

# GraphSage

## MPNNs

# Graphormer

Методы работы с графами

# Предшественники GraphSage

- 1) Методы используемые до GraphSage для получения эмбедингов вершин графа:
- 2) **Node2Vec**: применяется алгоритм обхода узлов с целью создания эмбедингов
- 3) **DeepWalk**: подобно Node2Vec, DeepWalk также использует методы обхода узлов, но с целью создания эмбедингов узлов графа на основе случайного блуждания.

# Предпосылки к созданию GraphSage

Проблемы предыдущих алгоритмов:

- 1)Неприменимость к большим графам
- 2)Ограничения на обучение на неподвижных графах



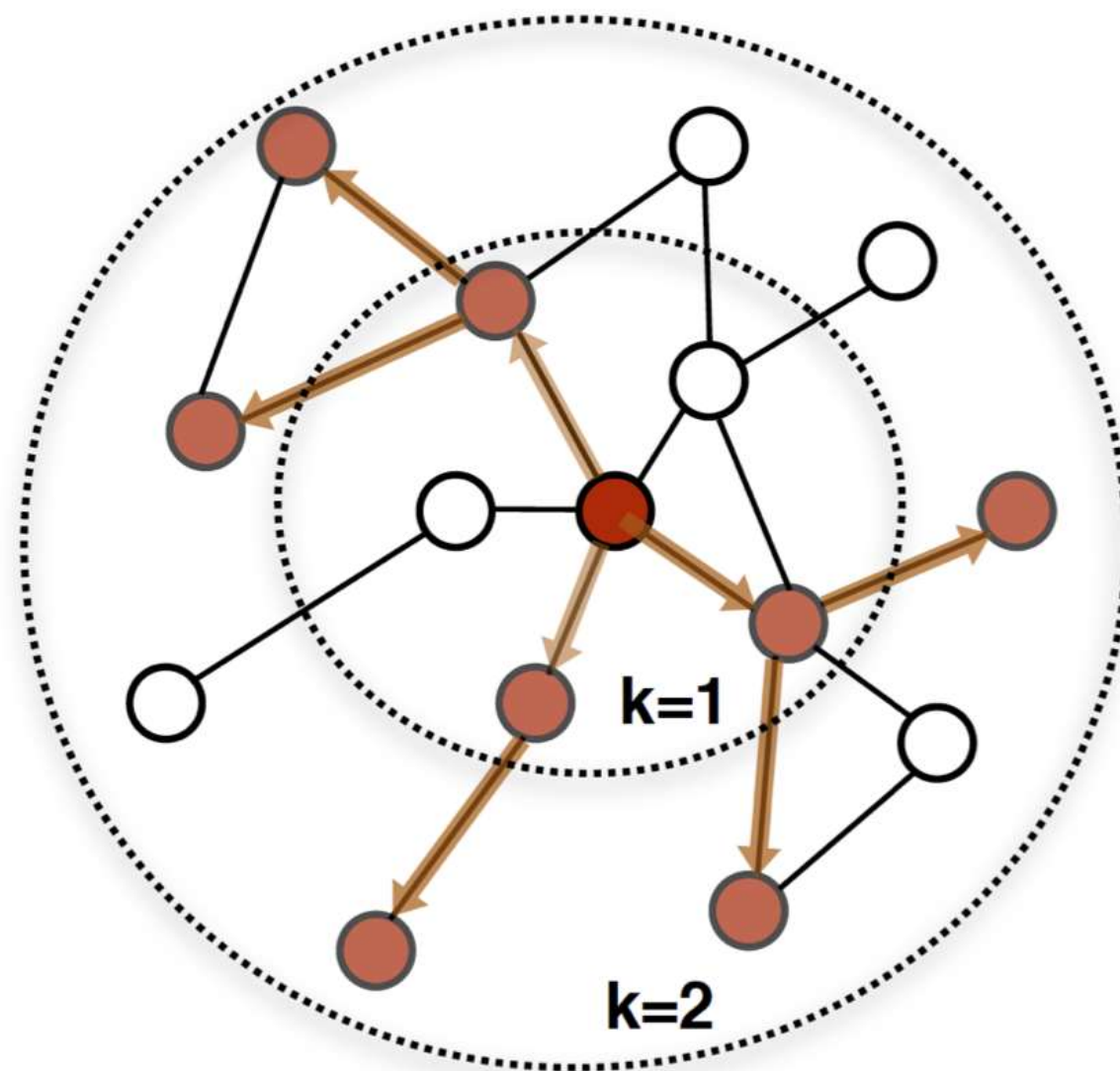
# Суть алгоритма GraphSage

Принцип работы GraphSAGE(Graph Sample and AggregatE) заключается в следующих трех этапах которые повторяются

# Суть алгоритма GraphSage

Принцип работы GraphSAGE(Graph Sample and AggregatE) заключается в следующих трех этапах которые повторяются

