Graph Neural Networks (Scarselli, 2009)

Aleksy Barcz

19 maja 2013

Cechy GNN

- Klasyfikator dowolnych grafów (niepozycyjne, cykle)
- Klasyfikacja węzłów i klasyfikacja grafów
- Oparty na FNN
- Proste rozwiązanie problemu cykli

Cel implementacji

- Sprawdzenie działania GNN i identyfikacja kluczowych parametrów
- Utworzenie wygodnego i uniwersalnego środowiska
- Wybrana platforma implementacji : Octave

Format reprezentacji grafu

- *nodes.csv* (etykiety węzłów):
  każdy wiersz $= l_n$; $(|l_n| \geqslant 1)$
- *edges.csv* (etykiety krawędzi $x_u \Rightarrow x_n$):
  każdy wiersz $= id_u, id_n, l_{un}$;
  (id_n : indeks węzła n w pliku nodes.csv)
  (l_{un} : etykieta krawędzi, $|l_{un}| \geqslant 0$)
- *output.csv* (oczekiwane wyjścia węzłów lub grafu):
  każdy wiersz $= o_n$; $(|o_n| \geqslant 1)$
  lub
  pojedynczy wiersz $=$ klasa grafu

Koncepcja GNN

- Pojedyncza sieć dla wszystkich grafów należących do problemu
- Dla każdego węzła automatycznie budowana reprezentacja: $x_n = f(...)$
- Klasyfikacja węzła: $o_n = g(x_n)$
- Dla zagadnienia klasyfikacji grafów, wybieramy wierzchołek reprezentujący graf

Składowe GNN

- Dwie jednostki obliczeniowe : f_w i g_w
- Wszystkie instancje f_w współdzielą wagi
- Wszystkie instancje g_w współdzielą wagi
- Instancje f_w połączone w metasieć odwzorowującą połączenia w grafie

Składowe GNN - grafy niepozycyjne

- Stan węzła:
  $x_n = f_w(...) = \sum_{u:u \Rightarrow n} h_w(l_n, l_{nu}, x_u)$
- Wyjście węzła:
  $o_n = g_w(x_n)$

- h_w : FNN
  (wejścia, warstwa ukryta *tanh*, warstwa wyjściowa *tanh*)
- g_w : FNN
  (wejścia, warstwa ukryta *tanh*, warstwa wyjściowa dowolna)

Postać globalna

- $X = x_1, x_2, .., x_m$: stan - reprezentacja wszystkich węzłów grafu, zbudowana przez F_w
- $F_w(X)$: globalna funkcja przejścia, $F_w(X) = X$
- F_w jest kontrakcją, a wyznaczany X - jej punktem stałym
- $G_w(X)$: globalna funkcja wyjścia

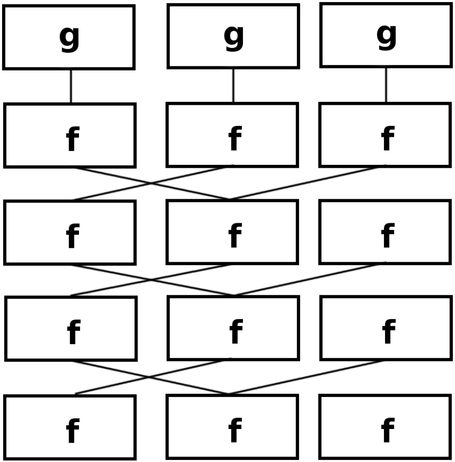
Własności F_w (tw. Banacha)

- kontrakcja : $||F_w(X_1) - F_w(X_2)|| \leqslant ||X_1 - X_2||$
- posiada dokładnie jeden punkt stały
- zbieżność F_w niezależna od punktu początkowego
- zbieżność wykładnicza - potrzebna bardzo mała ilość powtórzeń (ok. 5 do 15)
- jak zapewnić by F_w była kontrakcją?

