
Graph Neural Networks (GNN)

Blanca Vázquez
Clase: *deep learning*

13 de mayo, 2024.

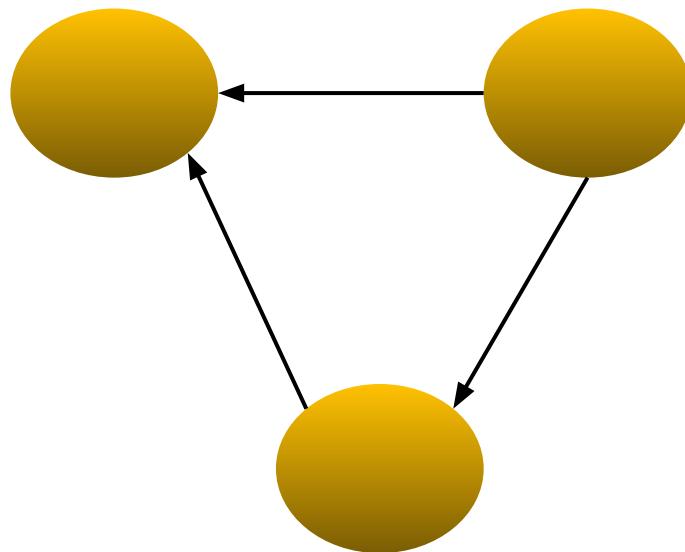
Grafo

Los **grafos** son estructuras discretas que constan de vértices y aristas que conectan entre sí esos vértices.

Constan de 2 partes:

$$G = (V, E)$$

- 1) Un conjunto $V = V(G)$ cuyos elementos se denominan **vértices**, puntos o nodos de G .
- 2) Un conjunto $E = E(G)$ de pares de vértices distintos denominados **aristas** de G .



Grafo

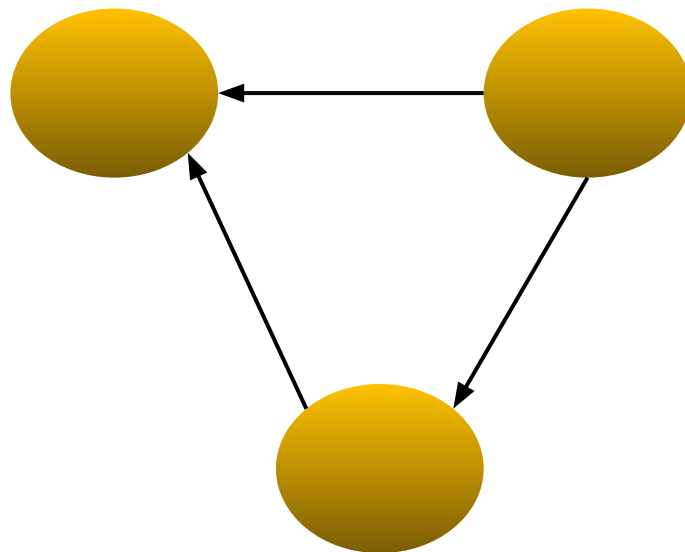
Los **grafos** son estructuras discretas que constan de vértices y aristas que conectan entre sí esos vértices.

Constan de 2 partes:

$$G = (V, E)$$

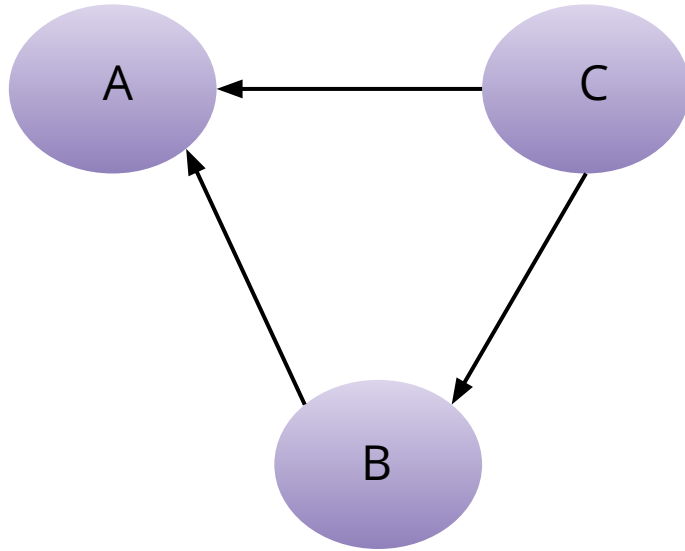
- 1) Un conjunto $V = V(G)$ cuyos elementos se denominan **vértices**, puntos o nodos de G .
- 2) Un conjunto $E = E(G)$ de pares de vértices distintos denominados **aristas** de G .

