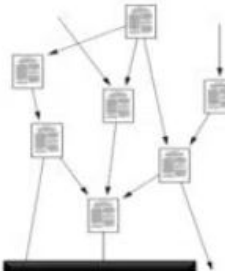


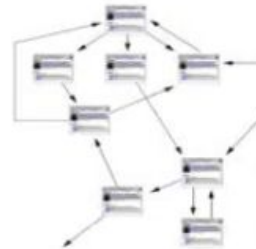
Графові нейронні мережі



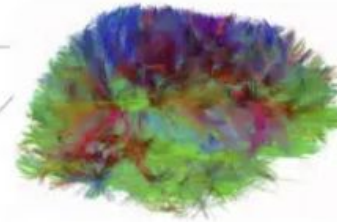
Molecules



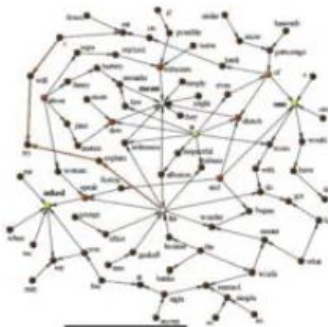
Knowledge



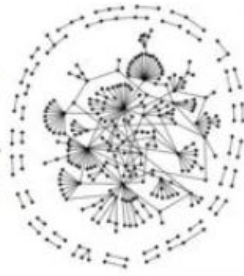
Information



Brain/neurons



Genes



Communication

[illegible]

Software



Social

Сьогодні на лекції

Проблеми
використання
графів



Способи
представлення
графів



Створення мережі

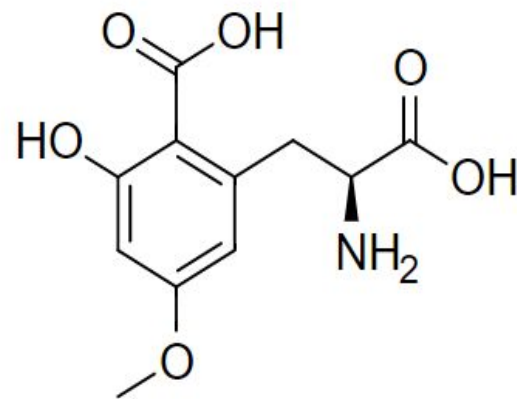
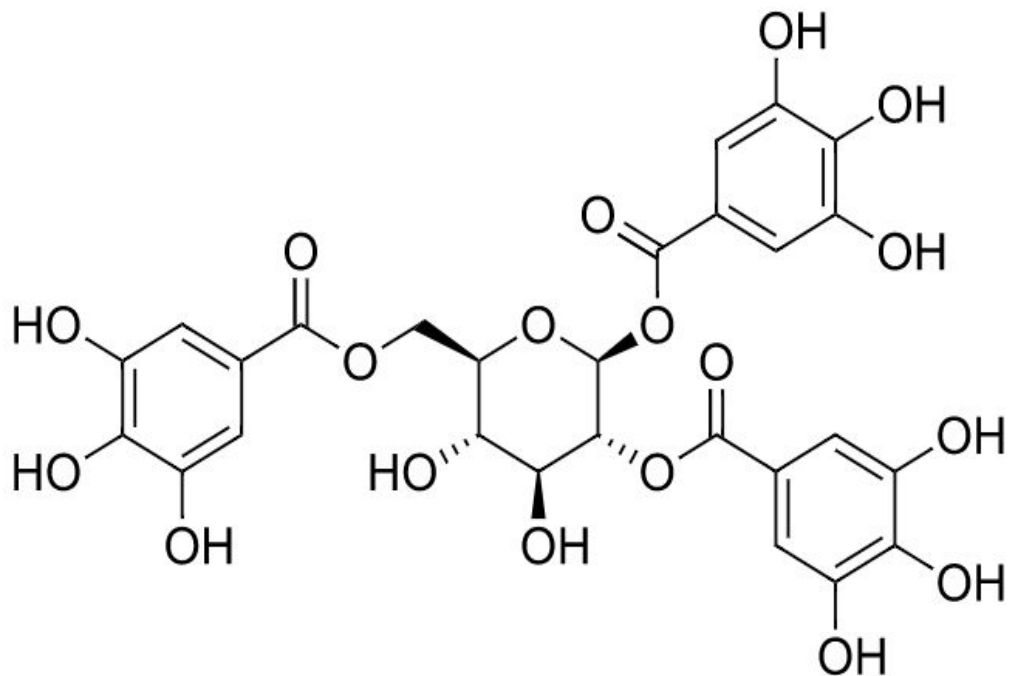