Schemat działania

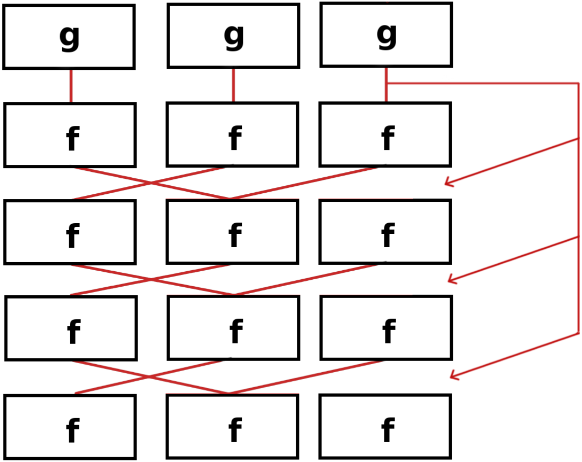
1. Losowa inicjalizacja stanu X
2. do osiągnięcia kryterium stopu:
   - FORWARD : obliczenie $X = F_w(X)$ aż do osiągnięcia punktu stałego
   - BACKWARD : obliczenie $G_w(X)$ i propagacja wsteczna błędu
   - aktualizacja wag f_w i g_w

Forward - budowanie stanu



- BPTT
- *minStateDiff*

Backward - propagacja wsteczna błędu



- Almeida-Pineda
  minErrorDiff
- Kara za brak kontrakcji
  contracionConstant
- RPROP
  deltaMax

Zbiór danych

- Wykrywanie podgrafu
- Podobny do zbioru Scarselli
- 6 węzłów, 3 węzły podgrafu, $p_{edge} = 0.8$ (zamiast 0.2)
- Etykiety węzłów 0..10
- Szum Gaussowski średnia=0 std=0.25
- 20 grafów

Parametry modelu - stałe

FNN - zgodne z zaleceniami:

- liczba neuronów ukrytych h_w : 5
- liczba neuronów ukrytych g_w : 5
- rozmiar stanu x_n : 5

RPROP - zgodne z zaleceniami:

- *initialDelta* : 0.1
- *minDelta* : 10e-6
- *maxDelta* : 1.0 (zalecana wartość alternatywna)
- $factor+$: 1.2
- $factor-$: 0.5

Parametry modelu - modyfikowane

Zależne od problemu:

- *minStateDiff* : 10e-8 .. 10e-5
- *minErrorDiff* : jw.
- *contractionConstant* : 0.5 .. 1.2

