

לילה טוב רבותי, היום אנחנו שוב בפיתנו deepnightlearners שבמסגרתה אני מסקר קצרות מאמרים מעניינים בתחום הלמידה העמוקה.

מבוא: היום אני בחרתי לסקור את המאמר שנקרא: Differentiable Graph Module (DGM) for Graph Convolutional Networks שאחד ממחבריו הינו פרופ' מיכאל ברונשטיין המבריק שאני מרבה לשתף את הפוסטים במדיום:

תחום: רשתות קונוולוציה גרפיות (Graph Convolutional Networks - GCN), למידה של גרפים לטנטיים (Latent Graph Learning - LGN).

הסבר על תחום: GCN הפך בשנים האחרונות כלי מאוד פופולרי לבעיות ML שיש בהן מבנה גרפי אינהרנטי כמו למשל גרף העוקבים בפייסבוק, קשרים בין מולקולות בכימיה וכדומה. ברוב הבעיות גרף הקשרים נתון הבעיה מסתכמת בבניית רשת על הגרף הזה. אבל יש מקרים שגרף הקשרים הזה או לא נתון לנו או שבנייתו מאוד יקרה או לא מדויקת. בשביל בעיות מהסוג הזה קם מיכאל ברונשטיין ושותפיו והמציא תחום הנקרא LGN שמטרתו היא הסקת גרף הקשרים מהדאטה לבעיה בנידון ואז משתמשים בגרף הזה בשביל לפתור את הבעיה ע"י אימון של GCN על הגרף הזה. המאמר הראשון שפתר בעיה מהסוג הזה היה Dynamic Graph CNN שיצא ב-2018 שעסק באנליזה של תכונות סמנטיות (למשל סגמנטציה) בענני נקודות (Point Clouds). הבעיה עם DGCNN היא שבניית הגרף ובניית הפיצ'רים הלטנטיים של הקודקודים התבצעה באותו מרחב (ביחד) שזה לא רצוי כי עלול לחבר את מבנה הגרף ל downstream task שזה לא רצוי. הסיבה שהגרף אמור לייצג את המבנה של המרחב הלטנטי של דאטה שצפוי להיות טוב משימות downstream שונות.

תקציר בשתיים/שלוש שורות: המאמר מציע שיטה של לבנייה של הגרף לדאטה סט כאשר המבנה של הגרף לא ידוע (הקודקודים נתונים אך הקשתות לא) כאשר הייצוג הלטנטי של הקודקודים והקשתות של הגרף נבנות בו זמנית אך במרחבים שונים (מופרדים) שבעצם פותר את הבעיה המתוארת בפסקה הקודמת.

תקציר מאמר: אז איך בעצם בונים את הקשתות של הגרף בהינתן קודקודיו? הרי הקשתות של הגרף זה דבר דיסקרטי ובלתי גזיר. בשביל להתגבר על הבעיה הזו מחליפים את הקשתות בסמיכות ממושקלת, קרי הסתברות הימצאות קשת בין קודקוד i לקודקוד j . ההסתברות הזו מחושבת במרחב שונה מזה שבו חיים הפיצ'רים הלטנטיים: מאמנים מודל (רשת או רשת על גרף אם נתון גרף התחלתי) שמעבירה את הפיצ'רים של הקודקודים למרחב אחר המשמש לייצוג של הגרף. זאת אומרת הפיצ'רים של הקודקודים לאחר מכן להרצה של GCN על הגרף הם לא אותם פיצ'רים המשמשים לבנייה הגרף.

הגרף נבנה בצורה כזו שיהיה נוח לדגום אותו לפי הסתברויות הימצאות הקשתות (סמיכות ממושקלת). הסמיכות הממושקלת של הגרף מחושבת כאקספוננט בחזקת מינוס המרחק האוקלידי בין ייצוג קודקודים במרחב ייצוג הגרף (!!). אחרי שחישבנו את המטריצה הזו הם דוגמים (!! את הגרף בהתבסס על הסתברויות האלו כאשר לגרף הדגום דרגה K (קבועה). בשביל לעשות זאת משתמשים בגומבל טופ- K טריק שמאפשר לדגום מהתפלגות לא מנורמלת שיש לנו כאן לכל קשת. אחרי שלומדים את גרף הסמיכויות בשכבה L מעבירים דרכו את ייצוג הקודקודים בשביל לקבל ייצוג המתאים יותר ל downstream task. הייצוג (הכניסה - לפני המודל) של הקודקוד במרחב ייצוג הגרף לשכבה הבא נבחר כקונקטנציה של הייצוגים בשני המרחבים.

פונקציית לוס: פונקציה הלוס שלהם מורכבת משני מחוברים: הראשון זה קרוס-אנטרופי לוס רגיל על סיווג נכון של דוגמא והשני היא פונקציית לוס על הגרף הבנוי. דרך דגימת קודקודיו של הגרף שנבחרה לא מאפשרת להזרים גרדיאנטים לחלק של הרשת האחראי על בניית הגרף לשום פונקציית לוס על סיווגים המבוססת רק על תכונות הגרף. עקב כך המחברים בחרו פונקציית לוס מתחום למידת החיזוק המקבלת ערב מינימלי על קודקודים שמובילים לסיווג נכון קונסט את אלו שמובילים לסיווג לא נכון (טריק מאוד אלגנטי בעיניי). הפונקציה

הזו גם מטפלת באי-איזון (imbalance) אינהרנטי הקיים בין הקלאסים החיובים והקלאסים השליליים עי" משקול של דוגמאות חיוביות והשליליות לכל קלאס על סמך הדיוק של אותו הקלאס.

הישגי מאמר: מנצחים את SOTA במשימות הבאות:

חיזוי של מחלת אלצהיימר בהינתן צילומי MRI, fMRI, PET

דאטה טאדפול: Tadpole

חיזוי גיל ומין על סמך צילומי MRI, fMRI

דאטה טאדפול: UKbiobank

סגמנטציה בענני נקודות

דאטה טאדפול: ShapeNet

נ.ב. המאמר מאוד מעניין שמציע שיטה לפתרון בעיות מורכבות עם מבנה גרפי אינהרנטי כאשר הטופולוגיה של הגרף לא ידוע. אני מניח שנראה הכללות ושיפורים של השיטה הזו בקרוב

לינק למאמר [paper](#):

לינק לקוד: לא מצאתי

#DeepNightLearners