

סקירה זו היא חלק מפינה קבועה בה אנו סוקרים מאמרים חשובים בתחום ה-ML/DL, וכותבים גרסה פשוטה וברורה יותר שלהם בעברית. במידה ותרצו לקרוא את המאמרים הנוספים שסיכמנו, אתם מוזמנים לבדוק את העמוד שמרכז אותם תחת השם deepnightlearners.

---

לילה טוב חברים, היום אנחנו שוב בפינתנו deepnightlearners עם סקירה של מאמר בתחום הלמידה העמוקה. היום נבחר לסקירה המאמר שנקרא:

## Co-embedding of Nodes and Edges with Graph Neural Networks

**פינת הסוקר:**

**המלצת קריאה מאופיר:** רק אם רוצים לשפר את האינטואיציה בנושא ייצוגי קשתות ברשתות נוירונים גרפיות.

**בהירות קריאה:** בינונית, יש ערבוב רב בין חידושי המאמר לעקרונות קיימים.

**רמת היכרות עם כלים מתמטיים וטכניקות של ML/DL הנדרשים להבנת המאמר:** היכרות עם מושגי יסוד של DL, אלגברה ליניארית ותורת הגרפים.

**יישומים פרקטיים אפשריים:** השימושיות הפרקטית של השיטה במאמר מוטלת בספק.

---

**פרטי מאמר:**

**לינק למאמר:** <https://arxiv.org/abs/2010.13242>

**לינק לקוד:** אין בנמצא, אבל כן מנוקד ב-papers with code-כמוביל במספר בעיות (ללא מימוש).

**פורסם בתאריך:** 25/10/2020

**הוצג בכתב עת:** IEEE TRANSACTIONS ON PATTERN ANALYSIS AND MACHINE INTELLIGENCE  
2020

**תחומי מאמר:**

- רשתות נוירונים גרפיות (GNNs)
- ייצוג קשתות (Edge Embedding)
- למידת ייצוג (Representation Learning)
- קודאי שונות גרפיים (Variational Graph AutoEncoders, VGAEs)

**כלים מתמטיים, טכניקות, מושגים וסימונים:**

- גרף הקשתות (Line Graph)

## לינקים להסברים טובים על מושגי יסוד במאמר:

- [מבוא על רשתות נוירונים גרפיות](#)
- [הסבר על קונבולוציות גרפיות ספקטרליות ומרחביות](#)
- [הסבר אינטואיטיבי על VAEs](#)
- [הסבר על VAEs שכולל חלק על VGAEs](#)

---

## מבוא והסבר כללי על תחום המאמר:

לרובנו מוכרת הדרך הקלאסית לייצוג קשתות בגרפים (בתצורה של מטריצת או רשימת שכנויות), בעזרת ייצוג בינארי של 0 (אין קשת) או 1 (יש קשת). עם זאת, יש סיטואציות רבות בהן נדרש ייצוג רחב יותר לקשת, לדוגמה:

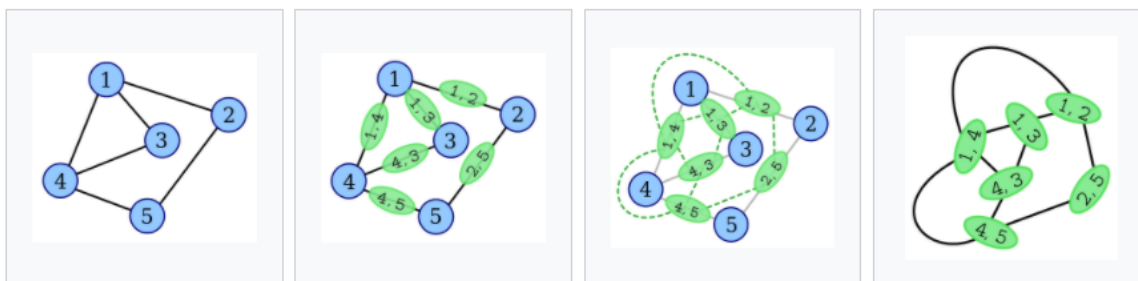
- ברשת חברתית, שתי תכונות של קשת יכולות להיות האם המשתמש הראשון חבר של השני, והאם הוא עוקב אחריו. במקרה כזה התכונות השונות בינאריות.
- בתוך תא, גרף שמתאר קשרים בין חלבונים - עד כמה חלבונים שונים משפיעים על כמות היצירה ועל הפעולה אחד של השני, למשל. במקרה כזה התכונות השונות מספריות.