Los nodos pueden ser personas, lugares, cosas

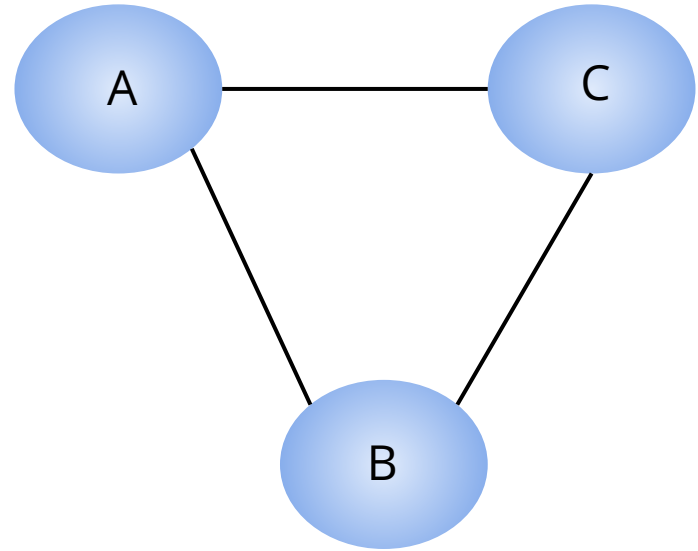


Las aristas pueden ser las relaciones entre ellos.

