

Обзор литературы

Набор статей на тему графовых нейронных сетей

Почему сейчас актуальны графовые нейронные сети

- Многие задачи на графах могут решаться только приближенными алгоритмами, что отлично подходит под формулировку задач машинного обучения.
- Задачи генерации данных являются открытыми до сих пор. Все генераторы графов без использования анализа данных очень ограничены
- Задачи моделирования процессов требуют зачастую подсчет сложных статистик, состоящих из многих статистик графа, что требует их предварительный подсчет, а это может быть уже очень долго. Эту проблему могут решить алгоритмы ml, находя сразу нужное выражение

A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks

- Нейронные сети с рекуррентными графами;
- Нейронные сети со сверточными графами;
- Автокодеры графов;
- Нейронные сети с пространственно-временными графами.

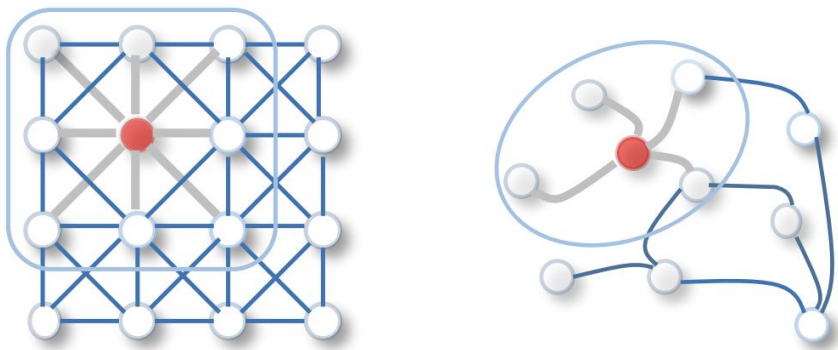
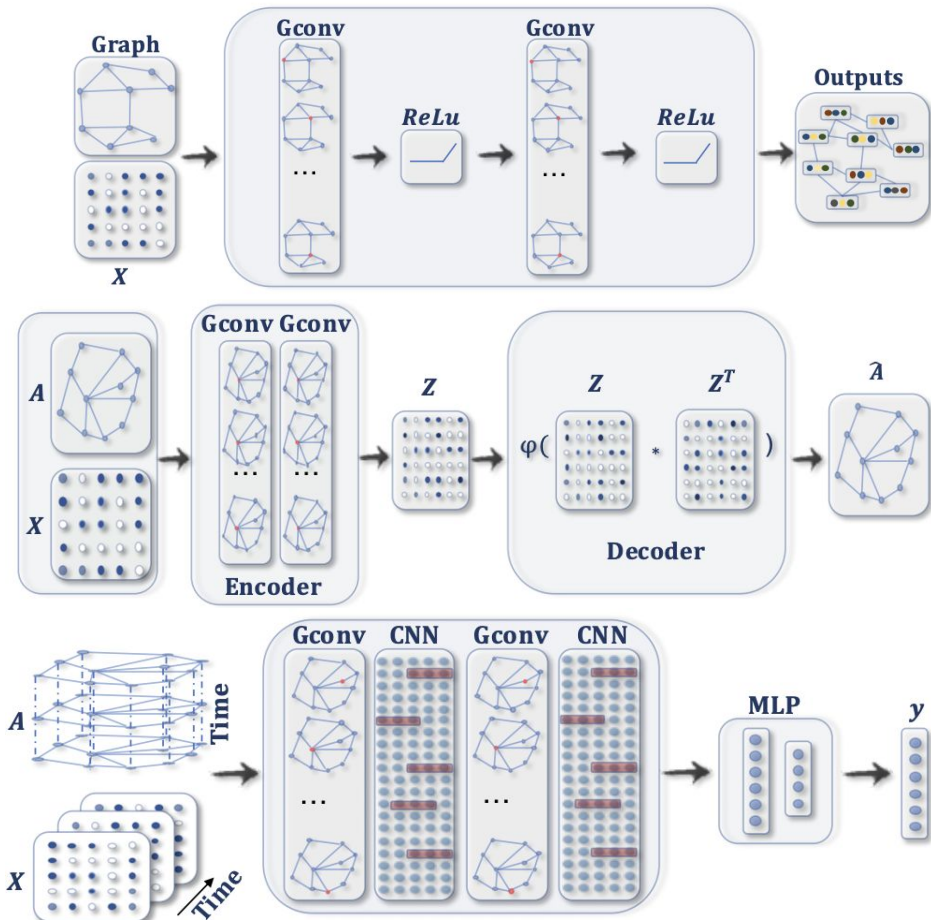