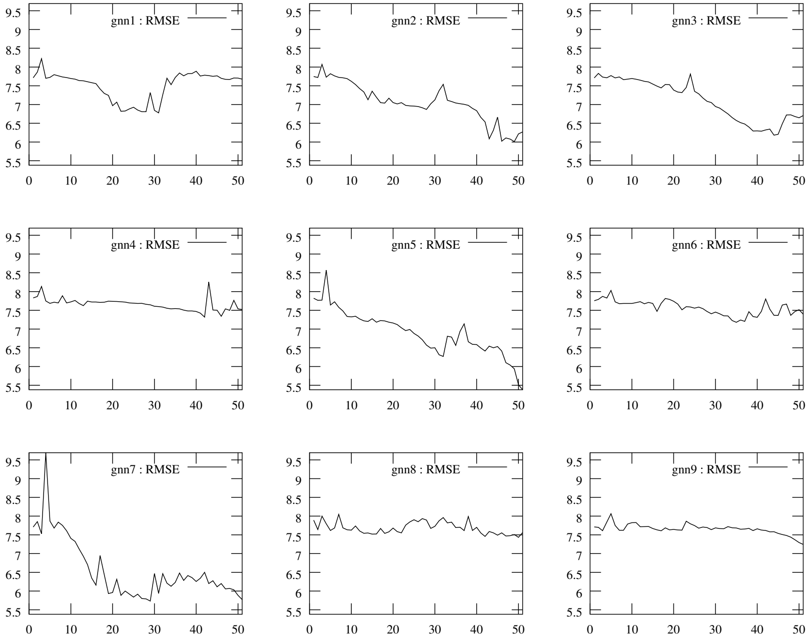
Eksperymenty

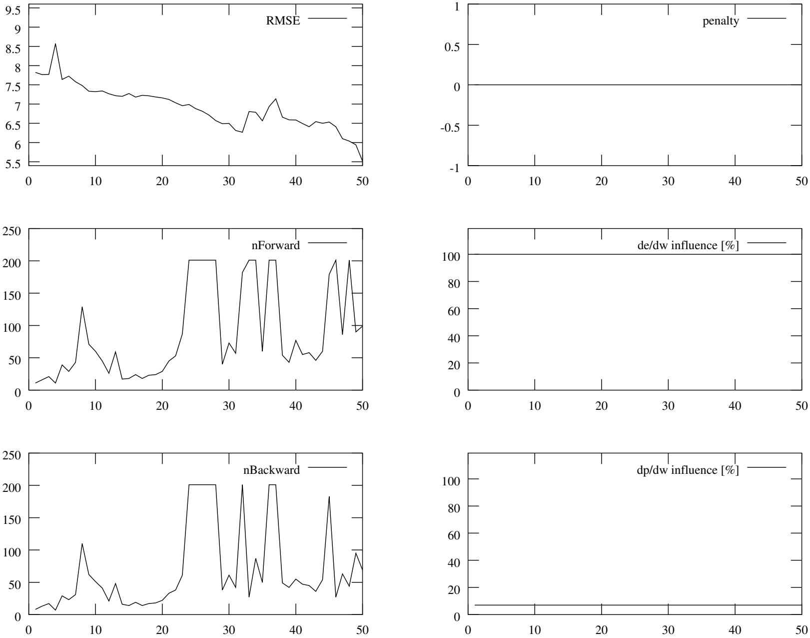
Legenda:

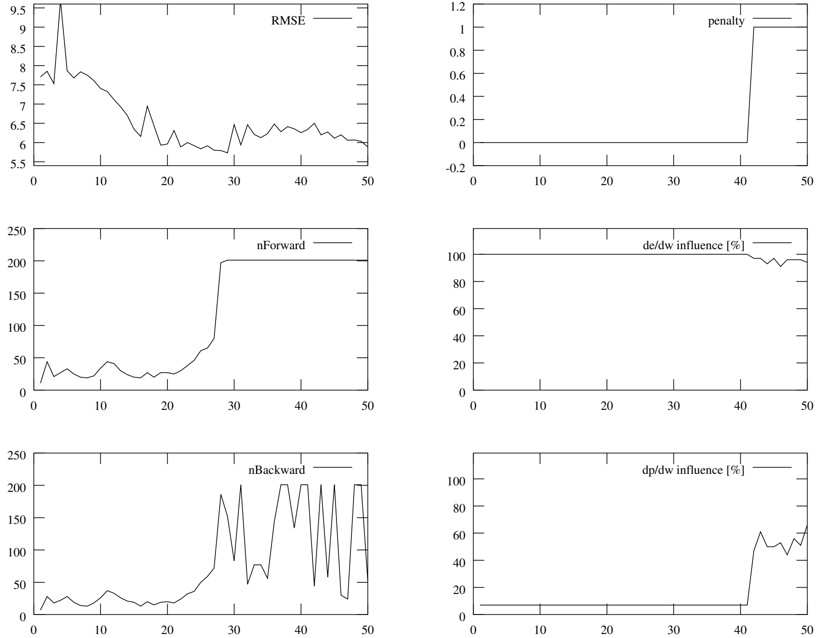
- *nForward* : ilość kroków procedury budowania stanu (przerywana po przekroczeniu 200)
- *nBackward* : ilość kroków akumulacji błędu (Almeida-Pineda, przerywane po przekroczeniu 200)
- *penalty* : czy na którąkolwiek z wag została nałożona kara kontrakcji?
- *de/dw influence* : procent korekt wag zgodnych znakiem z gradientem błędu
- *dp/dw influence* : procent korekt wag zgodnych znakiem z pochodną kary kontrakcji

