplifiée suivante l’équation 3

$$Z_{SGC} = \text{softmax}(\hat{A}^K X W) \quad (3)$$

où \hat{A}^K représente les K multiplications successives avec \hat{A} notre matrice d’adjacence normalisée, définie dans la section 2.1, X est les entrées et W est la matrice réunissant l’ensemble des poids utilisés dans le modèle tel que : $W = W^{(1)} W^{(2)} \dots W^{(K)}$. La SGC équivaut à une composante d’extraction de caractéristiques : $\tilde{X} = \hat{A}^K X$, ce qui nécessite aucun poids. Puis, cela est suivi d’une régression logistique $Z_{SGC} = \text{softmax}(\tilde{X} W)$. Ainsi la première étape équivaut à du prétraitement des caractéristiques de nos données X , car aucun poids n’est appliqué sur nos données. Ainsi, l’entraînement du SGC s’apparente en réalité à une régression logistique multi classe sur des données prétraitées. D’autre part, l’entraînement d’une régression logistique est un problème d’optimisation convexe bien documenté, ainsi ses performances seront relativement meilleures que celles du GCN qui contient des non linéarités. De plus, l’entraînement du SGC sera naturellement plus rapide. D’un point de vue “graphe”, la SGC correspond à un filtre fixe sur le domaine du graphe spectral. Si nous ajoutons des boucles dans le graphe original, l’application du SGC permet de réduire la taille du spectre graphique grâce à l’astuce de renormalisation présentée par Kipf & Welling [1]. La SGC agit comme un filtre passe bas qui lisse les caractéristiques du graphes, ainsi les nœuds voisins vont avoir tendance à partager des représentations et donc des prédictions similaires.

2.3 Graph Isomorphism Network (GIN)

Les GIN (Graph Isomorphism Networks) sont une classe de réseaux neuronaux profonds spécialement conçus pour le traitement des données de graphes. Leur fonctionnement repose sur une idée clé : définir un modèle qui peut apprendre à identifier si deux graphes sont isomorphes, c’est-à-dire s’ils ont la même structure sous-jacente. Les GIN commencent par représenter les nœuds et les arêtes d’un graphe sous forme de vecteurs, puis ils appliquent des couches de réseau neuronal pour agréger et mettre à jour ces représentations. Les informations de voisinage sont combinées itérativement à chaque couche pour capturer des motifs de plus en plus complexes. En fin de compte, le GIN génère un vecteur de représentation pour chaque graphe d’entrée. Cela permet de comparer ces vecteurs pour déterminer si les graphes sont isomorphes. L’équation 4 représente la règle de propagation de la couche l à la couche $l+1$ pour le sommet v .

$$h_v^{(l)} = \text{MLP}^{(l)} \left((1 + \epsilon^{(l)}) \cdot h_v^{(l-1)} + \sum_{u \in \mathcal{N}(v)} h_u^{(l-1)} \right) \quad (4)$$

où MLP est un perceptron à plusieurs couches (multi-layer perceptrons), $\epsilon \in \mathbb{R}$ est un hyperparamètre, et $\mathcal{N}(v)$ est l'ensemble des voisins du sommet v . En notant A la matrice d'adjacence, on peut réécrire l'équation 4 sous forme matricielle donnée par la formule 5.

$$h^{(l)} = \text{MLP}^{(l)} \left((A + (1 + \epsilon) \cdot I_n) \cdot h^{(l-1)} \right) \quad (5)$$

3 Entraînement

Nous avons entraîné 3 réseaux de neurones utilisant chacun une méthode (GCN, SGC et GIN) sur la base de données ENZYMES de TUDataset [4]. Cette base de données contient 600 graphes représentant 6 types d'enzymes différentes. En moyenne les graphes ont 32 sommets et 124 arrêtes et chaque sommet de chaque graphe est représenté par 3 features. Le but des modèles de graphes et de trouver le bon type d'enzymes à partir d'un graphe. Dans tous les entraînements, nous avons utilisé la Cross Entropy pour la fonction de coût, et la métrique accuracy pour voir les performances des réseaux.