**1)Выборка соседей:** Для каждой вершины выбираются подмножество её соседей

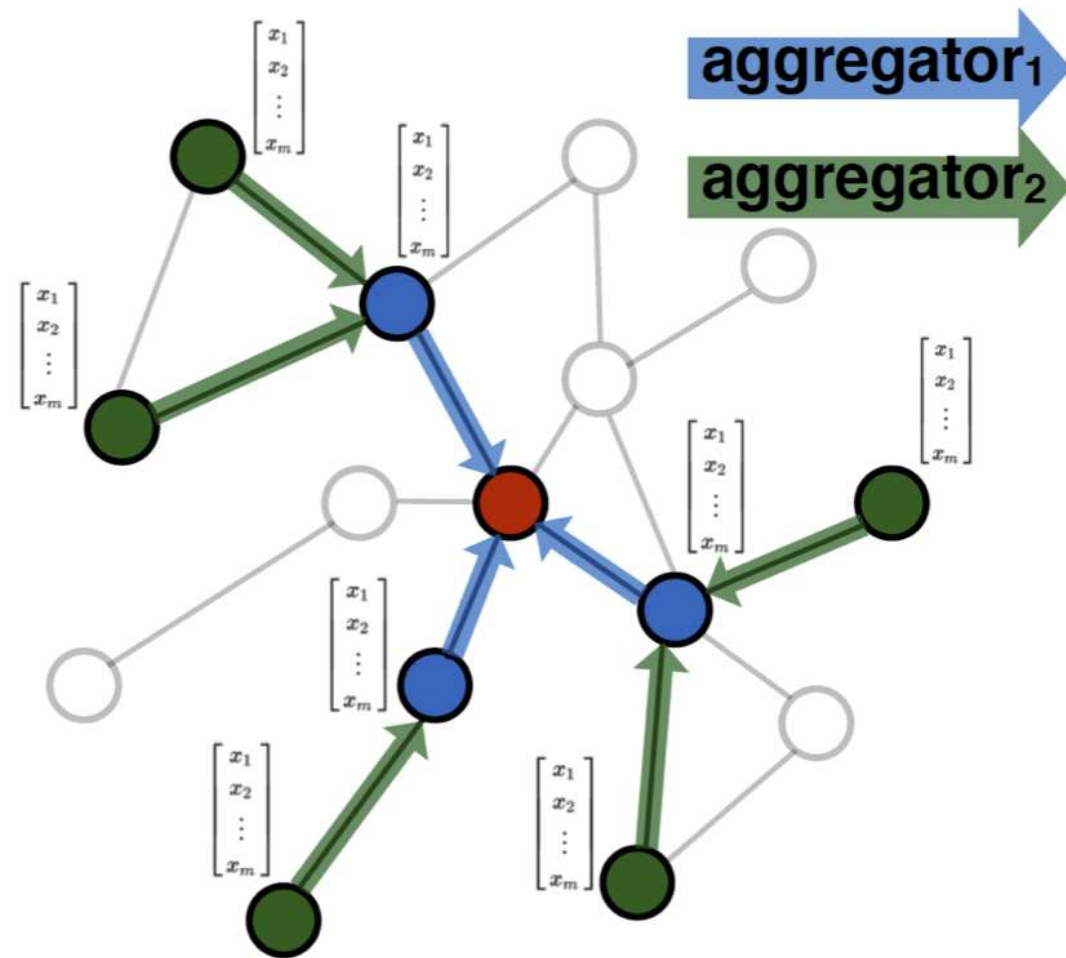


1. Sample neighborhood

# Суть алгоритма GraphSage

Принцип работы GraphSAGE(Graph Sample and AggregatE) заключается в следующих трех этапах которые повторяются

**2)Агрегация признаков:** Используется механизм агрегации, чтобы объединить признаки выбранных соседей в один вектор признаков.