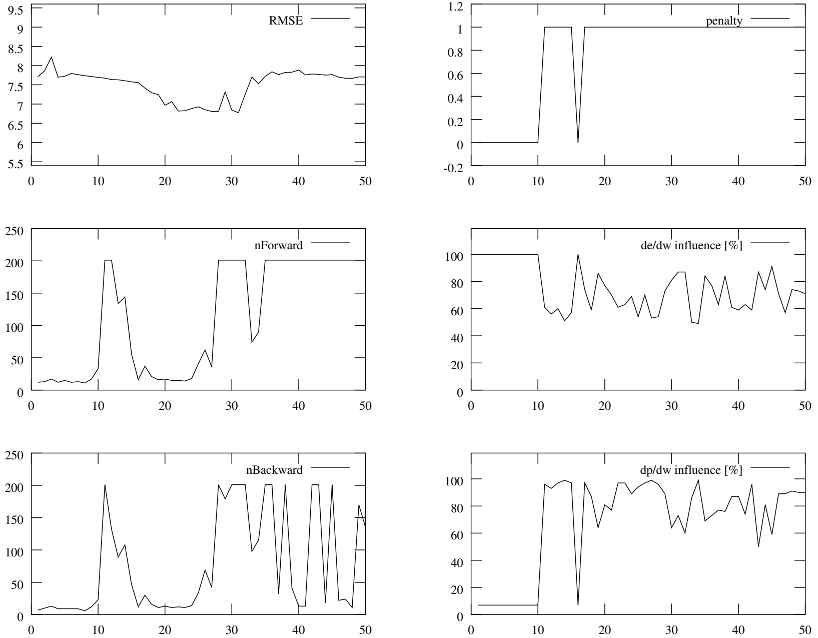
Eksperyment 1 : wpływ początkowych wartości wag

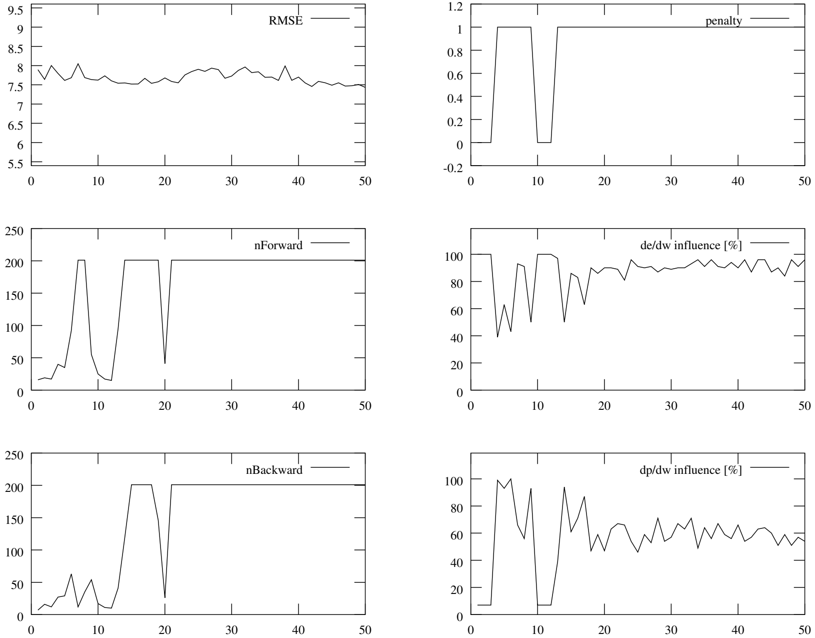
- 10 grafów
- 9 sieci GNN o losowych wagach
- $contractionConstant = 0.9$
- $minStateDiff = 10\text{e-}08$
- $minErrorDiff = minStateDiff$


gnn1 : RMSE
gnn2 : RMSE
gnn3 : RMSE
gnn4 : RMSE
gnn5 : RMSE
gnn6 : RMSE
gnn7 : RMSE
gnn8 : RMSE
gnn9 : RMSE


RMSE
9.5
9
8.5
8
7.5
7
6.5
6
5.5
0 10 20 30 40 50
penalty
1
0.5
0
-0.5
-1
0 10 20 30 40 50
nForward
250
200
150
100
50
0
0 10 20 30 40 50
de/dw influence [%]
100
80
60
40
20
0
0 10 20 30 40 50
nBackward
250
200
150
100
50
0
0 10 20 30 40 50
dp/dw influence [%]
100
80
60
40
20
0
0 10 20 30 40 50