Задачі, які
можна розв'
язати для
графів

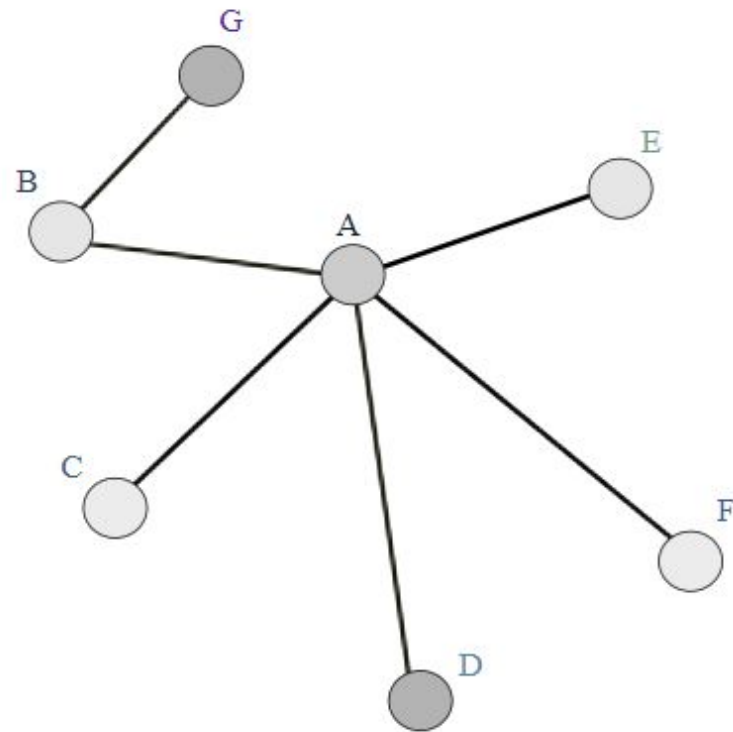
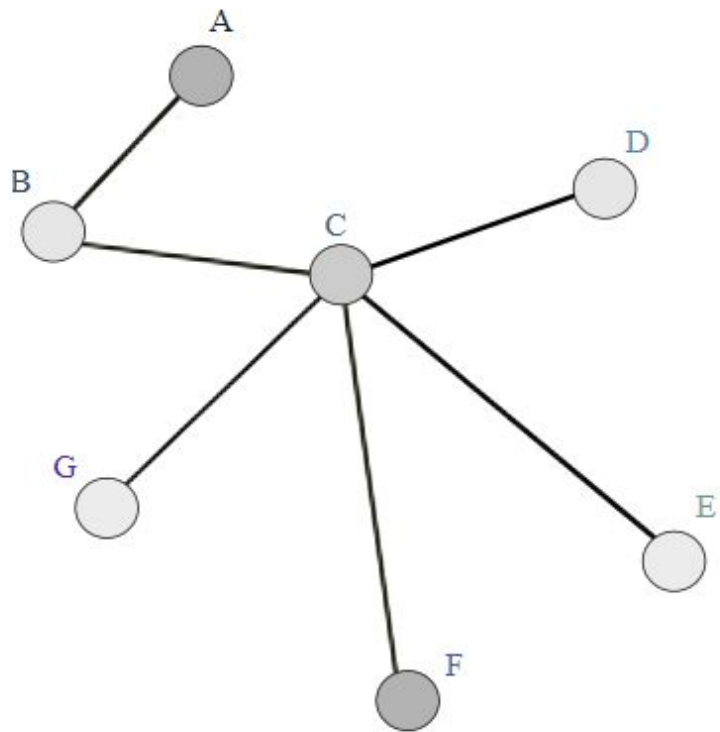


Передача
повідомлень

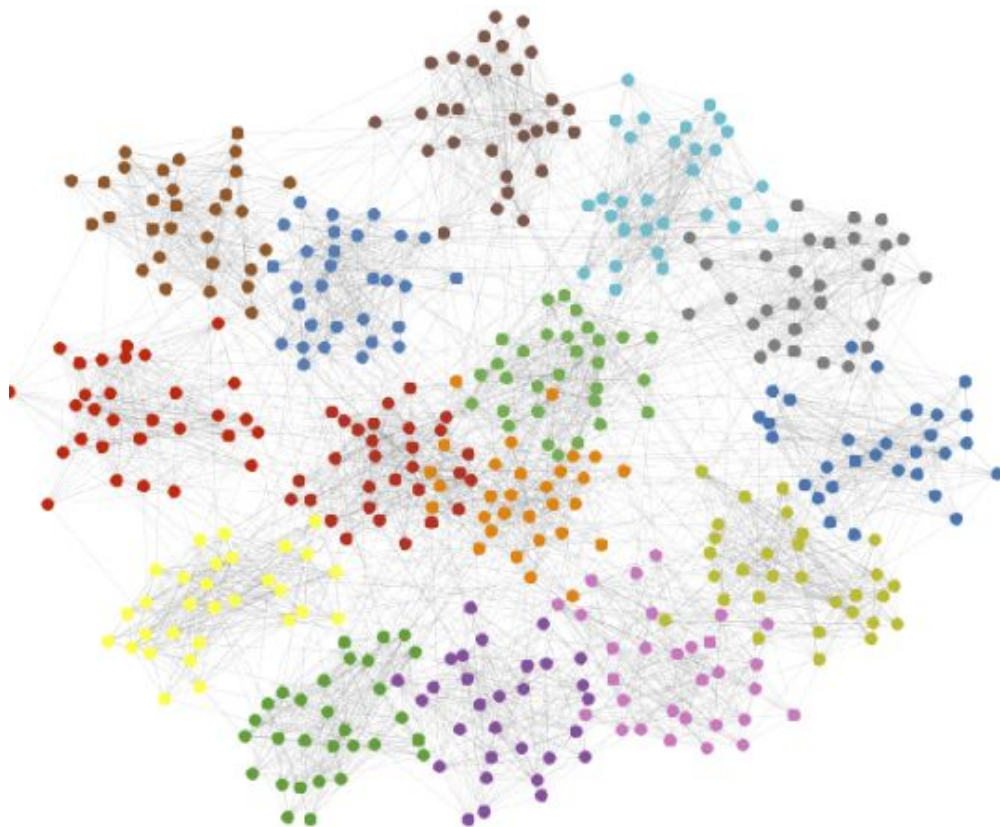
Проблеми обчислень на графах. Відсутність узгодженої структури