Tipos de grafos básicos

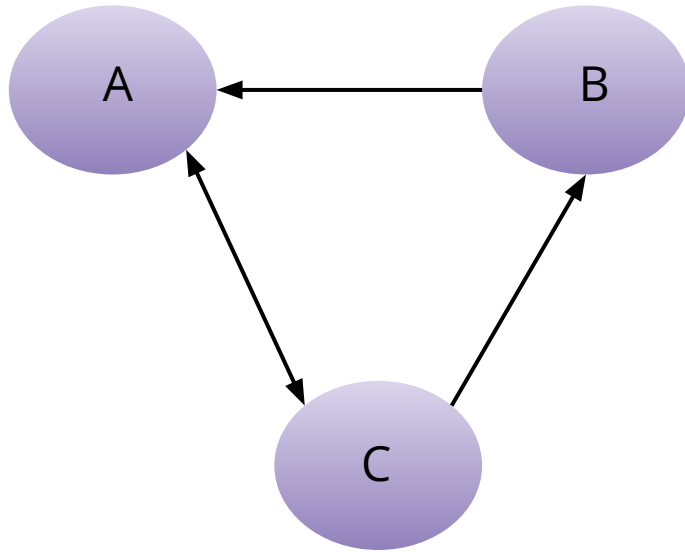


Grafo dirigido



Grafo no dirigido

Tipos de grafos básicos

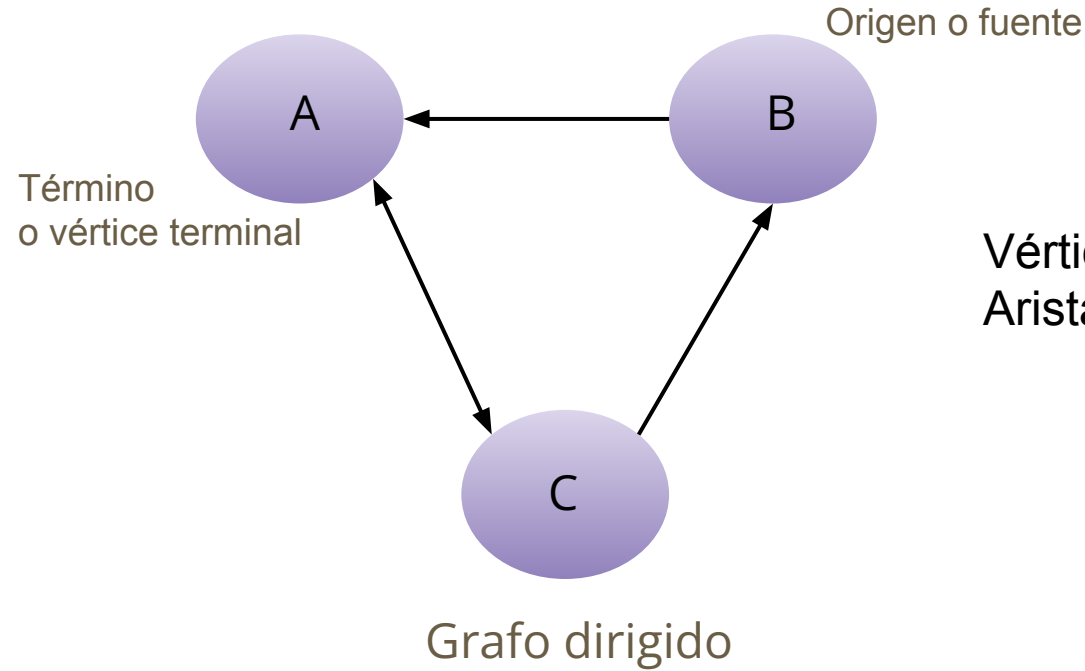


Grafo dirigido

Vértices $V = \{A, B, C\}$

Aristas $E = \{(B, A), (A, C), (C, A), (C, B)\}$

Tipos de grafos básicos



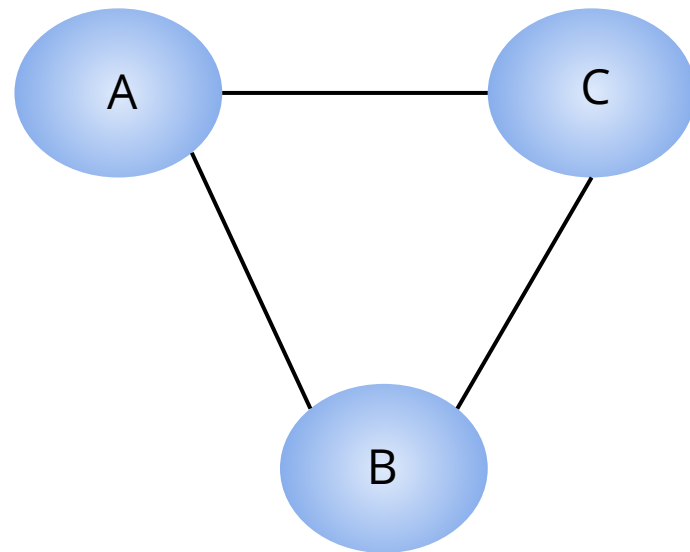
Vértices $V = \{A, B, C\}$

Aristas $E = \{(B, A), (A, C), (C, A), (C, B)\}$

Tipos de grafos básicos

Vértices $V = \{A, B, C\}$

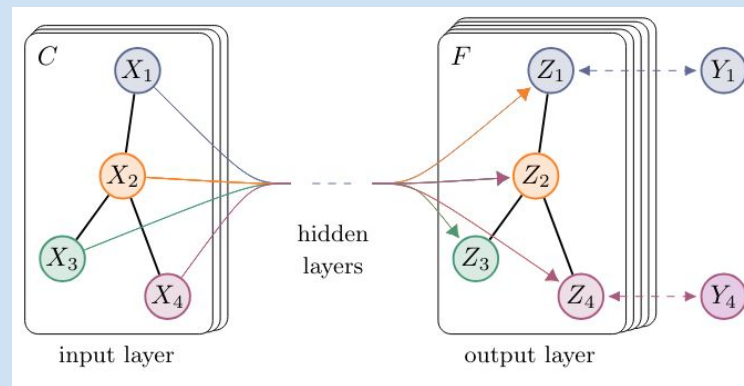
Aristas $E = \{(A,B),(B,A),(B,C),(C,B),(A,C),(C,A)\}$



Grafo no dirigido

¿Qué son las Graph Neural Networks (GNN)?

- Son tipos especiales de redes neuronales capaces de trabajar con una estructura de datos de grafos.
- Están muy influenciados por las redes neuronales convolucionales (CNN).
- Los GNN se utilizan para predecir nodos, aristas y tareas basadas en gráficos.



Red neural de grafos

Imagen tomada de Kipf, 2017

¿Cómo surgen?

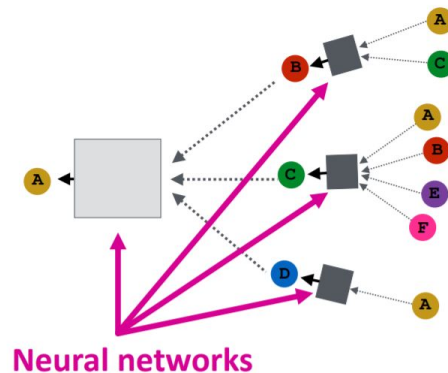
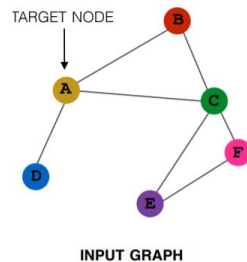
La noción de redes neuronales de grafos se describió inicialmente por:

- F. Scarselli, A. C. Tsoi, M. Gori, and M. Hagenbuchner. "A new neural network model for graph processing," Department of Information Engineering, University of Siena, Tech. Rep. DII 01/05, **2005**.
- F. Scarselli, M. Gori, A. C. Tsoi, M. Hagenbuchner and G. Monfardini, "The Graph Neural Network Model," in *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 20, no. 1, pp. 61-80, Jan. **2009**.
- C. Gallicchio and A. Micheli, "Graph Echo State Networks," *The 2010 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, Barcelona, Spain, **2010**,.

¿Cómo surgen?

Las GNN se introdujeron cuando las redes neuronales convolucionales:

- no lograron resultados óptimos debido al **tamaño** arbitrario del gráfico y la **estructura compleja**.