לפעמים, אנחנו מקבלים רק ייצוג בינארי של הקשתות, אבל אנחנו יודעים שהאינטראקציה (המיוצגת על ידי הקשת) היא בפועל יותר מורכבת מאינטראקציה בינארית. מאמר זה מנסה לתת דרך להגיע לייצוג טוב של אותה אינטראקציה מורכבת יותר.

רשתות נוירונים גרפיות (נקראות גם גיאומטריות, GNNs) הן רשתות נוירונים שפועלות על גרפים. כלומר, על אובייקטים (קודקודים ותכונותיהם) והאינטראקציות ביניהם (קשתות ותכונותיהן). בפעולתן של מרבית ה-GNNs כיום, נוצר מרחב חבוי (latent space) רק עבור הקודקודים, ומאפייני הקשתות נותרים סטטיים. דהיינו, ערכי הקשרים בין הקודקודים השונים בגרף אינם משתנים במהלך ריצת ה-GNN, בניגוד לערכי הקודקודים. קיימות [בעיות שבהן הקשתות משתנות לאורך הזמן](#), אך לא בכך עוסק המאמר.

הכותבים טוענים, נכונה, כי חלק ניכר מהעבודה ביצירת GNNs מוכוון עבור מציאת ייצוג מוצלח לקודקודים, אבל אין מאמץ מקביל לעבוד על ייצוג מוצלח לקשתות, וזה בעצם נושא המאמר - ניסיון למצוא ייצוג טוב יותר לתכונות הקשתות תוך כדי פעולת הרשת.

המושג העיקרי במאמר והתרומה העיקרית שלו הוא השימוש בגרף הקשתות (Line Graph) הנבנה מהגרף המקורי בנוסף לגרף המקורי הנ"ל. גרף הקשתות  $L(G)$  של גרף נתון  $G$  הינו הגרף שמייצג את הקשתות של הגרף המקורי בתור קודקודים כלומר זוג קודקודים מופיע כקודקוד ב- $L(G)$  כאשר יש ביניהם קשת אם יש להן קודקוד משותף. אילוסטרציה מאוד מוצלחת [מוקיפדיה](#):



Graph G

Vertices in  $L(G)$   
constructed from edges in  
G

Added edges in  $L(G)$

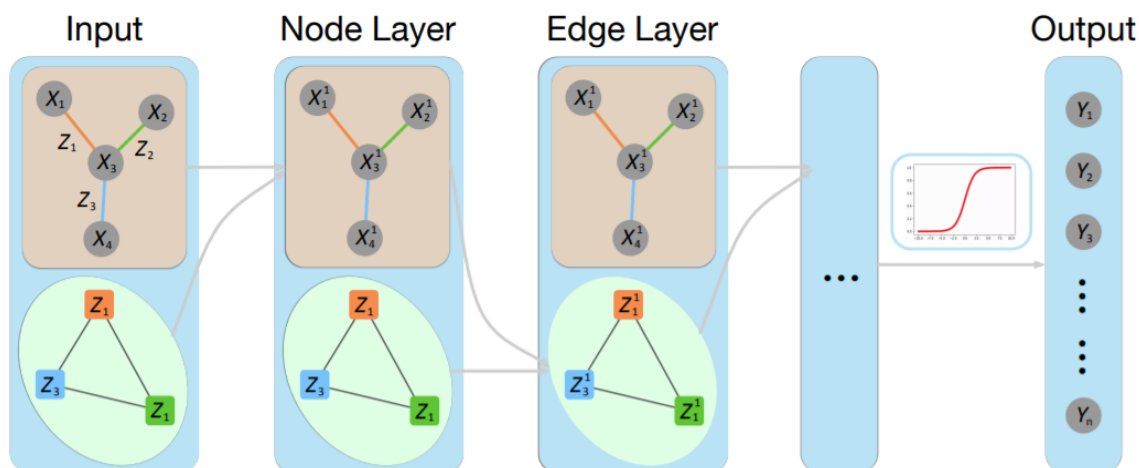
The line graph  $L(G)$

כעת, כשיש לנו את הבסיס להבנת המאמר, הגיע הזמן למאמר עצמו.