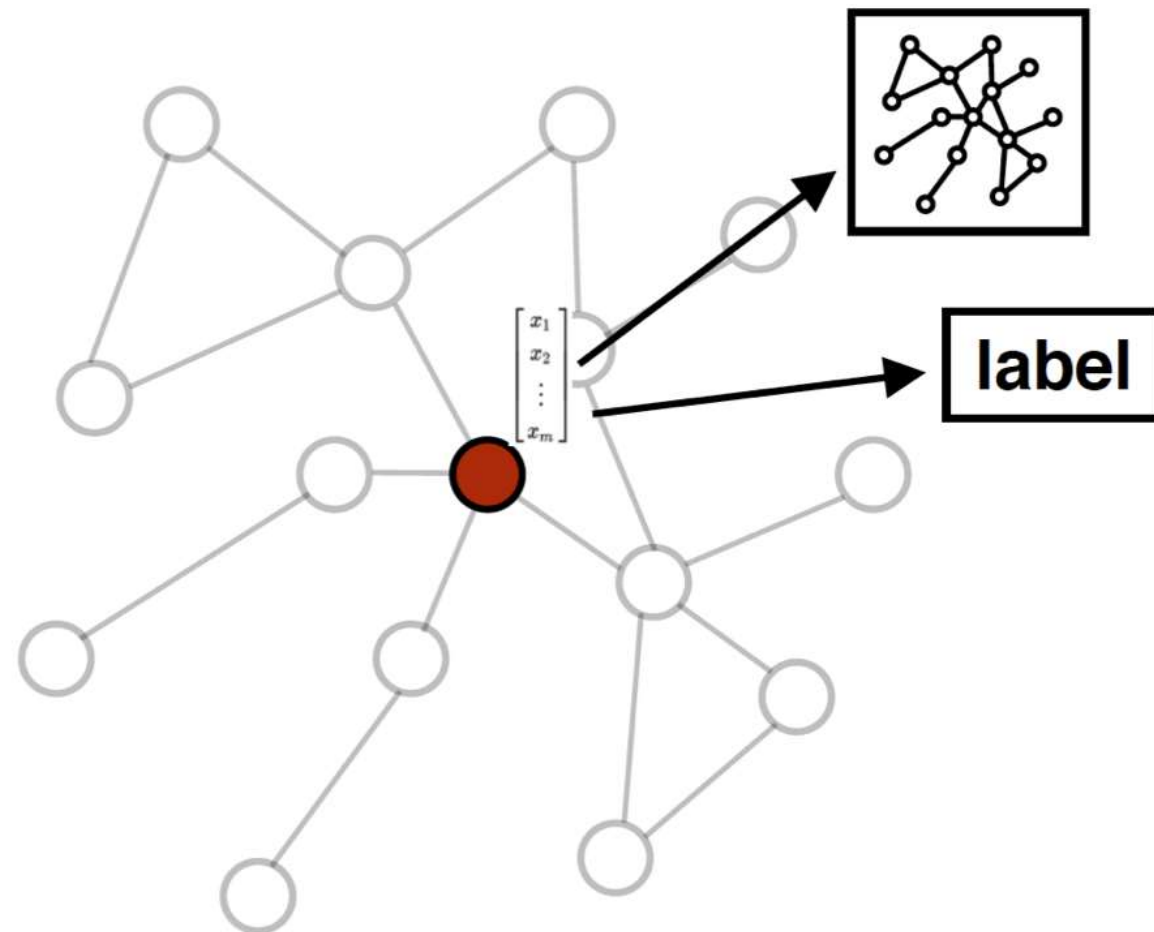


2. Aggregate feature information  
from neighbors

# Суть алгоритма GraphSage

Принцип работы GraphSAGE(Graph Sample and AggregatE) заключается в следующих трех этапах которые повторяются