Рисунок: Различия GraphConv и 2DConv



Learning to Identify High Betweenness Centrality Nodes from Scratch: A Novel Graph Neural Network Approach

$$h_{N(v)}^{(l)} = \text{AGGREGATE}(\{h_u^{(l-1)}, \forall u \in N(v)\})$$

$$h_v^{(l)} = \sigma(W_l \cdot \text{COMBINE}(h_v^{(l-1)}, h_{N(v)}^{(l)}))$$

- Структура сети: энкодер-декодер
- Энкодер при помощи агрегирования окрестности фиксирует внутреннюю структуру и кодирует ее в эмбедингах
- Декодер, имеющий структуру MLP, на основе эмбедингов представлений получает относительные значения BC
- Обучать сеть можно на любых графах: как реальных, так и синтетических

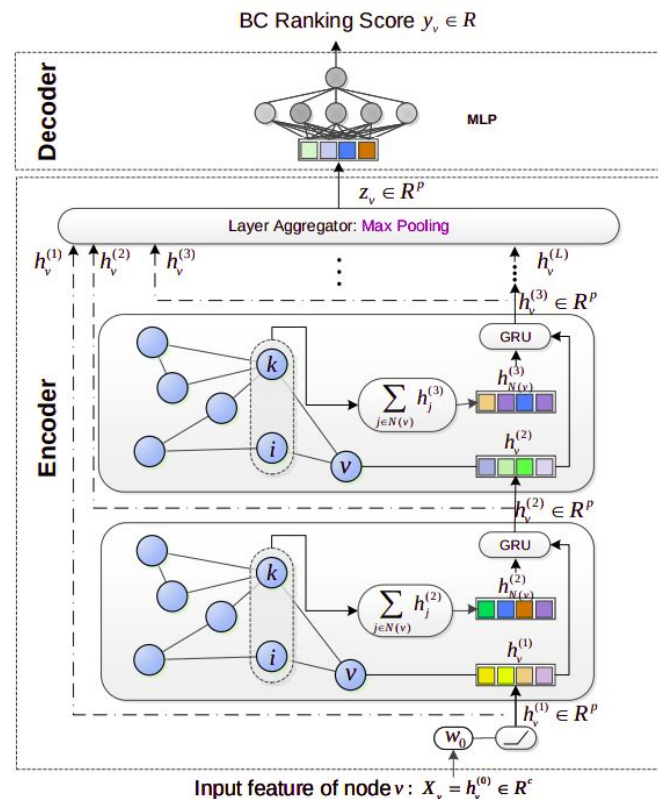


Figure 2: The encoder-decoder framework of DrBC

Fast Approximations of Betweenness Centrality with Graph Neural Networks

$$a_v^{(k)} = \text{AGGREGATE}^{(k)}(\{h_u^{(k-1)} : u \in \mathcal{N}\})$$

$$h_v^{(k)} = \text{COMBINE}^{(k)}(h_v^{(k-1)}, a_v^{(k-1)})$$

- Навеян задачей из биоинформатики, где применялся для агрегирования связей между атомами в молекуле
- На каждом уровне каждая вершина объединяет характеристики своих соседей, что также можно рассматривать как этап передачи сообщения.
- Вектор признаков узла обновляется путем объединения его векторов признаков с агрегированными признаками соседей.
- После K итераций вектор представления окончательного узла захватывает структурную информацию о K-переходах соседей, а также об их характеристиках.

