Do Transformers Really Perform Bad for Graph Representation?

Review

Лишуди Александр Мансуров Марат Атаев Азнаур

Мотивация

- Трансформеры захватили область.
- Но до сих пор в графах пользуются классическими методами.
- Авторы показывают что трансформеры умеют и в графы.
- Для этого достаточно всего лишь...
- аккуратно добавить графовые особенности в эмбеддинги.

Остатье

- Опубликована: 09.06.2021
- Конференция: NeurIPS
- Microsoft Research Asia
- Авторы: Chengxuan Ying, Tianle Cai, Shengjie Luo, Shuxin Zheng, Guolin Ke,
 Di He, Yanming Shen, Tie-Yan Liu

Базовые статьи

• [Transformer]

Attention is all you need. NeurIPS 2017

[Graph Transformer]

Graph-bert: Only attention is needed for learning graph representations. arXiv 2020 (Pos Embeds for Graph Data)

Цитирования и продолжения

- 236 цитирований за 18 месяцев (на 17.12.2022)
- Simple GNN Regularisation for 3D Molecular Property Prediction and Beyond.
- В остальном это обзорные статьи или всякие сравнения. У большинства не больше 2-3 цитирований.
- Прямых продолжений работы не найдено

Результаты и сильные стороны

- Трансформеры теперь и в графах.
- Описан подход победителей OGB-LSC трека PCQM4M-LSC (предсказание квантовых свойств молекулярных графов)
- Есть отступление про графы и vanilla трансформер
- Есть ablation studies
- Сравнение со многими конкурентами на 4 крупных датасетах
- Есть имплементация
- Описаны планы дальнейшей работы

Минусы и улучшения

 Хоть сколько нибудь значимых недостатков не обнаружено, статья полностью вылизана.