**3)Обновление признаков:** Новые признаки, используются для обновления признаков исходных вершин в графе.



3. Predict graph context and label  
using aggregated information



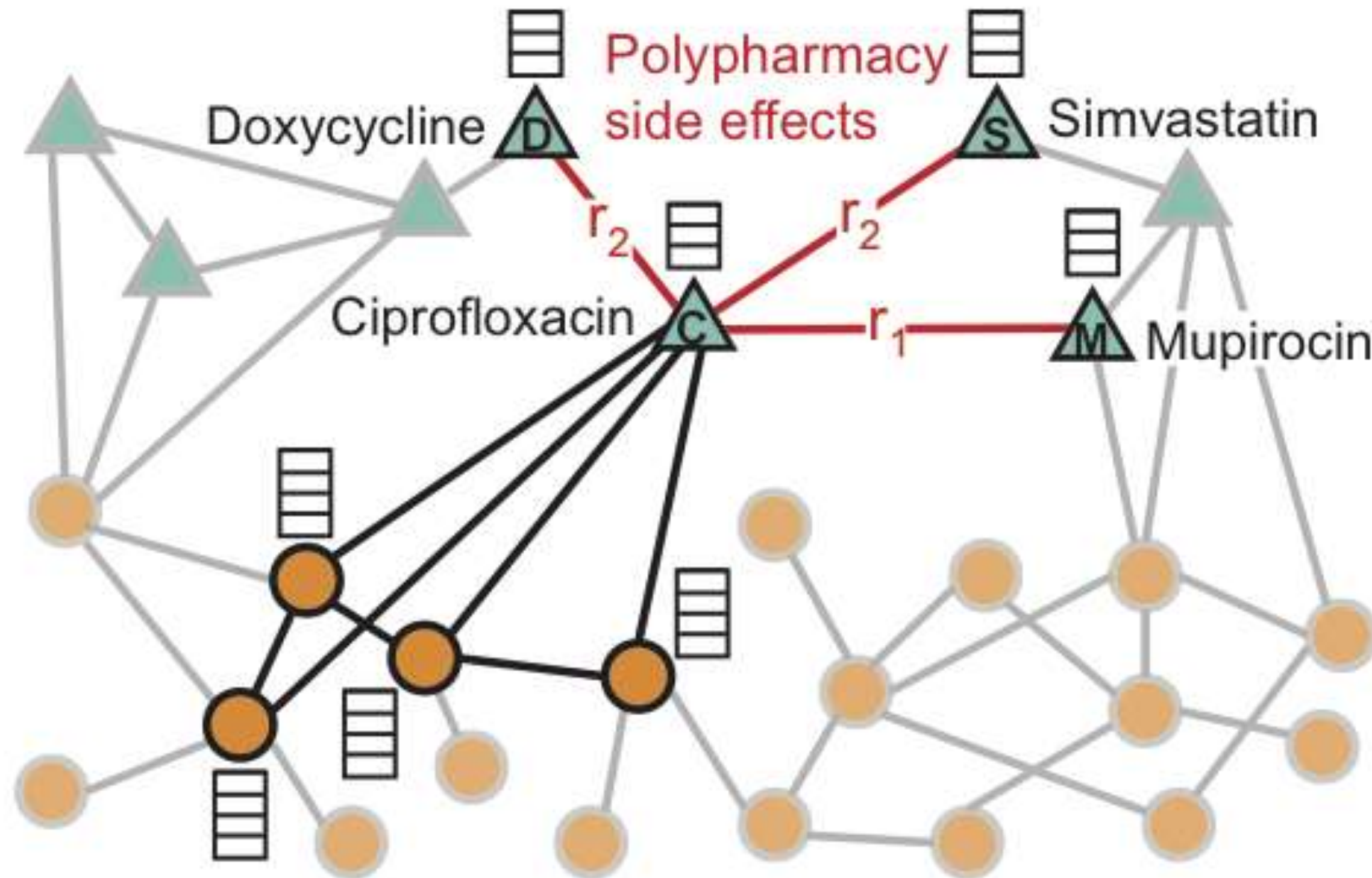
# Суть алгоритма GraphSage

Примеры функций агрегации:

1. Усреднение (mean aggregation): Для каждого узла алгоритм усредняет представления его соседних узлов, чтобы получить обобщенное представление.
2. Конкатенация (concatenation aggregation): Здесь для каждого узла представления его соседних узлов конкатенируются в один вектор, который после этого используется для обновления представления узла.
3. Пулинг (pooling aggregation): Эта функция агрегации объединяет представления соседних узлов посредством операции пулинга, например, максимального или среднего пулинга.