Проблеми обчислень на графах. Еквіваріантність порядку вузла

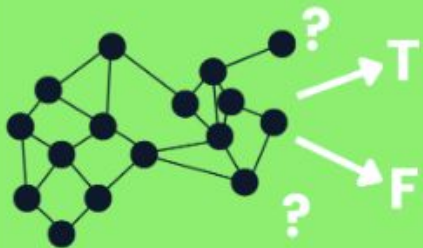


Проблеми обчислень на графах. Масштабованість

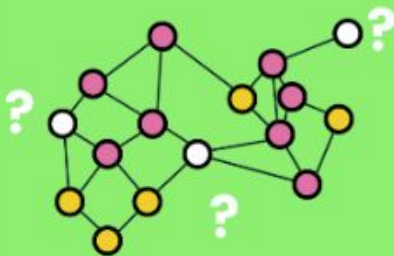


Можливі задачі

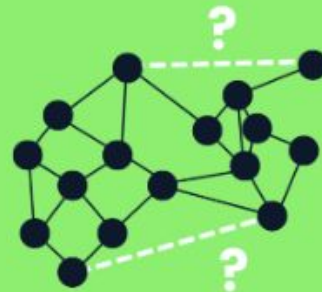
Graph Classification



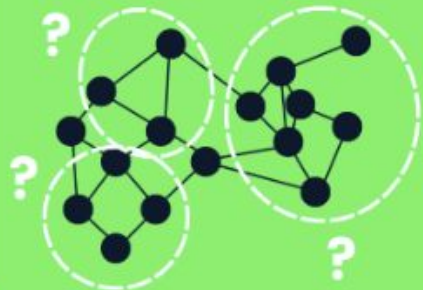
Node Classification



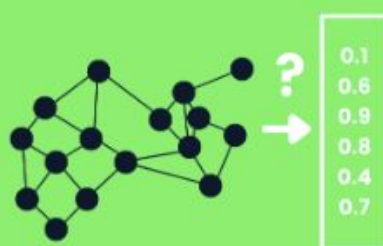
Link Prediction



Community Detection



Graph Embedding

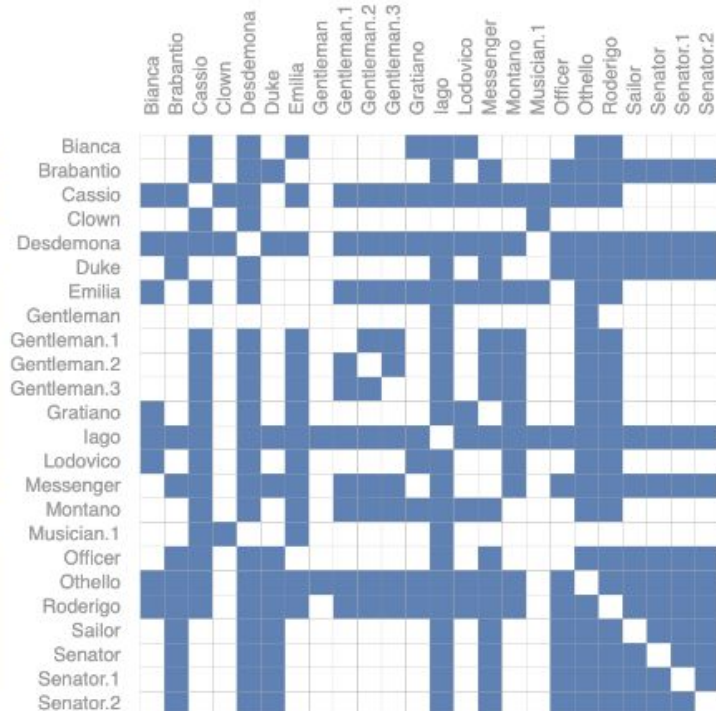


Graph Generation

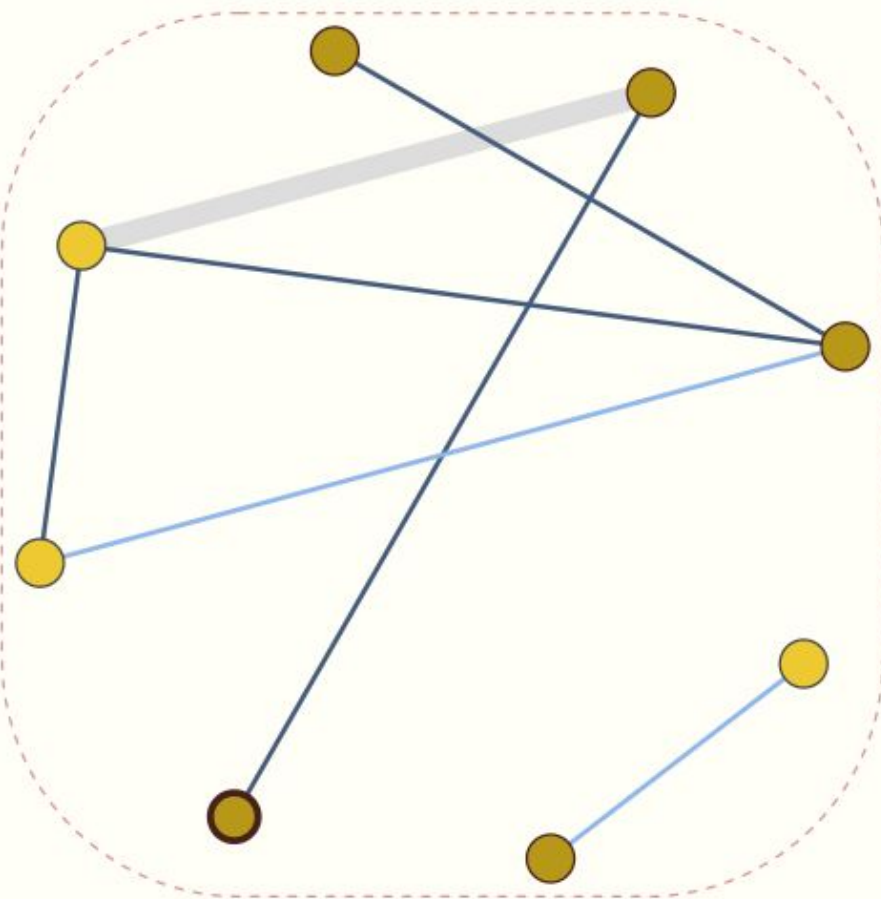


<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>

Матриця суміжності



Дві матриці суміжності, що представляють один і той же граф.



Nodes

[0 , 1 , 1 , 0 , 0 , 1 , 1 , 1]

Edges

[2 , 1 , 1 , 2 , 1 , 1]

Adjacency List

[[1, 0] , [4, 3] , [6, 2] , [7, 3] ,
[7, 4] , [7, 5]]

