

Les différents domaines d'utilisation ou d'application de réseaux convolutifs de graphe (GCN)

Keroudine Belladjo

TER
Travail d'Étude et de Recherche

May 22, 2022

Table des matières

- 1 Introduction
- 2 Définition et caractéristique des graphes
- 3 Fonctionnement d'un modèle de réseau convolutif de graphe
- 4 Comprendre les réseaux convolutifs de graphes pour la classification des nœuds
- 5 Domaine d'applications des réseaux convolutionnels de graphes (GCN)
- 6 Conclusion

1) Introduction

- Dans cette présentation, nous aborderons l'une des principales approches de deep learning (GCN) pour le traitement des données de graphes : les réseaux convolutifs de graphes. Ce sont des architectures puissantes permettant de résoudre des problèmes d'apprentissage en grandes dimensions. Ils se montrent particulièrement efficaces dans le cadre de l'apprentissage semi-supervisé. Ce dernier est une classe de techniques d'apprentissage automatique qui utilise un ensemble de données étiquetées et non-étiquetées
- Dans cette présentation, nous donnerons tout d'abord un aperçu des réseaux convolutifs de graphes.
- Ensuite, nous catégorisons les réseaux convolutifs de graphes selon les domaines de leurs applications. Pour ce faire nous allons nous appuyer essentiellement sur des articles tels que l'article de Thomas Kipf [3], de Rostyslav Demush [2], et de Si et Tong [8].

2) Définition et caractéristique des graphes

D'après [Cogis and Robert,] La théorie des graphes est une théorie mathématique, qui définit des graphes comme des structures de données :

$$G = (E, V)$$

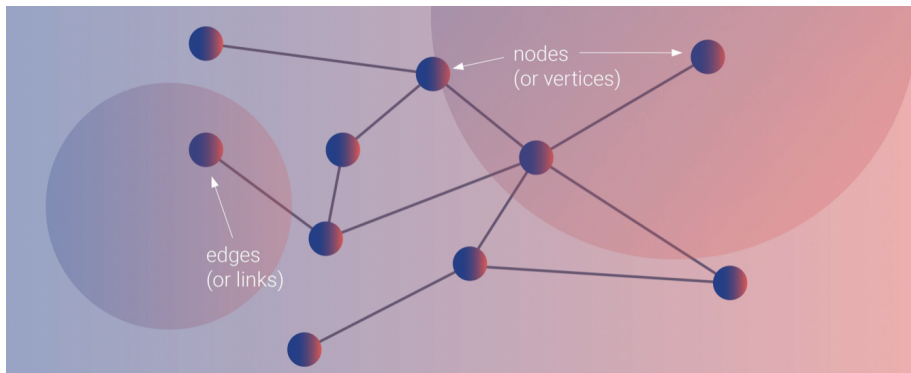


Figure: Représentation d'un graphe [Demush,] : Les arêtes peuvent être dirigées ou non selon qu'il existe ou non des dépendances directionnelles entre les points de données.

2) Définition et caractéristique des graphes

- L'existence de la théorie des graphes est conditionnée par le fait que nous avons besoin d'un moyen informatique et mathématique pour représenter les relations entre les choses.
- Le but de la théorie des graphes pour l'apprentissage automatique en particulier est que la majeure partie de nos données peuvent être mieux comprises lorsque nous pouvons représenter ses relations. [Demush,].

3) Fonctionnement d'un modèle de réseau convolutif de graphe

Plus formellement, un GCN est un réseau de neurones qui fonctionne sur des graphes [Kipf and Welling, 2016a] qui prend en entrée :

- Une matrice $X = N \times D$ appelé matrice des attributs (feature matrix) avec N le nombre de noeud et D nombre d'attributs en entrée
- Une description représentative de la structure du graphe sous forme matricielle ; généralement sous la forme d'une matrice d'adjacence A .

GCN produit une sortie finale au niveau de la dernière couche qui est une matrice Z sous la forme $N \times F$ où N est le nombre de nœuds, F est le nombre d'attributs en sortie par noeud.

3) Fonctionnement d'un modèle de réseau convolutif de graphe

GCN C'est aussi une couche de réseau neuronal qui peut être écrite selon [Kipf and Welling, 2016a] :

$$H^{(l+1)} = f(H^{(l)}, A) \quad (1)$$

- $H^{(0)} = X$
- $H^{(L)} = Z$ qui es les sorties de différents niveaux du graphe
- L est le nombre de couches
- $f(\cdot)$ est une fonction d'activation non linéaire qui détermine la valeur de Z comme $\text{ReLU}(\cdot)$

3) Fonctionnement d'un modèle de réseau convolutif de graphe

La règle de propagation de la convolution graphique d'une couche à l'autre (couche cachée) d'après [Kipf and Welling, 2016a] est :

$$f(H^{(l)}, A) = \sigma(\hat{D}^{-\frac{1}{2}} \hat{A} \hat{D}^{-\frac{1}{2}} H^{(l)} W^{(l)}) \quad (2)$$

- $\hat{A} = A + I$, où I est la matrice d'identité de A .
- \hat{D} est la matrice diagonale du degré des nœuds de \hat{A} .
- $W^{(l)}$ est une matrice de pondération pour la l -ième couche du réseau de neurones.
- A la matrice d'adjacence ou de contiguïté
- σ est la fonction d'activation.