# Применение Graphsage на примере мультиграфа взаимодействий белков



▲ Drug    ● Protein

≡ Node feature vector

$r_1$  Gastrointestinal bleed side effect

$r_2$  Bradycardia side effect

▲—● Drug-protein interaction

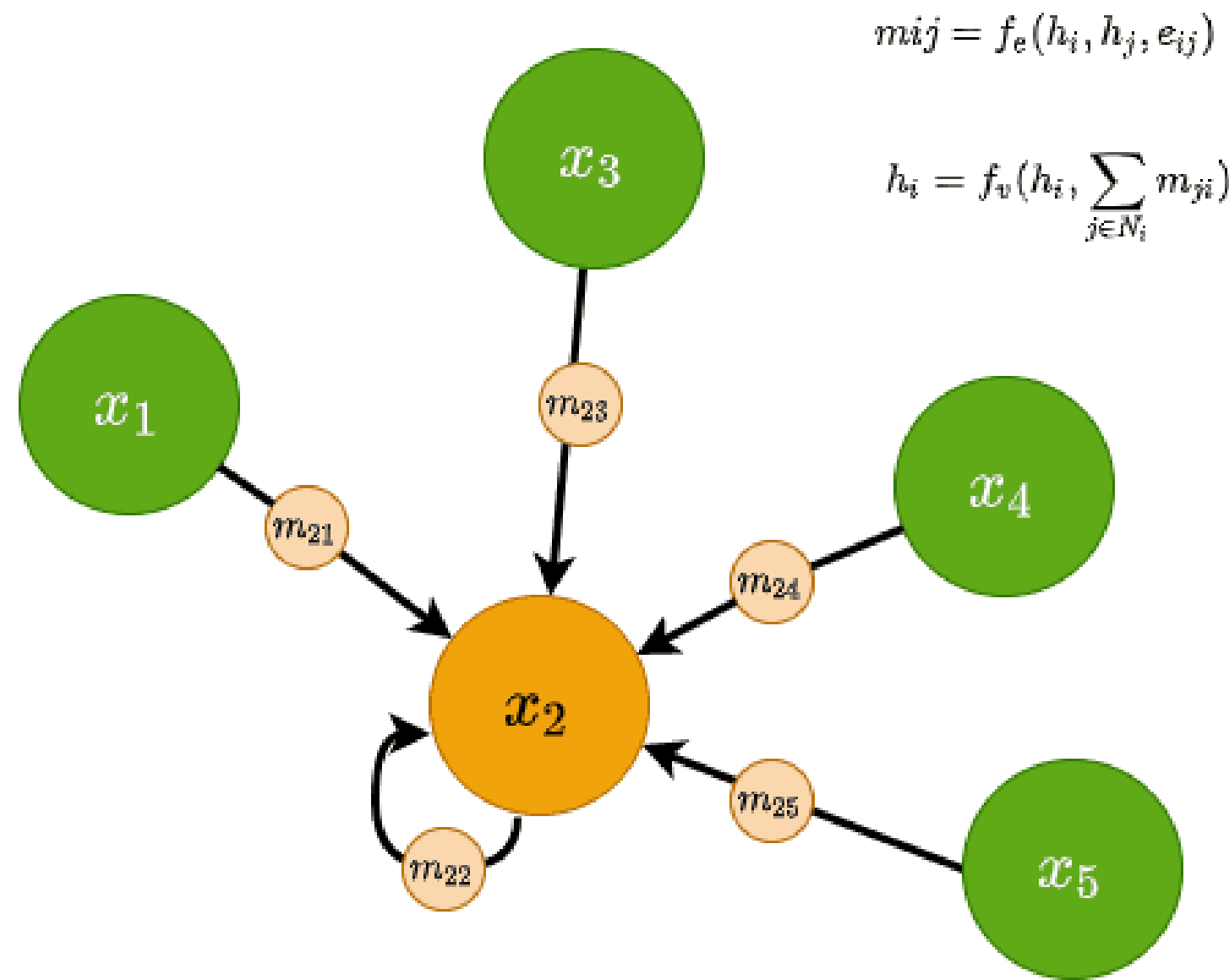