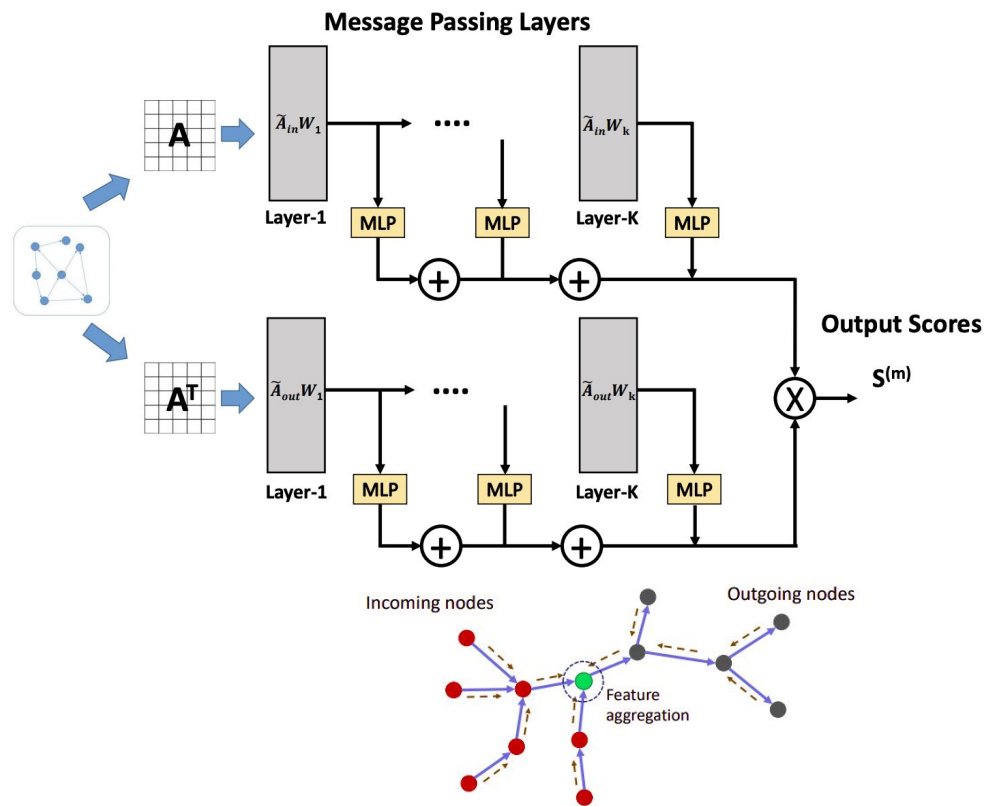
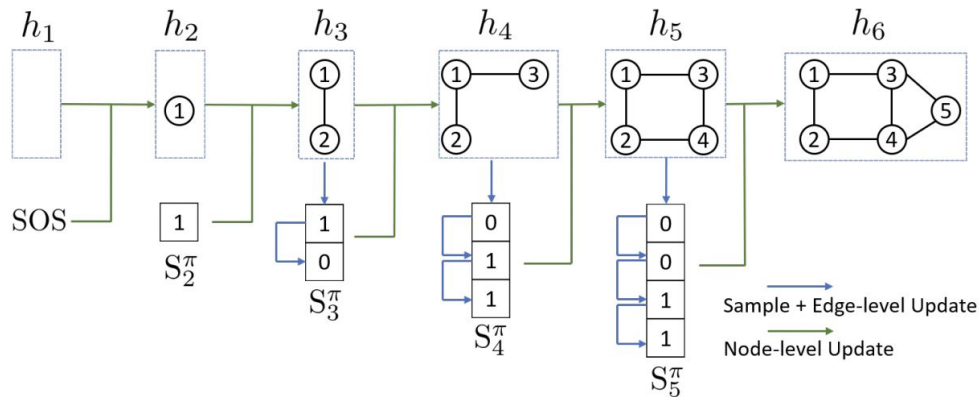


Figure 1: Each node aggregates the features of incoming nodes and outgoing nodes separately

GraphRNN: Generating Realistic Graphs with Deep Auto-regressive Models

- Моделирует граф авторегрессионным способом - как последовательность добавлений новых узлов и ребер.
- Сначала генерирует вершину, а потом для вершины генерирует ребра
- Использует BFS деревья, чтобы проще находить неуникальные графы



Мотивация исследований

- Все больше задач начинают формулировать в графовом представлении
- Растет цифровизация и возможности хранить точные данные (которые часто представляются в виде графов) – что увеличивает число доступных данных
- Молодая область, в которой не так много всего исследовали
- Область, которая близка к дискретной математике, что позволяет обоснованно интерпретировать результаты
- etc