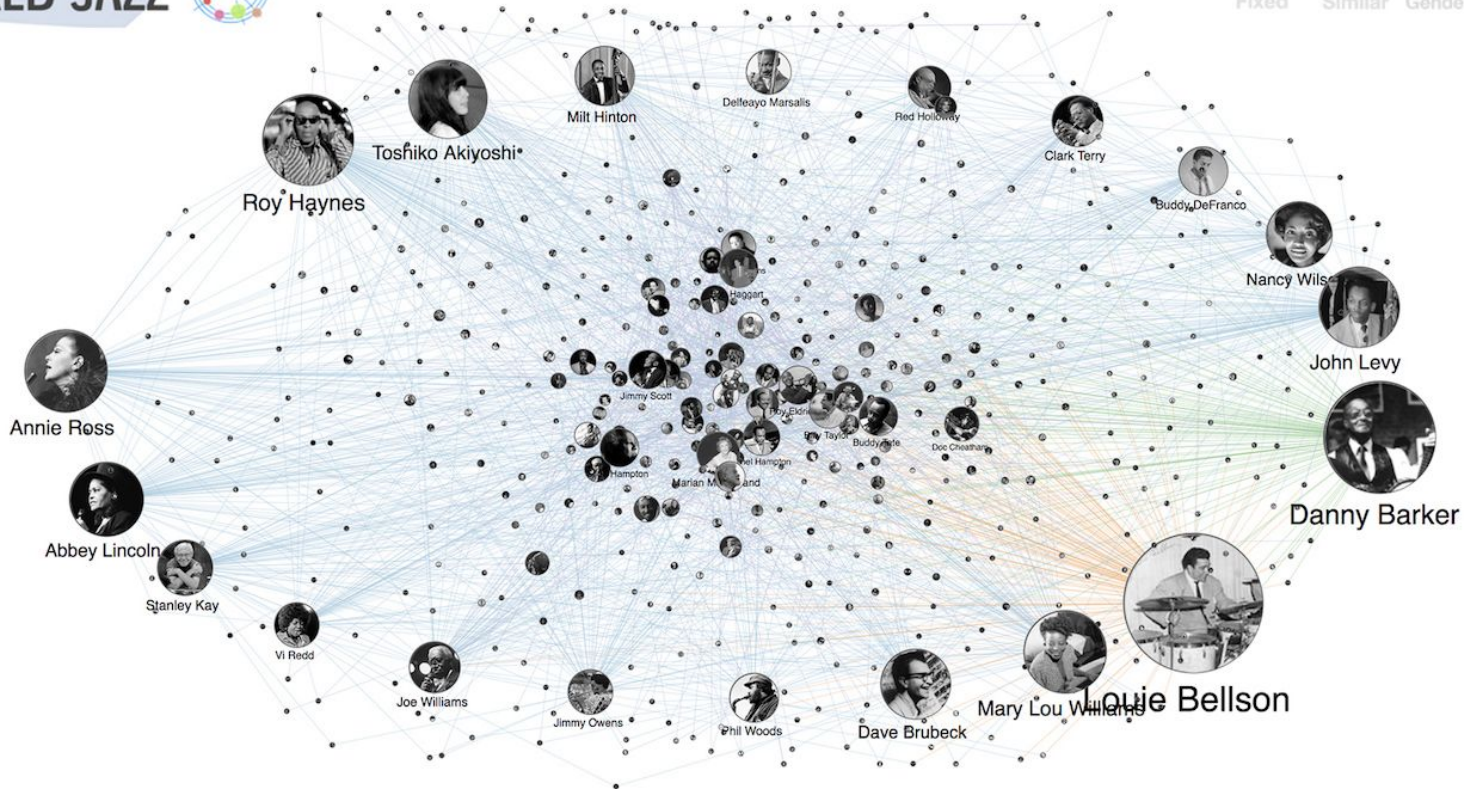
Red neural de grafos

Imagen tomada de datacamp, 2022.

LINKED JAZZ

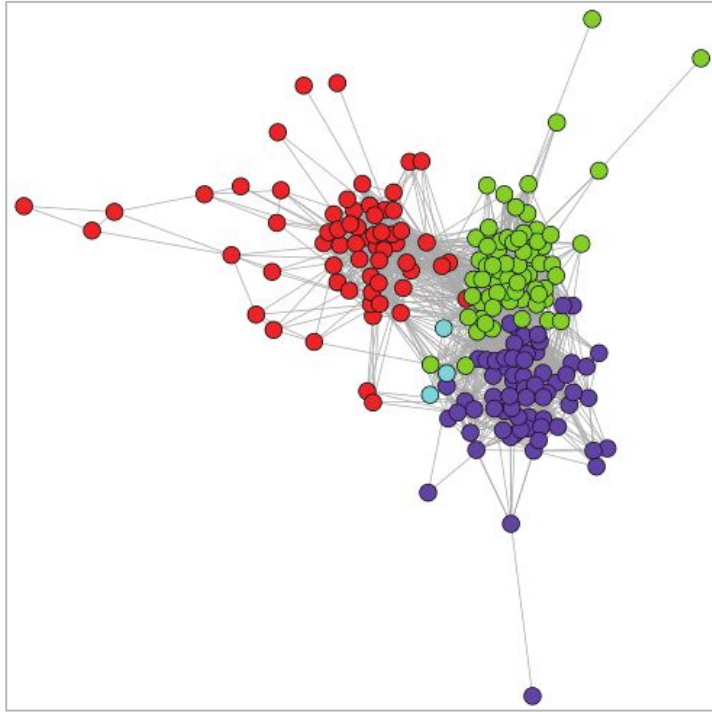


Fixed Similar Gender Dynamic



GP

Jazz Musicians Network



Grafo de músicos de Jazz.