Global

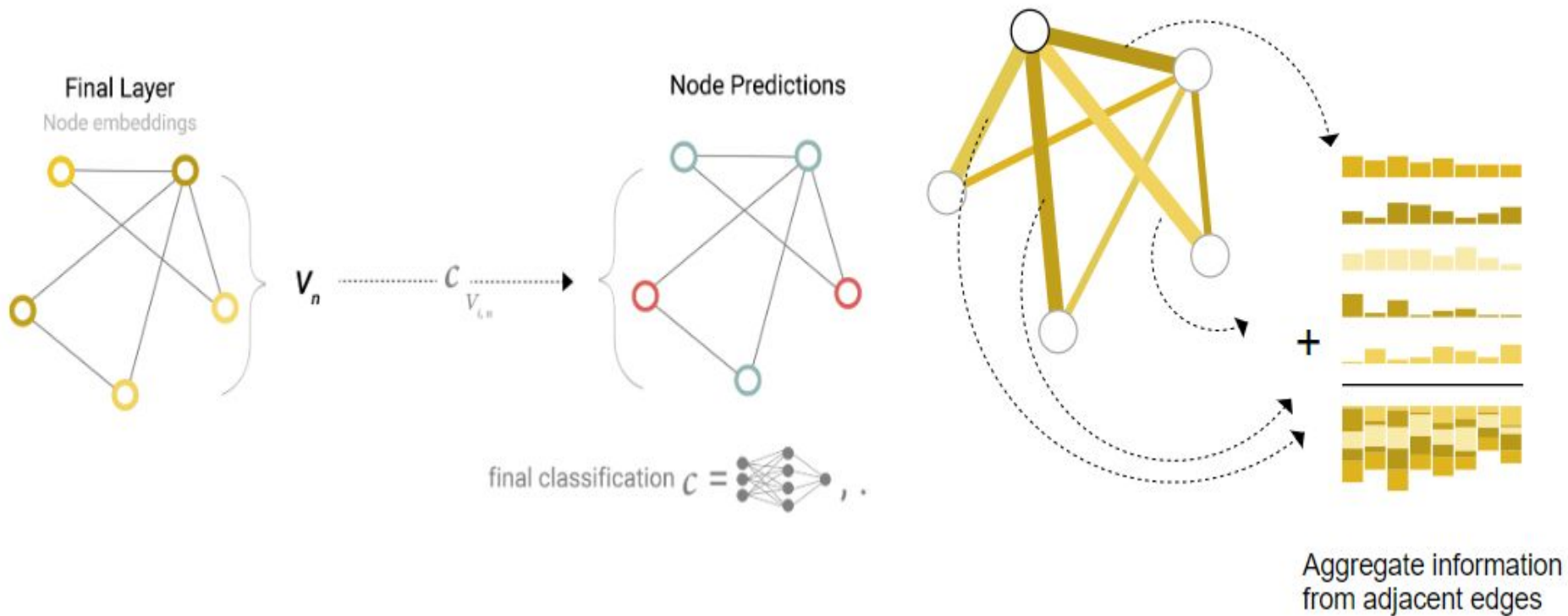
0

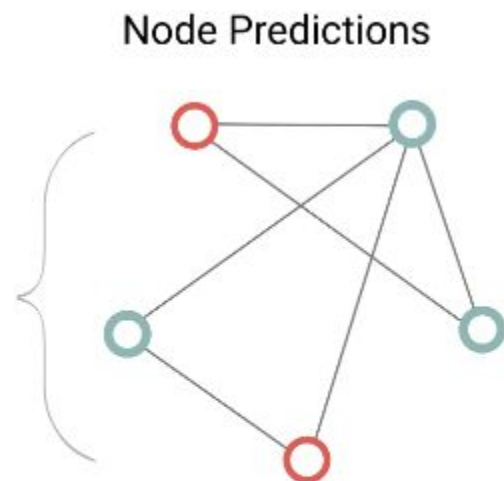
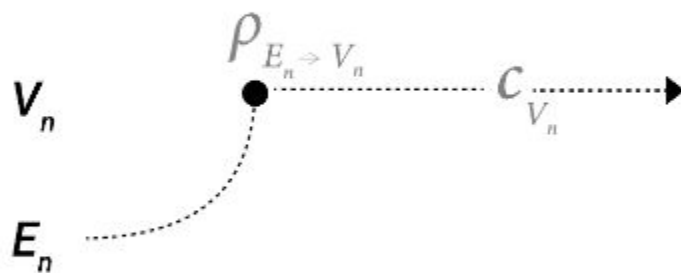
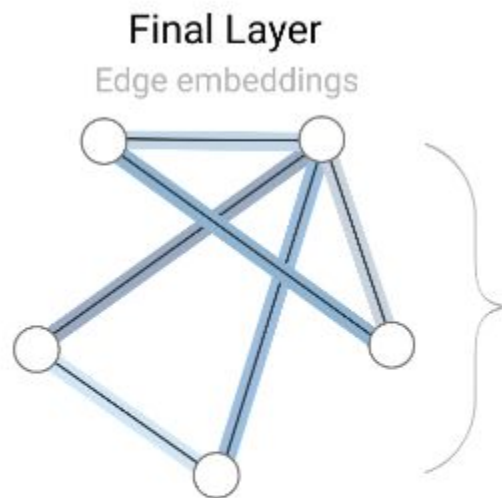