GCN : Nous avons créé un modèle en concaténant 4 modules GCN à la suite. Nous avons mis des fonctions ReLU entre ces couches, et ajouté une couche dense à la fin du réseau pour avoir en sortie un vecteur de taille 6 (le nombre d'enzymes différentes). La Figure 1 montre les courbes d'apprentissages pendant 40 epochs.

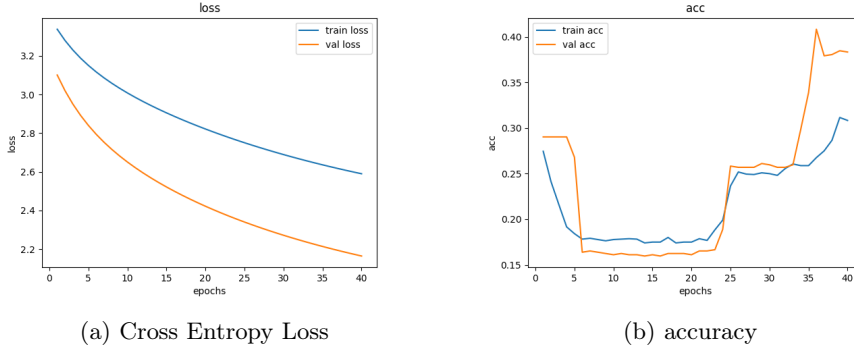


FIGURE 1 – Apprentissage d'un réseau de neurones utilisant les GCN

SGC : Nous avons concaténé 2 couche de SGC à la suite avec un $K = 4$, et mis la fonction ReLU entre. Puis nous avons utilisé une couche dense à la fin du réseau. La Figure 2 montre les courbes d'apprentissages pendant 40 epochs.

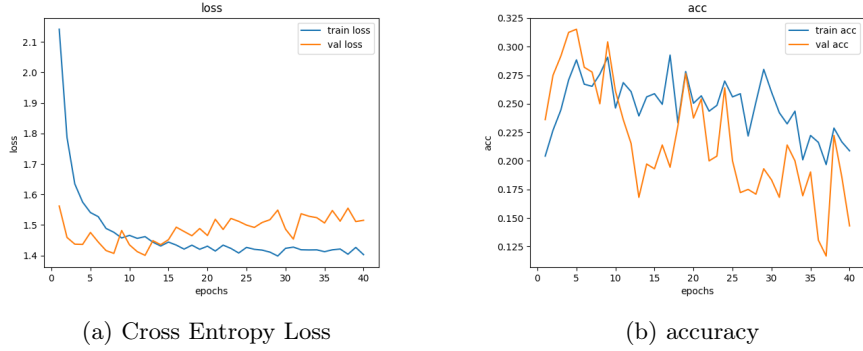


FIGURE 2 – Apprentissage d'un réseau de neurones utilisant les SGC

GIN : Nous avons concaténé 2 couche de GIN. Sur ces 2 couches, nous avons utilisé un réseau de neurone utilisant 2 couches denses. Nous avons mis une activation ReLU entre chaque couche dense. La Figure 3 montre les courbes d'apprentissages pendant 40 epochs. On peut voir que l'apprentissage est assez chaotique, pourtant on a utilisé un faible learning rate (0.001).

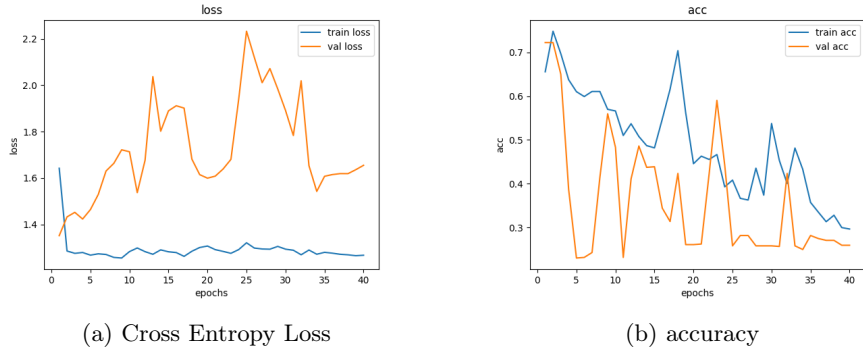


FIGURE 3 – Apprentissage d'un réseau de neurones utilisant les GIN

4 Résultats

Nous voyons sur la Table 1, les résultats des modèles sur la base de données de teste.