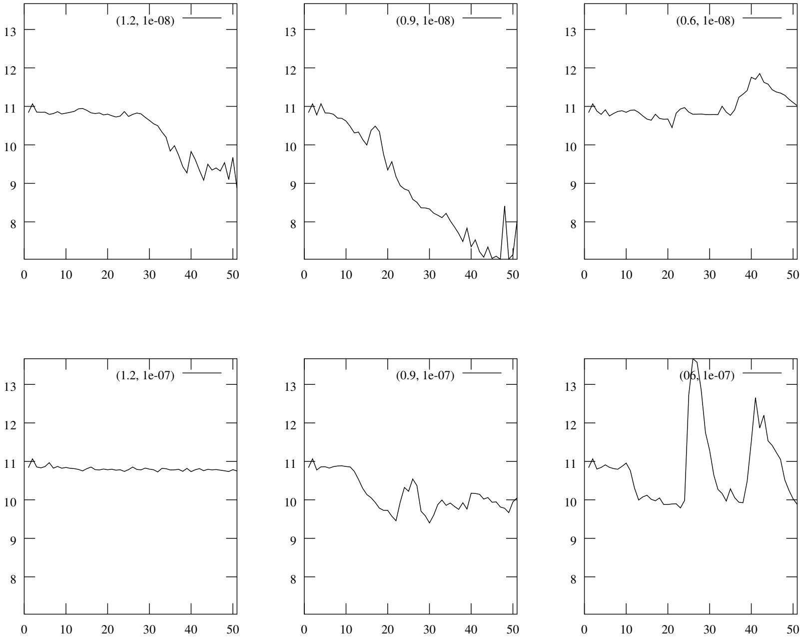

RMSE
penalty
nForward
de/dw influence [%]
nBackward
dp/dw influence [%]

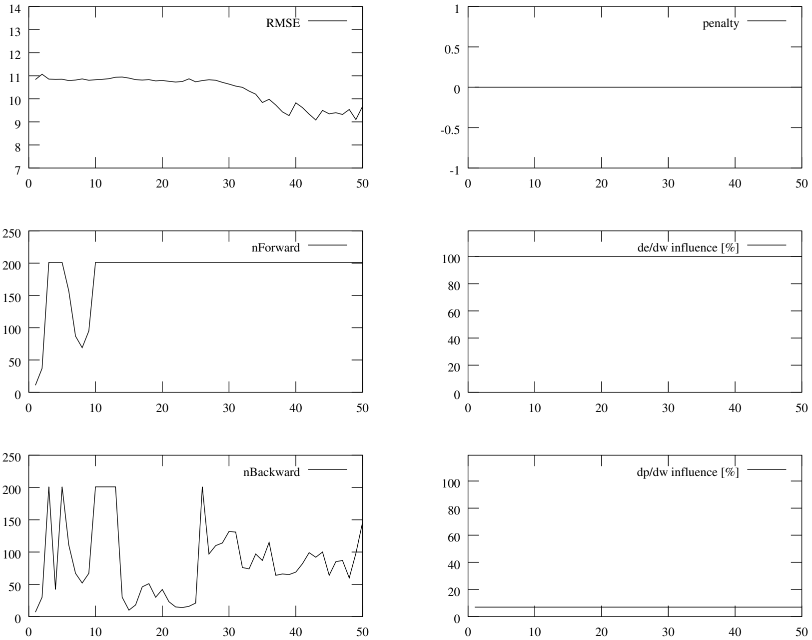

RMSE
9.5
9
8.5
8
7.5
7
6.5
6
5.5
penalty
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
nForward
250
200
150
100
50
0
de/dw influence [%]
100
80
60
40
20
0
nBackward
250
200
150
100
50
0
dp/dw influence [%]
100
80
60
40
20
0
0
10
20
30
40
50