Imagen tomada de Ibba, 2015.

Red de colaboración de músicos de jazz.

- Cada nodo es un músico de Jazz y una arista indica que dos músicos han tocado juntos en una banda.
- Diferentes colores representan diferentes comunidades.

Tipos de atributos en un grafo

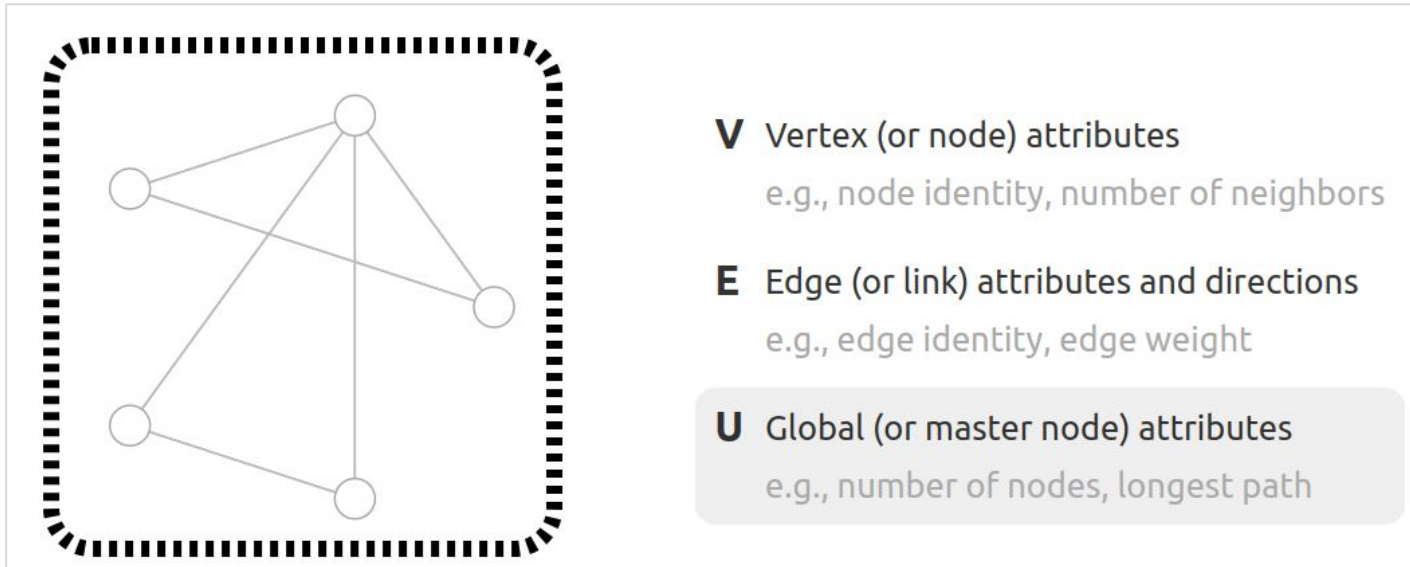


Imagen tomada de Sánchez, 2021.

Retomando

Una GNN es una **transformación optimizable** en todos los atributos del gráfico (nodos, bordes, contexto global) preservando las simetrías del grafo (invarianzas de permutación).

La forma de “comunicación” durante el entrenamiento es a través de **paso de mensajes**.

Adoptan una arquitectura de “graph-in, graph-out”.

No cambian la conectividad del grafo.