●—● Protein-protein interaction

# GNN(Графовые нейронные сети)

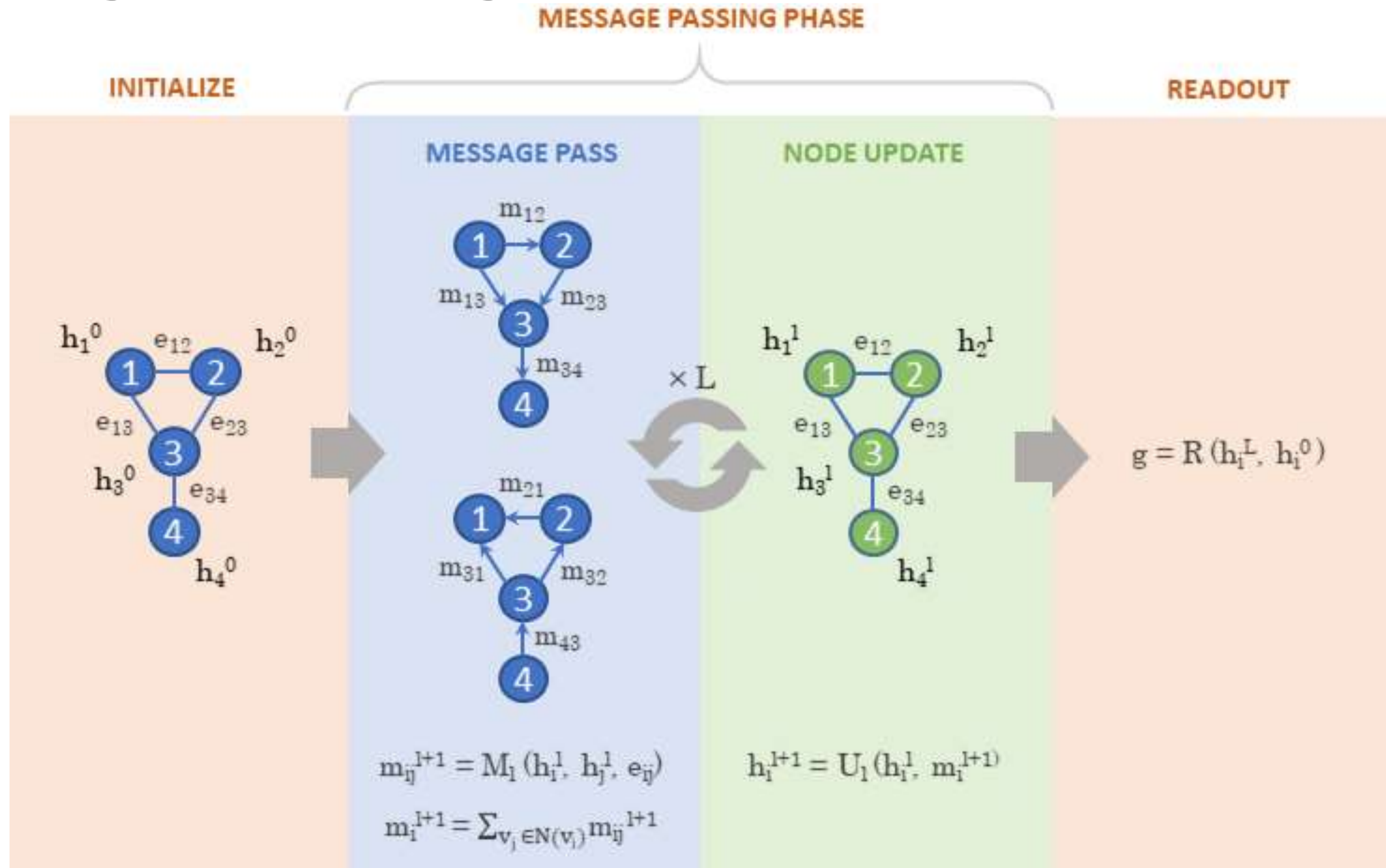
- Сверточные сети (**GCN**)
- Gated Graph Neural Networks (**GGNN**)
- Сети обмена сообщениями (**MPNN**)
- Трансформеры(**Graphormer**)