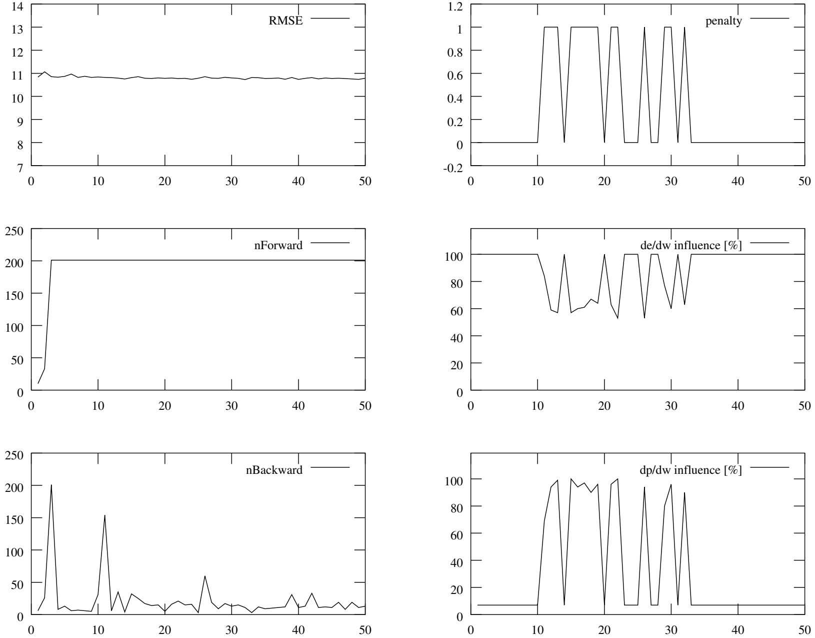

RMSE
penalty
nForward
de/dw influence [%]
nBackward
dp/dw influence [%]
0
10
20
30
40
50

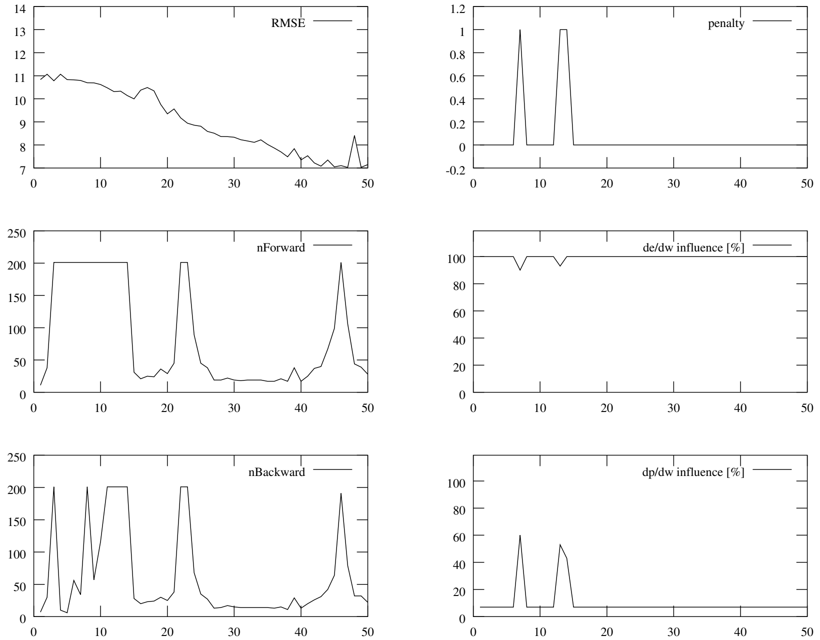
Eksperyment 2 : wpływ parametrów GNN

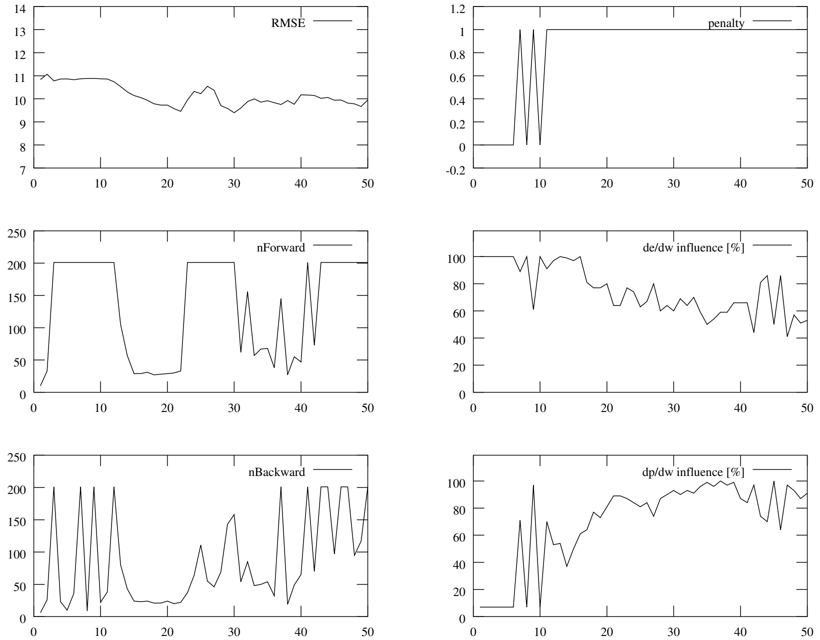
- 20 grafów
- jeden zestaw początkowych wartości wag
- *contractionConstant* = 1.2, 0.9, 0.6
- *minStateDiff* = 10e-08, 10e-07
- *minErrorDiff* = *minStateDiff*
- wybrana sieć nr 7 z poprzedniego eksperymentu