Graph Independent Layer

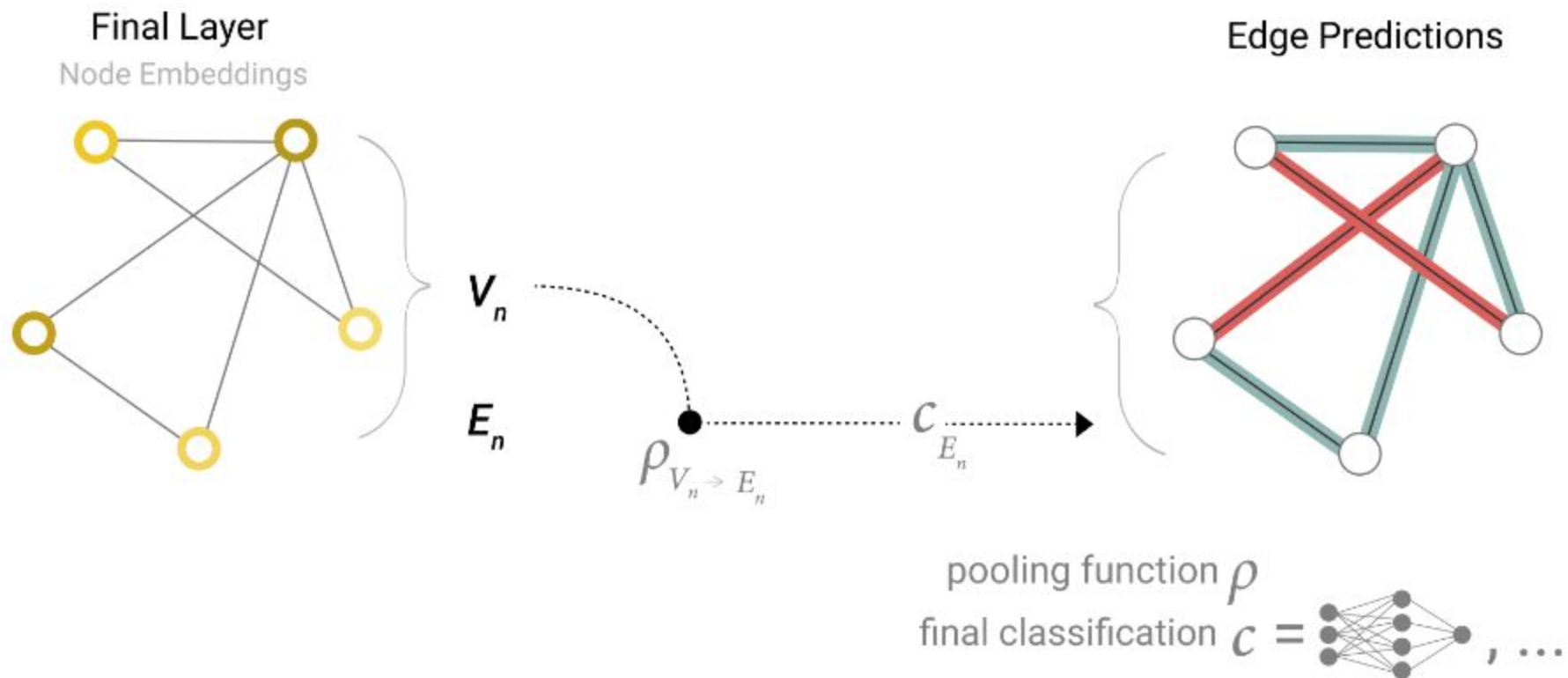
update function $f =$  $, \dots$

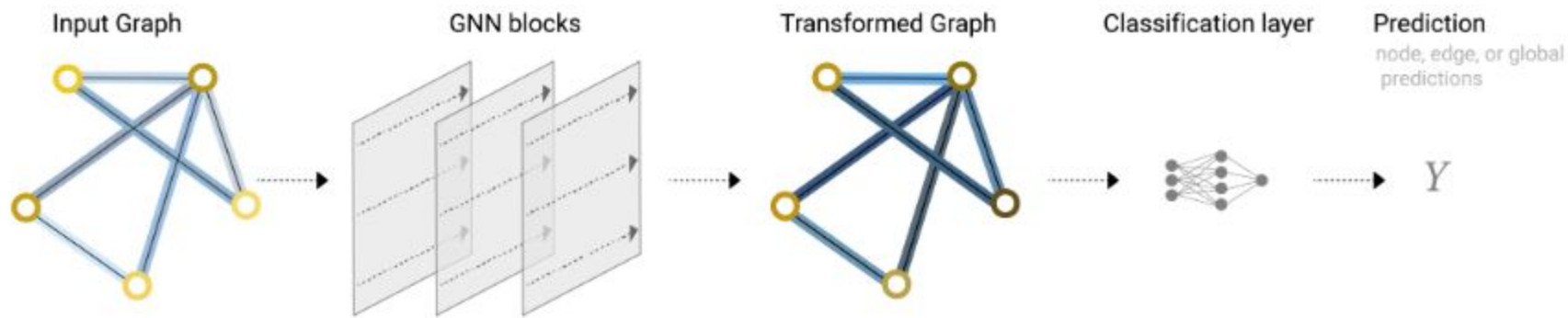
Прогнозування





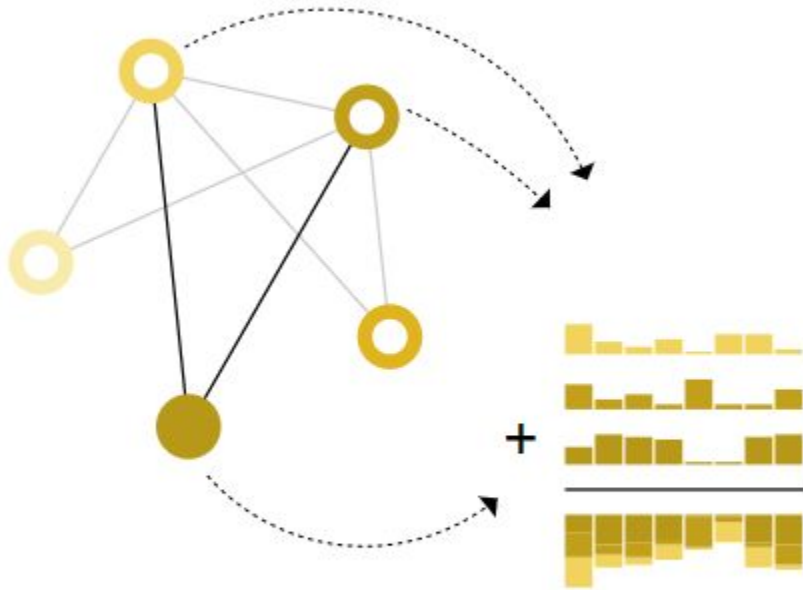
pooling function ρ
final classification $\mathcal{C} =$  , ...