# Message Passing Neural Networks (MPNN)

- MPNN принцип работы:
- **Message passing:** Каждый узел обменивается сообщениями с соседними узлами о своем состоянии и окружении.
- **Обновление состояний узлов:** Каждый узел обновляет свое состояние на основе полученных сообщений от соседних узлов.
- **Глобальное предсказание:** после нескольких итераций передачи сообщений и обновления состояний узлов, данные об узлах объединяются для предсказания.



# Message Passing Neural Networks (MPNN)





# Message Passing Neural Networks (MPNN)

Table 2. Comparison of Previous Approaches (left) with MPNN baselines (middle) and our methods (right)

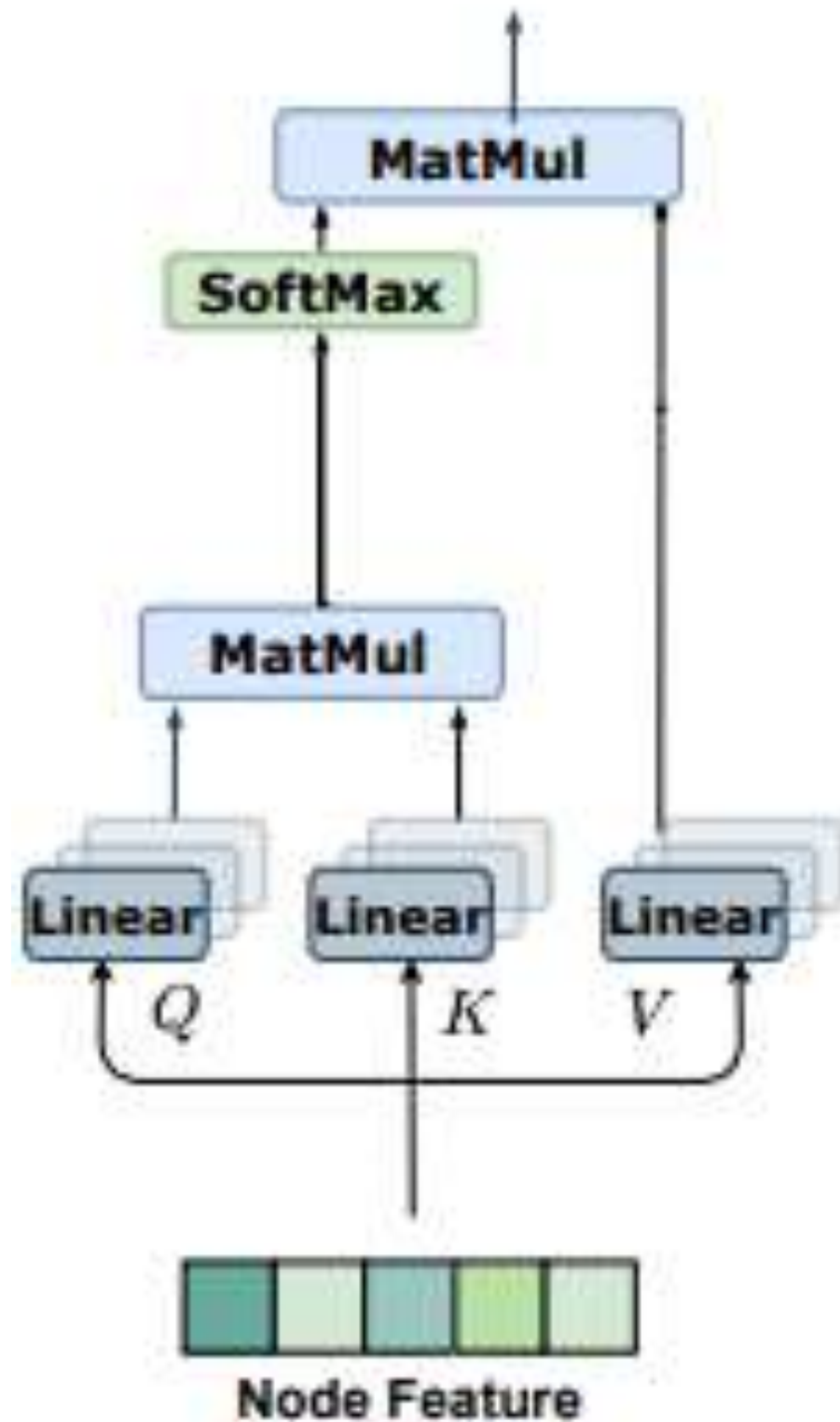
Target	BAML	BOB	CM	ECFP4	HDAD	GC	GG-NN	DTNN	enn-s2s	enn-s2s-ens5
mu	4.34	4.23	4.49	4.82	3.34	0.70	1.22	-	<b>0.30</b>	0.20
alpha	3.01	2.98	4.33	34.54	1.75	2.27	1.55	-	<b>0.92</b>	0.68
HOMO	2.20	2.20	3.09	2.89	1.54	1.18	1.17	-	<b>0.99</b>	0.74
LUMO	2.76	2.74	4.26	3.10	1.96	1.10	1.08	-	<b>0.87</b>	0.65
gap	3.28	3.41	5.32	3.86	2.49	1.78	1.70	-	<b>1.60</b>	1.23
R2	3.25	0.80	2.83	90.68	1.35	4.73	3.99	-	<b>0.15</b>	0.14
ZPVE	3.31	3.40	4.80	241.58	1.91	9.75	2.52	-	<b>1.27</b>	1.10
U0	1.21	1.43	2.98	85.01	0.58	3.02	0.83	-	<b>0.45</b>	0.33
U	1.22	1.44	2.99	85.59	0.59	3.16	0.86	-	<b>0.45</b>	0.34
H	1.22	1.44	2.99	86.21	0.59	3.19	0.81	-	<b>0.39</b>	0.30
G	1.20	1.42	2.97	78.36	0.59	2.95	0.78	.84 <sup>2</sup>	<b>0.44</b>	0.34
Cv	1.64	1.83	2.36	30.29	0.88	1.45	1.19	-	<b>0.80</b>	0.62
Omega	0.27	0.35	1.32	1.47	0.34	0.32	0.53	-	<b>0.19</b>	0.15
Average	2.17	2.08	3.37	53.97	1.35	2.59	1.36	-	<b>0.68</b>	0.52