Capa simple de una GNN

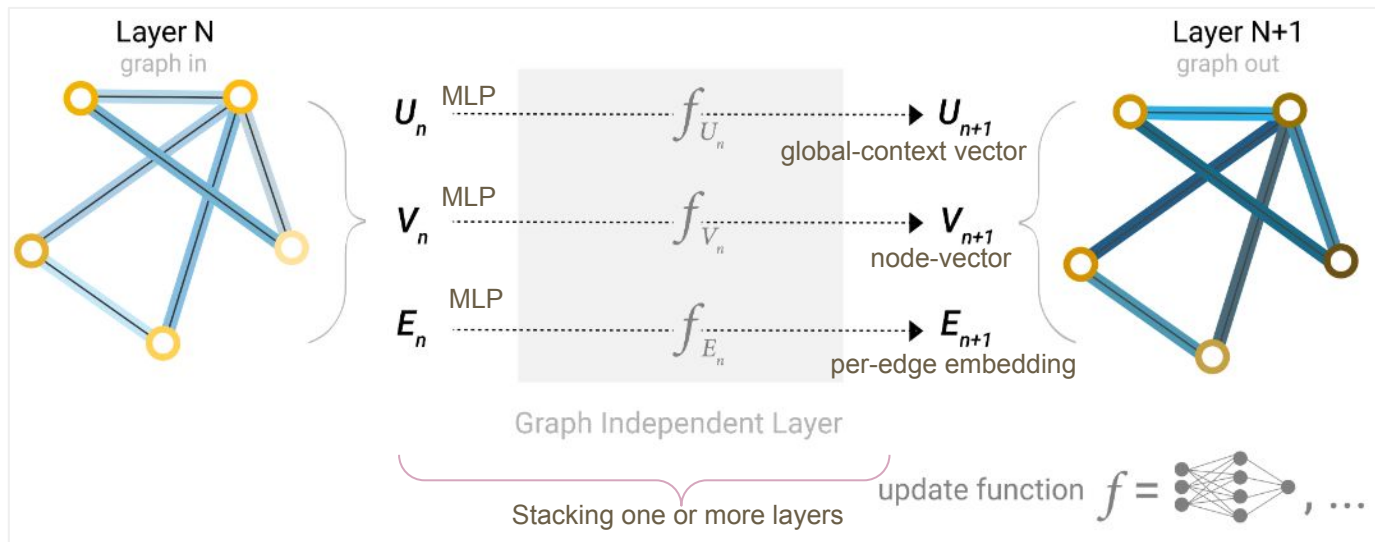
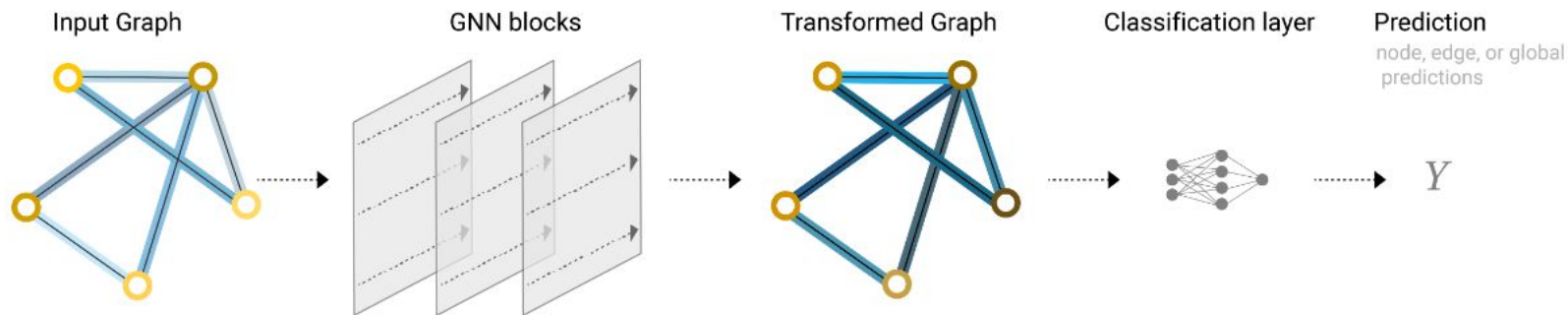


Imagen tomada de Sánchez, 2021.

Predicción binaria / multiclase / regresión con GNN



An end-to-end prediction task with a GNN model.

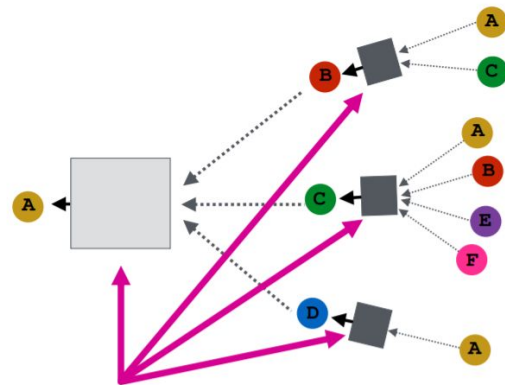
Imagen tomada de Sánchez, 2021.

¿Cómo funcionan?

De forma general, las redes que conocemos (RNN, CNN..), se ha centrado principalmente en imágenes y texto. Estos podrían representarse **como tipos de datos estructurados** que se pueden describir como secuencias de palabras o cuadrículas de píxeles.

Sin embargo, los grafos, **no se estructuran**. Pueden tomar cualquier forma o tamaño y contener cualquier tipo de datos, incluidas imágenes y texto.

Mediante un proceso llamado **traspaso de mensajes**, las GNN organizan grafos para que los algoritmos de conocidos puedan usarlos.



Neural networks

¿Cómo funcionan?

- El **traspaso de mensajes** incorpora en cada nodo información sobre sus **vecinos**.
 - Ejemplos:
 - Clientes - productos
- Los modelos de IA utilizan la información incorporada para encontrar patrones y hacer predicciones.

