

Graph Neural Networks

David Ricardo Pedraza Silva

August 2021

Un grafo es una estructura definida por dos conjuntos: un conjunto de objetos llamados nodos, y una relación sobre estos nodos, cuyos elementos son llamados vértices. Los grafos pueden ser dirigidos o no serlo.

Los grafos pueden modelar varias propiedades estructurales de sistemas en la vida real. Los nodos pueden ser objetos de cualquier tipo y, por consiguiente, se les pueden asignar las propiedades que uno desee, mientras la estructura del grafo no se vea comprometida. El modo más trivial de hacerlo es pintando los nodos; este acto tan inocente da lugar a infinidad de problemas combinatorios; infinidad de representaciones para infinidad de problemas.

Del mismo modo se pueden aplicar propiedades a las aristas del grafo. Esto es común cuando se quiere asignar un "costo" a recorrer el grafo de un nodo a otro. Tenga en cuenta; las aristas también pueden ser pintadas. En esta presentación sólo nos atañen las propiedades de los nodos.

Un *GNN* es una Red Neuronal que opera en la estructura de grafo. Su uso más usual es la clasificación de nodos. Por si sólo esto no aclara demasiado lo que son las *GNN*, no hasta que notamos que los atributos de cada nodo pueden ser representados con notación vectorial. Ahora podemos establecer características para cada nodo y relacionarlos entre sí.

Comencemos con un ejemplo: esta molécula. Acá los átomos son nodos; los enlaces, aristas. Suponga que queremos averiguar una propiedad sobre esta molécula; su potencial o algo de ese estilo. En este caso los átomos involucrados en la formación de esta molécula importan, pero también la posición de estos átomos, haciendo conveniente esta representación.

Si hablamos de otro tipo de problemas, digamos, reconocimiento de imágenes; cada pixel tiene un número determinado de vecinos, y los pixeles de la imagen pueden ser presentados en un orden particular. No es así en nuestro ejemplo, ni para *GNN* en general, de modo que requerimos de nuevas ideas para abordar este tipo de problemas.

La forma de hacerlo, a grandes rasgos, es aprender de los nodos adyacentes. Esto se hace agregando los nodos adyacentes usando alguna regla, (una idea familiar) para luego actualizar el nodo presente dado este agregado. Es decir; cada nodo aprende de sus vecinos, y esta operación se hace paralelamente para todos los nodos a la vez.

A pesar de ser conveniente para problemas como el del ejemplo, usar *GNN* tiene un costo, varios de hecho. Debido al enorme número de nodos que se usan

en la industria (redes sociales, por ejemplo) la eficiencia y la escalabilidad son desafíos que aún debens ser solucionados. No sólo esto, sino que en el mundo real nuestro grafo cambia constantemente, agregando varias capas adicionales de complejidad.

Un ejemplo del estado del arte para esta técnica se encuentra en la química computacional. Acá hemos visto avances prometedores en el estudio de moléculas sintetizables. El conjunto de moléculas estudiabales en el laboratorio es extremadamente pequeño, pero usando *GNN* es posible estudiar un rango muy superior de moléculas sintetizables; permitiendo así el estudio de nuevas drogas. La esperanza está en el desarrollo de nuevos medicamentos, cuyos posibles efectos secundarios pueden ser predichos con cierta precisión.