# Message Passing Neural Networks (MPNN)

- MPNN была успешно применена для:
  - моделирования взаимодействия атомов в молекуле
  - предсказывание свойств атомов
  - прогнозирование молекулярной энергии
  - определение структуры молекулы

# Graphormer архитектура

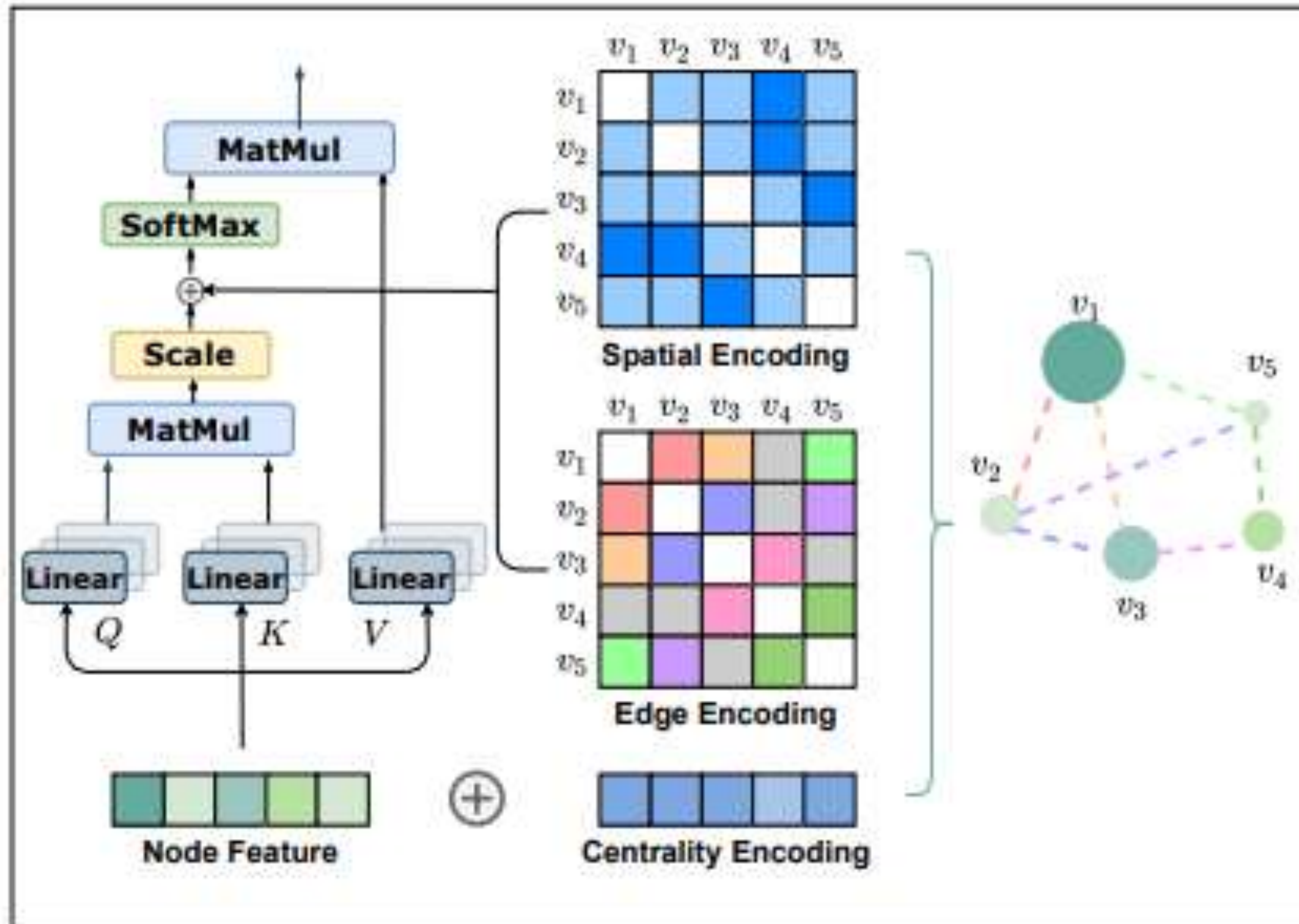
Проблема стандартного attention блока в том что в нем не учитывается структурная информация





# Graphormer архитектура

Добавление структурной информации





# Graphormer сравнение качества

Table 1: Results on PCQM4M-LSC. \* indicates the results are cited from the official leaderboard [21].

method	#param.	train MAE	validate MAE
GCN [26]	2.0M	0.1318	0.1691 (0.1684*)
GIN [50]	3.8M	0.1203	0.1537 (0.1536*)
GCN-VN [26, 15]	4.9M	0.1225	0.1485 (0.1510*)
GIN-VN [50, 15]	6.7M	0.1150	0.1395 (0.1396*)
GINE-VN [5, 15]	13.2M	0.1248	0.1430
DeeperGCN-VN [30, 15]	25.5M	0.1059	0.1398
GT [13]	0.6M	0.0944	0.1400
GT-Wide [13]	83.2M	0.0955	0.1408
Graphormer <sub>SMALL</sub>	12.5M	0.0778	0.1264
Graphormer	47.1M	<b>0.0582</b>	<b>0.1234</b>

Table 2: Results on MolPCBA.

method	#param.	AP (%)
DeeperGCN-VN+FLAG [30]	5.6M	28.42±0.43
DGN [2]	6.7M	28.85±0.30
GINE-VN [5]	6.1M	29.17±0.15
PHC-GNN [29]	1.7M	29.47±0.26
GINE-APPNP [5]	6.1M	29.79±0.30
GIN-VN[50] (fine-tune)	3.4M	29.02±0.17
Graphormer-FLAG	119.5M	<b>31.39±0.32</b>

Table 4: Results on ZINC.

method	#param.	test MAE
GIN [50]	509,549	0.526±0.051
GraphSage [18]	505,341	0.398±0.002
GAT [47]	531,345	0.384±0.007
GCN [26]	505,079	0.367±0.011
GatedGCN-PE [4]	505,011	0.214±0.006
MPNN (sum) [15]	480,805	0.145±0.007
PNA [10]	387,155	0.142±0.010
GT [13]	588,929	0.226±0.014
SAN [28]	508,577	0.139±0.006
Graphormer <sub>SLIM</sub>	489,321	<b>0.122±0.006</b>

Table 3: Results on MolHIV.

method	#param.	AUC (%)
GCN-GraphNorm [5, 8]	526K	78.83±1.00
PNA [10]	326K	79.05±1.32
PHC-GNN [29]	111K	79.34±1.16
DeeperGCN-FLAG [30]	532K	79.42±1.20
DGN [2]	114K	79.70±0.97
GIN-VN[50] (fine-tune)	3.3M	77.80±1.82
Graphormer-FLAG	47.0M	<b>80.51±0.53</b>