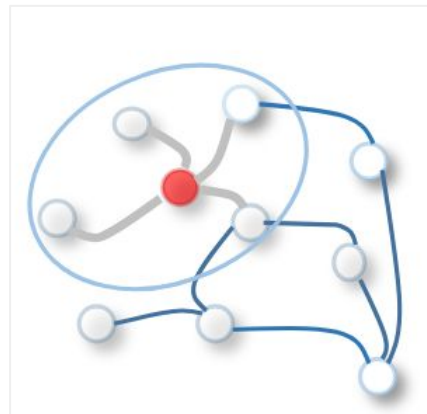


Imagen tomada de Wu, 2019.

Paso de mensajes

1. Por cada nodo en el grafo, se obtiene todos los *embeddings* de todos los nodos vecinos.
2. Se suma toda la información obtenida.
3. Todos los mensajes agrupados pasan a través de una función de actualización.

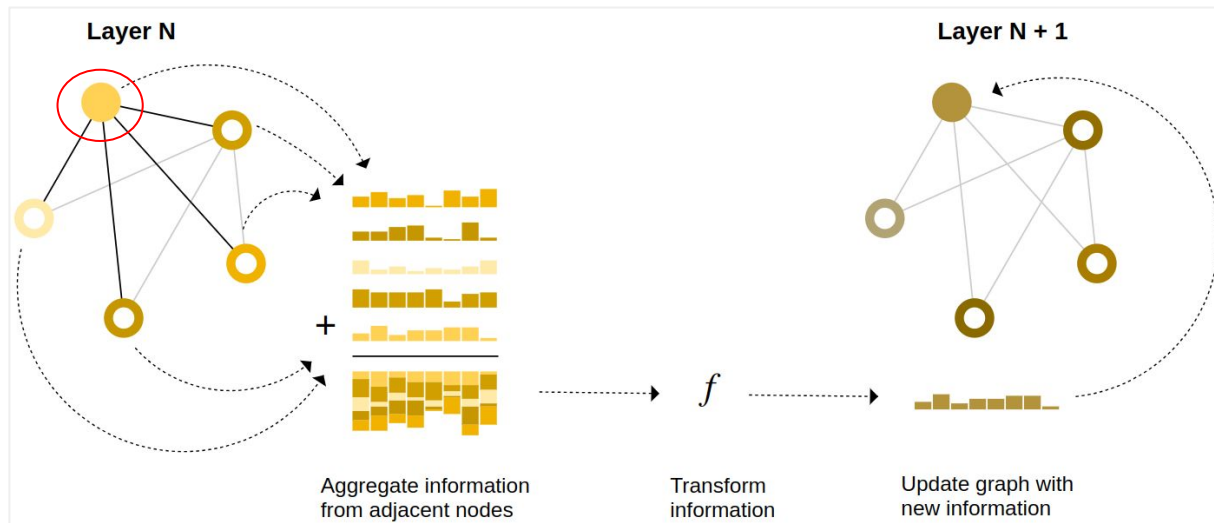


Imagen tomada de Sánchez, 2021.

Paso de mensajes

1. Por cada nodo en el grafo, se obtiene todos los *embeddings* de todos los nodos vecinos.
2. Se suma toda la información obtenida.
3. Todos los mensajes agrupados pasan a través de una función de actualización.