3) Fonctionnement d'un modèle de réseau convolutif de graphe

La figure ci-dessous représente un algorithme de réseau convolutif de graphes multicouches. [Demush,]

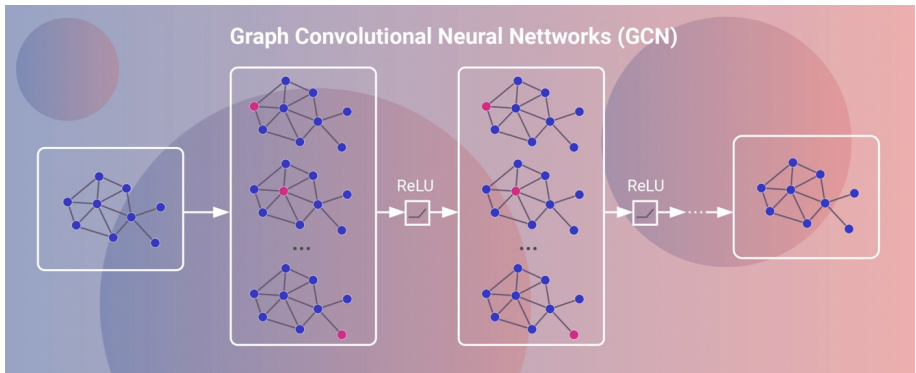


Figure: Réseau convolutif de graphes multicouches (GCN) avec filtres de premier ordre.

4) Comprendre les réseaux convolutifs de graphes pour la classification des nœuds

Dans cette partie inspirée de [Kipf and Welling, 2016b], nous avons expliquer comment effectuer la classification des nœuds à l'aide du module *StellarGraph*. Ce module prend en charge de nombreux algorithmes d'apprentissage automatique (ML) de pointe sur les graphes dont l'algorithme de GCN. On a utilisé l'ensemble de données *Cora* qui est une structure de données de graphe. Cet ensemble de données se compose de publications académiques comme nœuds et les citations entre eux comme arêtes. Pour ce faire nous avons chargé les données à l'aide de Pandas et de scikitlearn. Nous avons ensuite entraîné et évalué le modèle.

4) Comprendre les réseaux convolutifs de graphes pour la classification des nœuds

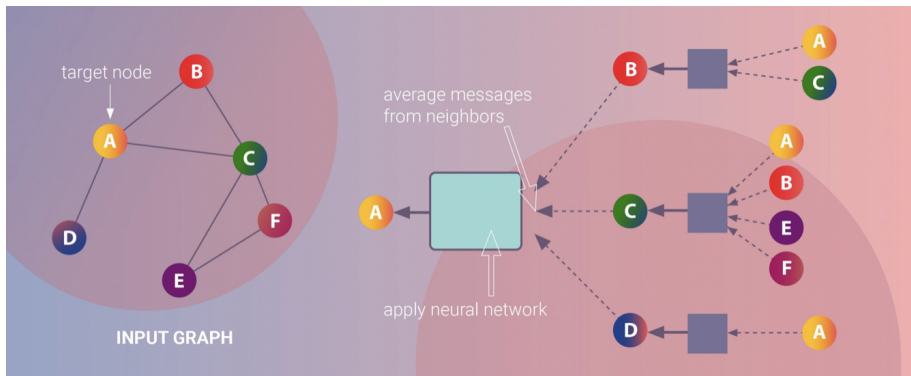


Figure: Étant donné un graphe d'entrée, GCN prédit l'étiquette du nœud cible (le nœud en jaune (A)) en agrégeant les informations des nœuds voisins .

5) Domaine d'applications des réseaux convolutionnels de graphes (GCN)

Les GCN peuvent également être classés en fonction de leurs domaines d'application. Dans cette section, nous introduisons principalement les applications des réseaux convolutifs de graphes dans la vision par ordinateur, le traitement du langage naturel, la science et d'autres domaines.

5) Domaine d'applications des réseaux convolutionnels de graphes (GCN)

1) La vision par ordinateur

les GCN sont appliqués dans la vision par ordinateur. Cette dernière est une technologie d'intelligence artificielle permettant aux ordinateurs de voir de la même façon que les êtres humains.