Мережа повідомлень

Layer N

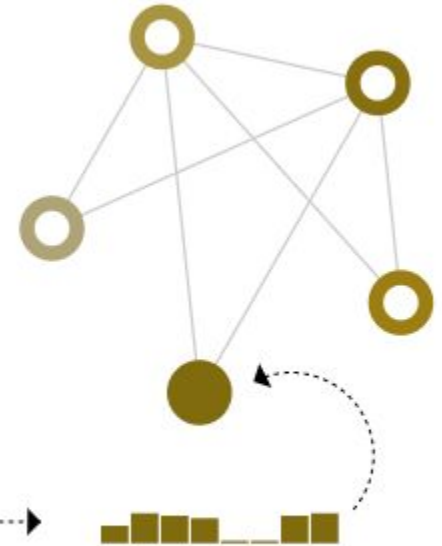


Aggregate information
from adjacent nodes

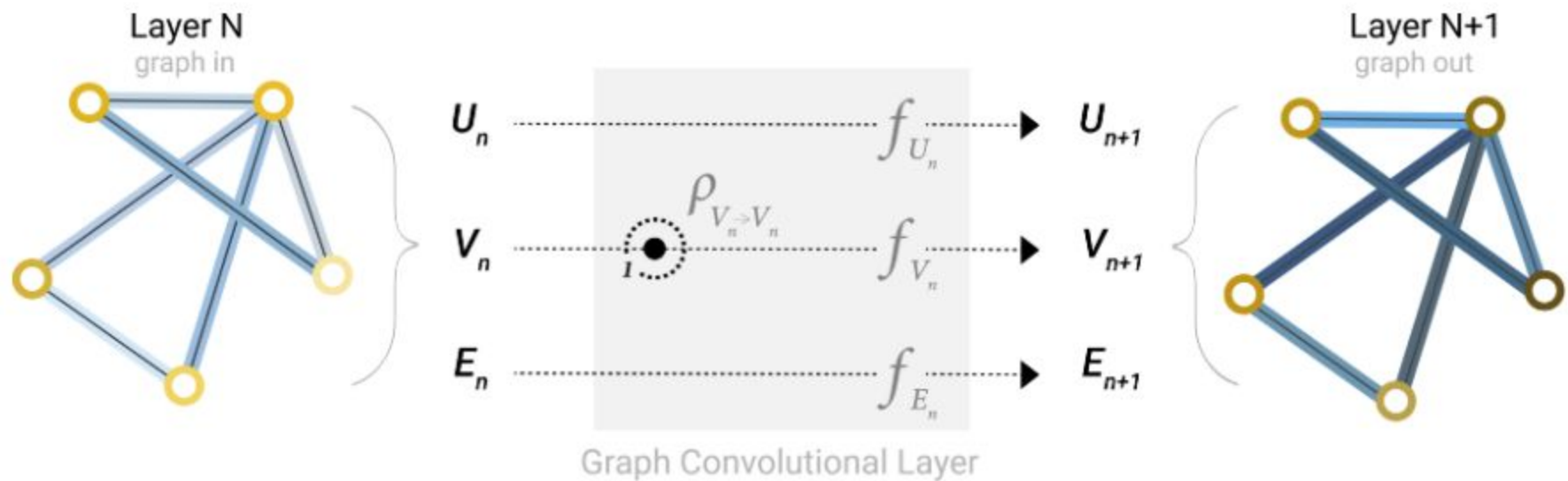
f


Transform
information

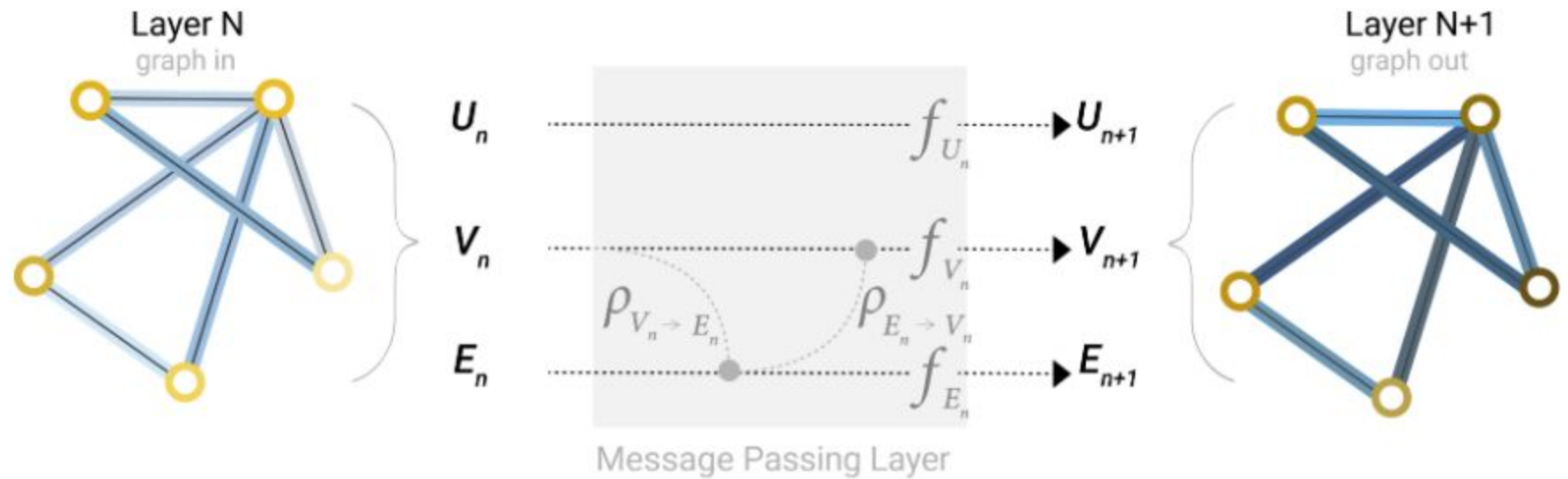
Layer N + 1



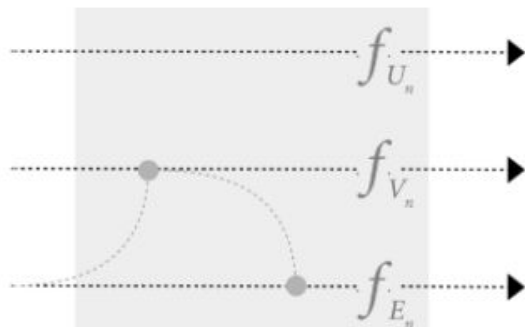
Update graph with
new information



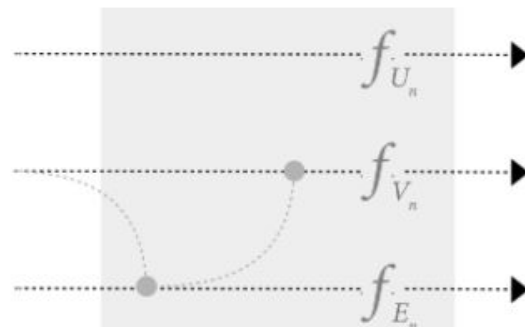
update function $f =$  , ...
 pooling function ρ