Modèles	GCN	SGC	GIN
Cross Entropy	2.86	1.85	1.75
Accuracy	0.20	0.16	0.66

TABLE 1 – Résultat sur la base de données de teste

Les données indiquent que le modèle GIN affiche la performance la plus remarquable, avec la plus faible Cross Entropy (1.75) et la meilleure Accuracy

(0.66). Ce modèle excelle dans la réduction de l'erreur de prédiction et la réalisation de prédictions précises. En comparaison, SGC et GCN présentent des performances inférieures en termes d'erreur et de précision, avec des valeurs plus élevées dans les deux métriques. Cependant, il convient de noter que le choix du modèle dépendra du contexte spécifique de la tâche, des objectifs et des contraintes de ressources. Dans l'ensemble, ces résultats suggèrent que GIN peut être la meilleure option lorsque la précision des prédictions est essentielle, mais d'autres facteurs, tels que la complexité de l'entraînement, doivent également être pris en compte pour faire un choix éclairé entre les modèles.

5 Conclusion

En résumé, ce rapport a exploré en détail trois des méthodes les plus influentes dans le domaine en pleine expansion du deep learning avec des graphes : les Graph Convolutional Networks (GCN), les Simplifying Graph Convolutional Networks (SGC), et les Graph Isomorphism Networks (GIN). Ces méthodes ont été examinées à travers diverses perspectives, notamment leurs principes de fonctionnement, leurs avantages, leurs inconvénients et leurs domaines d'application.

Les GCN, avec leur approche de propagation de l'information basée sur les voisins, sont une méthode solide pour des graphes de petite à moyenne taille et sont relativement faciles à interpréter. Cependant, ils peuvent présenter des limitations en ce qui concerne la généralisation à des graphes plus grands.

Les SGC, en revanche, se concentrent sur l'échantillonnage des graphes pour traiter des graphes plus volumineux, mais ils peuvent souffrir de perte d'information due à cet échantillonnage. Ils offrent une alternative aux GCN pour des tâches spécifiques.

Enfin, les GIN, grâce à leur capacité à traiter les graphes non ordonnés et leur performance solide en termes de précision, semblent émerger comme le choix préféré pour de nombreuses applications.

Références

- [1] T. N. KIPF et M. WELLING, « Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks, » *CoRR*, t. abs/1609.02907, 2016. arXiv : [1609.02907](https://arxiv.org/abs/1609.02907). adresse : <http://arxiv.org/abs/1609.02907>.
- [2] F. WU, T. ZHANG, A. H. S. JR., C. FIFTY, T. YU et K. Q. WEINBERGER, « Simplifying Graph Convolutional Networks, » *CoRR*, t. abs/1902.07153, 2019. arXiv : [1902.07153](https://arxiv.org/abs/1902.07153). adresse : <http://arxiv.org/abs/1902.07153>.
- [3] K. XU, W. HU, J. LESKOVEC et S. JEGELKA, « How Powerful are Graph Neural Networks ? » *CoRR*, t. abs/1810.00826, 2018. arXiv : [1810.00826](https://arxiv.org/abs/1810.00826). adresse : <http://arxiv.org/abs/1810.00826>.
- [4] C. MORRIS, N. M. KRIEGER, F. BAUSE, K. KERSTING, P. MUTZEL et M. NEUMANN, « TUDataset : A collection of benchmark datasets for learning with graphs, » in *ICML 2020 Workshop on Graph Representation Learning and Beyond (GRL+ 2020)*, 2020. arXiv : [2007.08663](https://arxiv.org/abs/2007.08663). adresse : www.graphlearning.io.