Les applications des GCN dans la vision par ordinateur en fonction du type de données :

- Image : Les relations visuelles entre les objets aide à caractériser les interactions entre eux, ce qui fait du raisonnement visuel un sujet brûlant en vision par ordinateur.
- Vidéo : L'une des applications à fort impact des vidéos est la reconnaissance d'action qui peut aider à la compréhension de la vidéo.
- Point clouds (Nuage de points): Une représentation géométrique flexible pour de nombreuses applications en vision par ordinateur (PointNet, EdgeConv, FeaStNet)
- Mailles [Zhang et al., 2019]: la correspondance de forme

5) Domaine d'applications des réseaux convolutionnels de graphes (GCN)

2) Le traitement du langage naturel

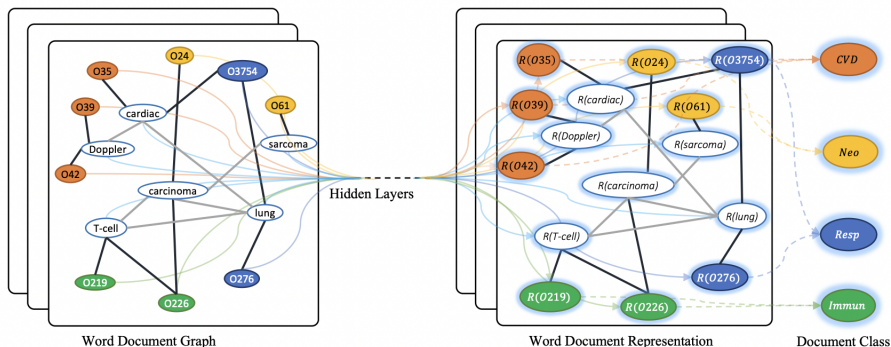


Figure: Schéma du TextGCN [Yao et al., 2019] : La classification de texte est l'un des problèmes les plus classiques du traitement du langage naturel. Avec les documents comme nœuds et les relations de citation entre eux comme arêtes.

5) Domaine d'applications des réseaux convolutionnels de graphes (GCN)

3) Applications en sciences

- Physique

Utilisation des GCN dans la représentation d'objet basée sur un graphe hiérarchique qui décompose un objet en particules et relie les particules au sein d'un même groupe, ou aux ancêtres et descendants.

- Chimie

Une autre application importante en chimie est la prédiction des propriétés moléculaires.

5) Domaine d'applications des réseaux convolutionnels de graphes (GCN)

4) Analyse des réseaux sociaux

- Les GCN ont été largement utilisés pour la recommandation sociale qui vise à tirer parti des interactions utilisateur-élément ou utilisateur-utilisateur pour améliorer les performances de la recommandation.
- les fausses nouvelles peuvent également être détectées par des GCN.

5) Domaine d'applications des réseaux convolutionnels de graphes (GCN)

5) Systèmes de recommandation à l'échelle du Web

PinSage est un algorithme GCN hautement évolutif capable d'apprendre les incorporations de nœuds dans des graphes à l'échelle du Web contenant des milliards d'objets.

6) Conclusion

Les réseaux convolutifs de graphes sont devenus un sujet très passionnant à la fois dans l'apprentissage automatique et dans d'autres domaines connexes, différents modèles de GCN ont été proposés pour résoudre différents problèmes. Dans cette présentation, nous avons fait une revue de littérature pour comprendre le fonctionnement et le domaine d'utilisation ou d'application des réseaux convolutifs de graphes. En somme Les réseaux convolutifs de graphes occupent de nos jours une place très importantes dans notre société , on les retrouve un peu partout en raison de leur puissance significative dans le traitement de données structurées en graphes. Ils sont en particulier très utilisés dans le domaines scientifiques tels que l'informatique, sciences sociales, biologie et physique.

References I



Cogis, O. and Robert, C.

Théories des graphes, Problème, Théorème, Algorithme.

Eyrolles.



Demush, R.

Gentle introduction to graph neural networks and graph convolutional networks.



Kipf, T. N. and Welling, M. (2016a).

Semi-supervised classification with graph convolutional networks.

arXiv preprint arXiv:1609.02907.



Kipf, T. N. and Welling, M. (2016b).

Semi-supervised classification with graph convolutional networks.

CoRR, abs/1609.02907.

References II



Yao, L., Mao, C., and Luo, Y. (2019).

Graph convolutional networks for text classification.

In *Proceedings of the Thirty-Third AAAI Conference on Artificial Intelligence and Thirty-First Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference and Ninth AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence*, AAAI'19/IAAI'19/EAAI'19. AAAI Press.



Zhang, S., Tong, H., Xu, J., and Maciejewski, R. (2019).

Graph convolutional networks: a comprehensive review.

Computational Social Networks, 6(1):11.