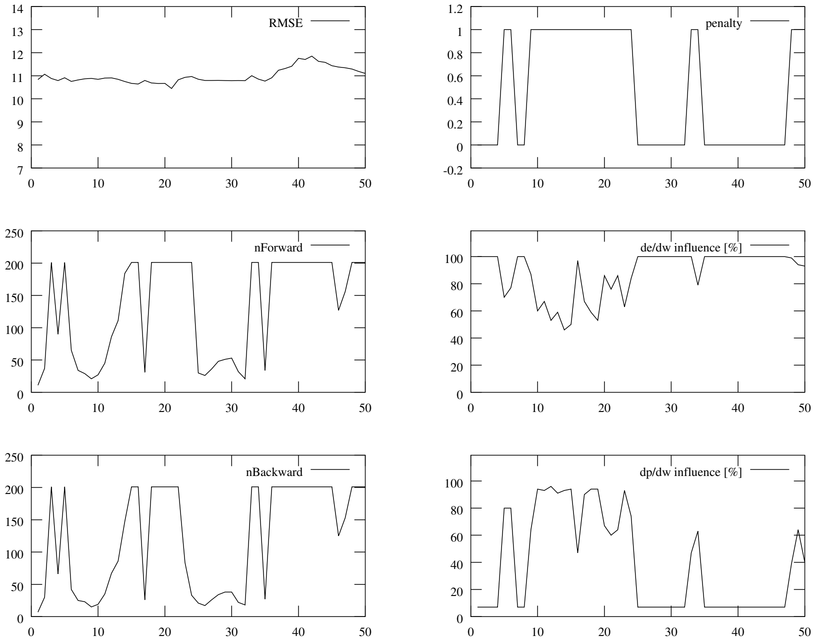

(1.2, 1e-08)
(0.9, 1e-08)
(0.6, 1e-08)
(1.2, 1e-07)
(0.9, 1e-07)
(0.6, 1e-07)

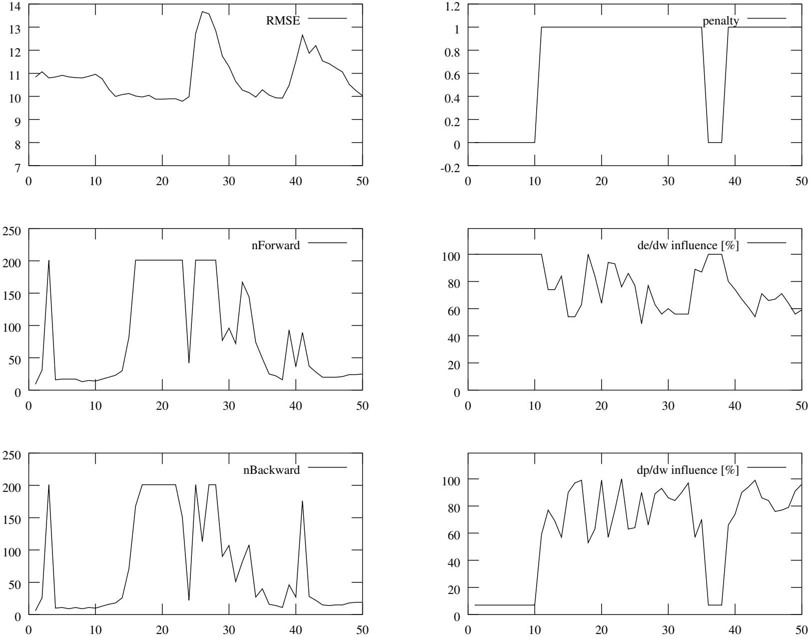

RMSE
14
13
12
11
10
9
8
7
penalty
1
0.5
0
-0.5
-1
nForward
250
200
150
100
50
0
de/dw influence [%]
100
80
60
40
20
0
nBackward
250
200
150
100
50
0
dp/dw influence [%]
100
80
60
40
20
0
0
10
20
30
40
50