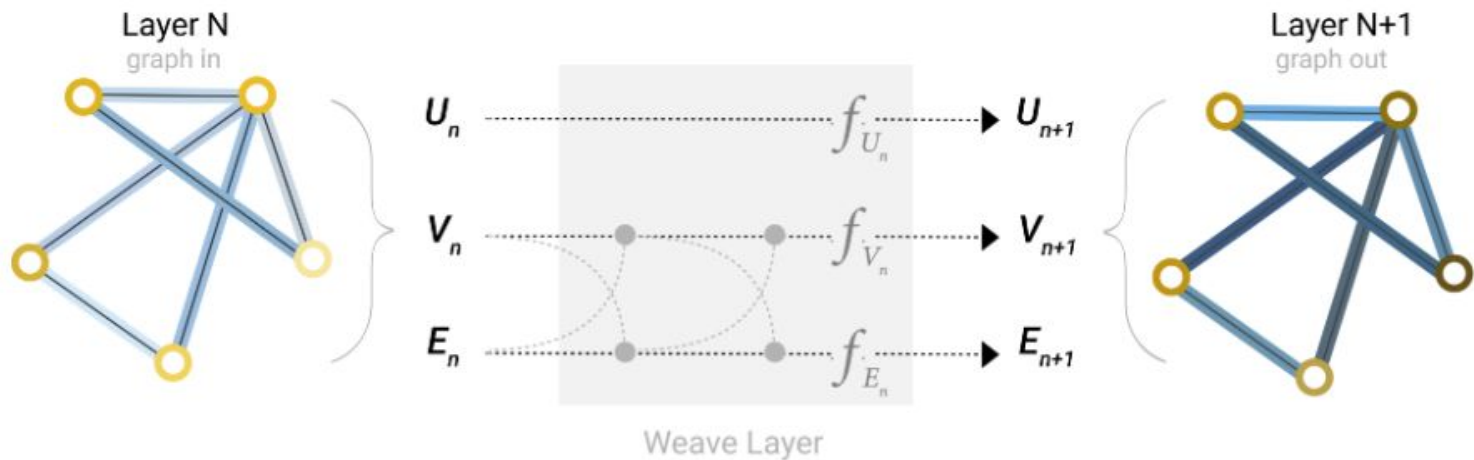
update function $f = \text{[neural network icon]}, \dots$
 pooling function ρ




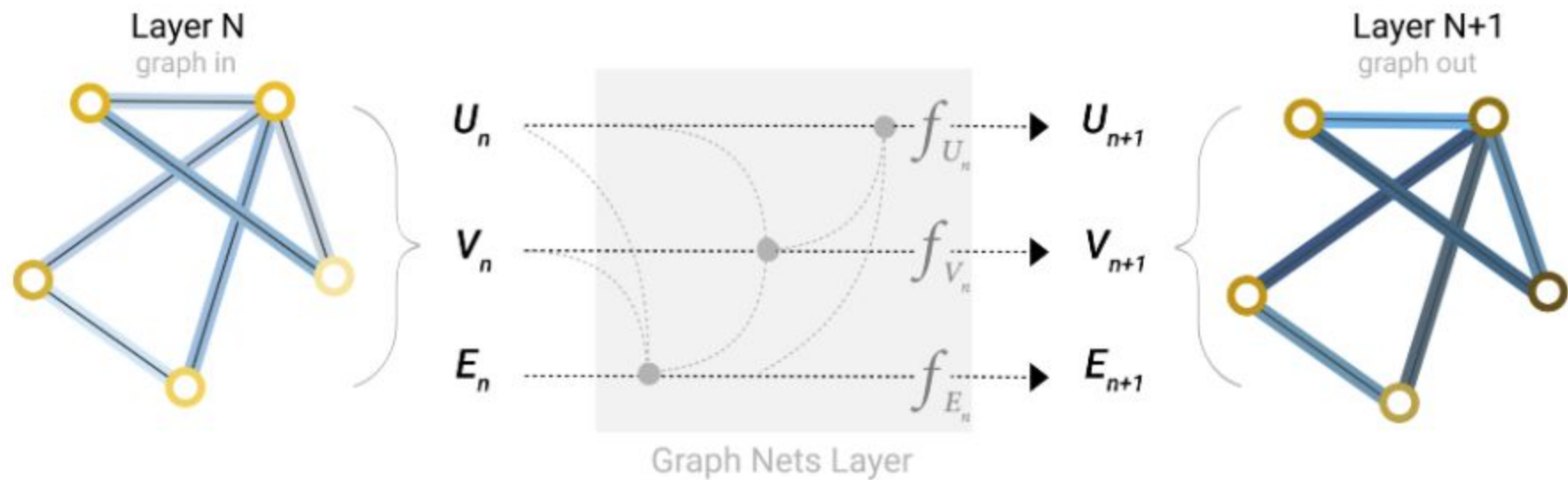
Node Then Edge Learning




Edge Then Node Learning



update function $f =$  , ...
pooling function ρ



update function $f =$ , ...
 pooling function ρ

$$\vec{Z}_G = f\left(\sum_i \vec{h}_i\right) \quad \vec{m}_{31} = f_e(\vec{h}_3, \vec{h}_1, e_{31}) \quad \vec{h}'_i = f_v(h_i, \sum_{j \in N_i} \vec{m}_{ij})$$

.....