### תמצית המאמר:

הארכיטקטורה המוצגת במאמר, CensNet - Convolution with Edge-Node Switching graph neural network, הינה בעלת שני סוגי שכבות:

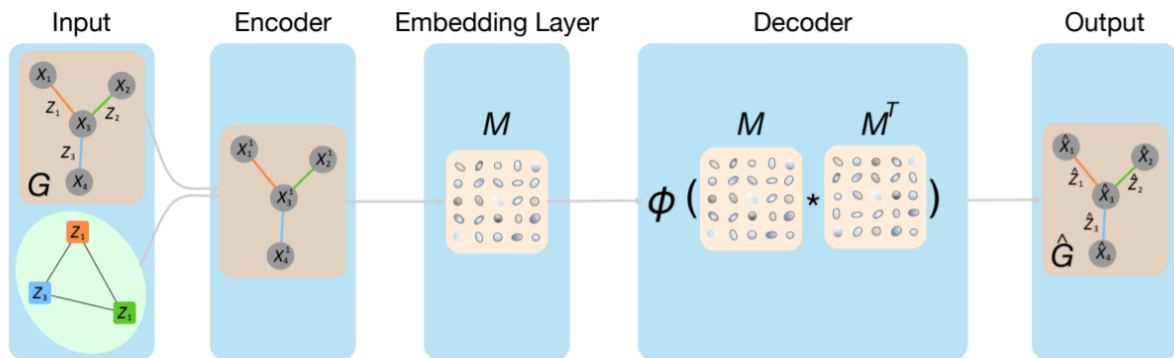
שכבת קשתות	שכבת קודקודים	
גרף הקודקודים	גרף הקשתות	מה הגרף המתעדכן?
הקודקודים בגרף המקור	הקודקודים בגרף הקשתות	מי מהווים את הקודקודים?
הקודקודים בגרף הקשתות	הקודקודים בגרף המקור	מי מהווים את הקשתות?
עדכון תכונות הקודקודים של גרף המקור	עדכון תכונות הקשתות של גרף המקור	מה ההשפעה בפועל?



בצורה כזאת, אפשר להתייחס לתכונות הקשתות בתור תכונות הקודקודים בגרף הקשתות, מה שמקל מאוד על מימוש הארכיטקטורה.

הארכיטקטורה הזו יכולה לשמש למטלות supervised, בין אם על הקודקודים, על הקשתות או על הגרף בכללותו.

הכותבים מציגים ארכיטקטורה נוספת, CensNet-VAE, למטרות semi-supervised כדוגמת ניבוי קשרים בין קודקודים בגרף נתון. ההבדל לעומת ה-VGAE הקלאסי הוא עדכון של הגרף לפני שהוא נכנס למקודד בעזרת שכבת קשת אחת. מצוין במאמר שניסו להוסיף עוד שכבות אך זה לא תרם לביצועים.



ככלל, בהתחשב בצורת התלות ההדדית בין העדכונים של הגרף המקורי וגרף הקשתות, האפקט העיקרי של השיטה הזו נראה איפשהו בין הכפלת עומק הרשת (אם מתייחסים לשכבת קודקודים ושכבת קשתות יחד כשכבה אחת) לבין ייצוג שונה לקשרים שיריים. קשה לראות איך הייצוג הזה עדיף על פני קשרים שיריים סטנדרטיים.

הערה: הארכיטקטורה משתמשת בשיטות עדכון ספקטרליות (משתמשות במבנה הגרף ממטריצת הקשתות באופן כולל), לעומת שיטות מרחביות (spatial) שבה המידע מפעפע מקודקוד אחד לשכניו בכל שלב.

#### דאטאסטים:

- דאטאסטים של קלסיפיקציית קודקודים semi-supervised: שלוש רשתות ציטוטים; Cora, Citeseer, PubMed.
- דאטאסטים של קלסיפיקציית גרפים supervised: מאגר רעילות Tox21 ומאגר חיבת-שומנים (הנטיה של מולקולה להעדיף סביבה שומנים על פני סביבה מימית) Lipophilicity של מולקולות כימיות.

#### הישגי המאמר:

- בקלסיפיקציית הקודקודים לפעמים במקום הראשון, לפעמים לא, אז קשה לקבוע האם השיטה הזו עדיפה על האחרות שנבדקו. כמו כן, ככל שהזמן מתקדם משאבי החישוב משתפרים, וזה גם מוביל לבעיה בהשוואה אם לא מריצים את הארכיטקטורות שמשווים מולן בתנאים זהים.
- בקלסיפיקציית הגרפים מקבלים את התוצאות הטובות ביותר, אבל מושווים לארכיטקטורות ישנות, כאשר החדשה ביניהן היא GCN המקורית מ-2016, אז זה לא מפתיע בכלל שמוצג שיפור, וזה מרתיע שהם לא ניסו להריץ עוד ארכיטקטורות חדשות יותר לשם השוואה.

**נ.ב:** המאמר מכיל הרבה נוסחאות מתמטיות מוכרות ולא רלוונטיות בפועל לחידושי המאמר עצמו, אז אין מה לחשוש מהן. הרגיש כאילו שהיה להם קצת צורך "לעבות את המאמר".