RMSE
14 13 12 11 10 9 8 7
0 10 20 30 40 50
penalty
1.2 1 0.8 0.6 0.4 0.2 0 -0.2
0 10 20 30 40 50
nForward
250 200 150 100 50 0
0 10 20 30 40 50
de/dw influence [%]
100 80 60 40 20 0
0 10 20 30 40 50
nBackward
250 200 150 100 50 0
0 10 20 30 40 50
dp/dw influence [%]
100 80 60 40 20 0
0 10 20 30 40 50


RMSE
penalty
nForward
de/dw influence [%]
nBackward
dp/dw influence [%]


RMSE
penalty
nForward
de/dw influence [%]
nBackward
dp/dw influence [%]


RMSE
penalty
nForward
de/dw influence [%]
nBackward
dp/dw influence [%]
0
10
20
30
40
50


RMSE
penalty
nForward
de/dw influence [%]
nBackward
dp/dw influence [%]

Klasyfikacja węzłów - wyniki

	accuracy	precision	recall
TR - średnia	79%	83%	79%
TR - std	8%	4%	14%
TST - średnia	75%	76%	81%
TST - std	8%	10%	14%

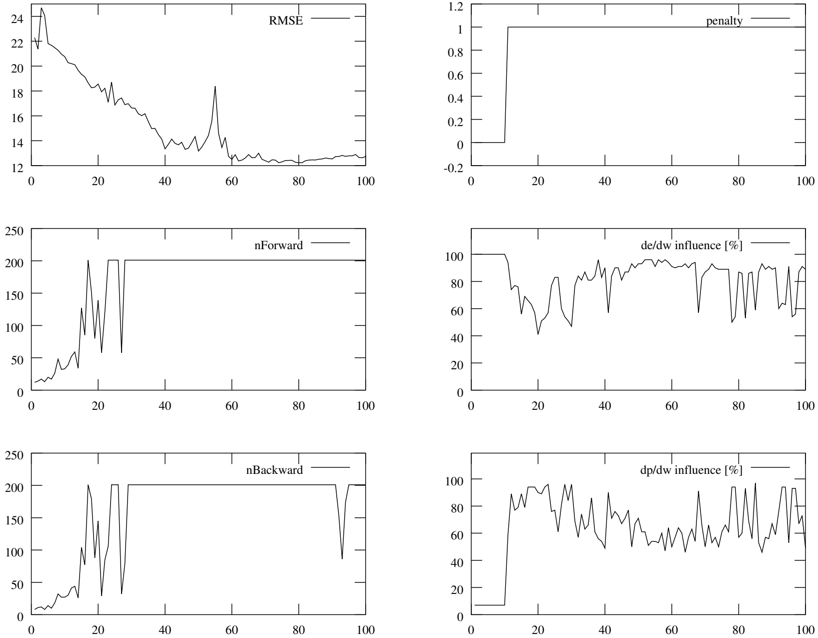
Tabela: 5-krotna walidacja krzyżowa, najlepsza sieć z 10ciu, 200 iteracji

Klasyfikacja węzłów - 100 grafów

	accuracy	precision	recall
GNN - TR	90%	88%	95%
GNN - TST	87%	84%	95%
FNN - TR	96%	94%	100%
FNN - TST	97%	95%	100%

Tabela: Klasyfikacja węzłów 100 iteracji

- zbiór uczący : 80 grafów
- zbiór testowy : 20 grafów
- wykorzystana GNN nr 5 z eksperymentu 1 (najlepsza)
- wykorzystana do porównania FNN z 5 neuronami ukrytymi


RMSE
penalty
nForward
de/dw influence [%]
nBackward
dp/dw influence [%]
0 20 40 60 80 100
12 14 16 18 20 22 24
-0.2 0 0.2 0.4 0.6 0.8 1 1.2
0 50 100 150 200 250
0 20 40 60 80 100

Wnioski

- Najlepszy efekt przy zachowaniu kontrakcji
- Brak zbieżności kontrakcji – brak poprawy
- Balansowanie na granicy zbieżności / ograniczona ilość kroków obliczenia stanu i błędu dopuszczalne
- Należy unikać nakładania niepotrzebnie kary kontrakcji
- Konieczna duża dokładność w sprawdzaniu punktu stałego
- Duża wrażliwość modelu na parametry
- Można dobrać zestaw parametrów (i początkowych wag) na podzbiorze danych