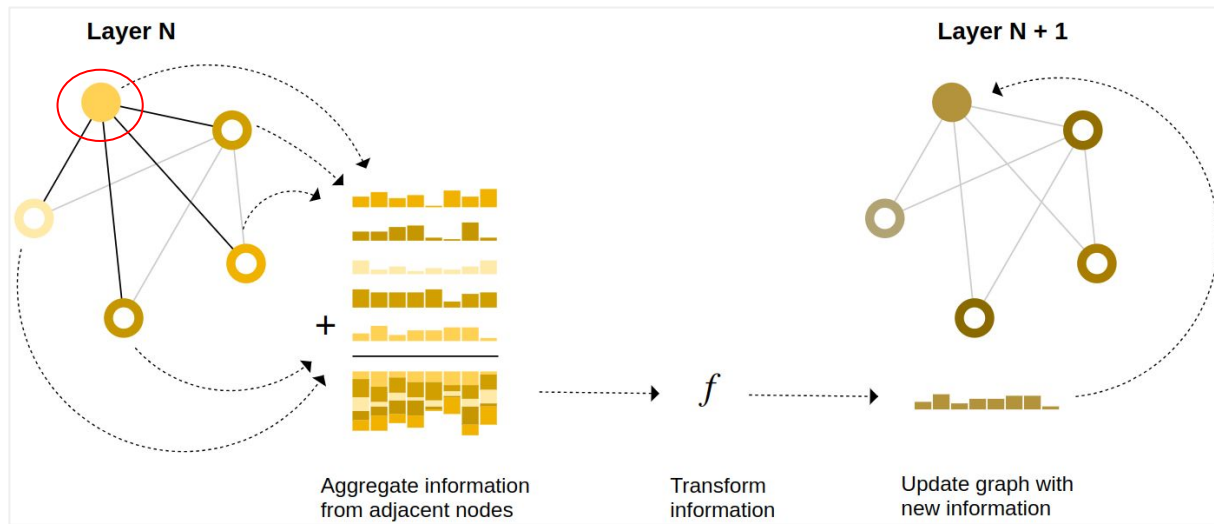
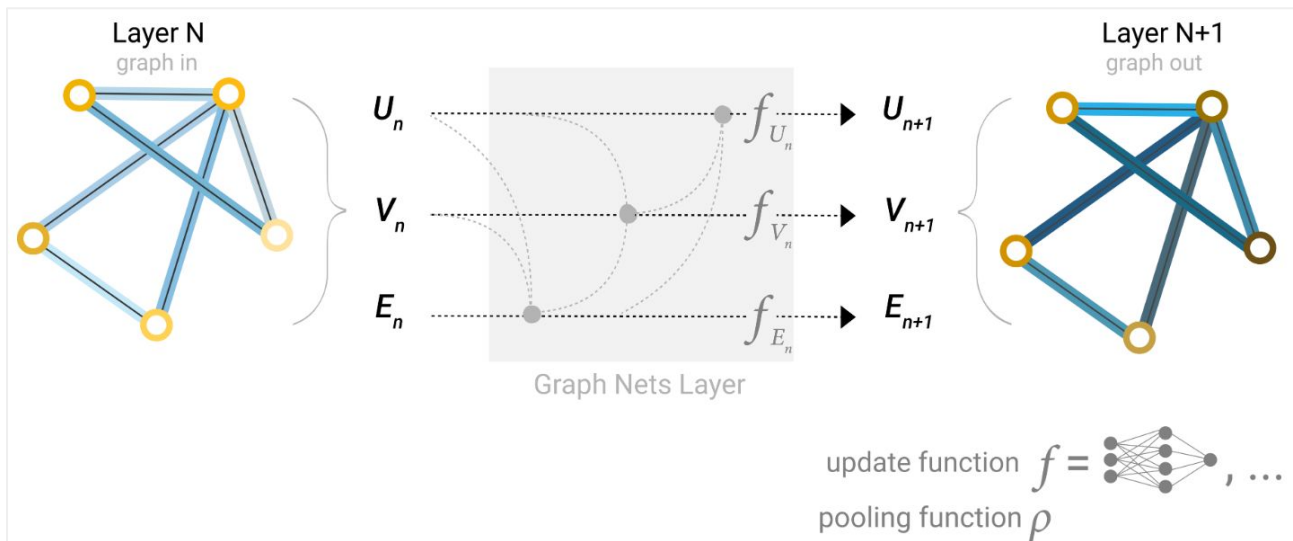


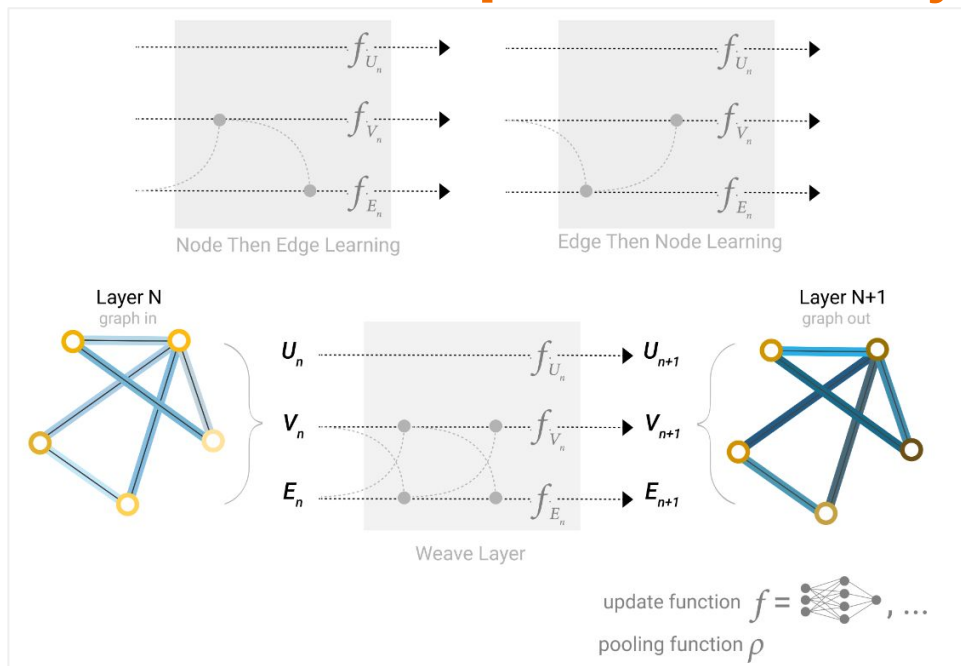
Imagen tomada de Sánchez, 2021.

El paso de mensajes puede ocurrir a nivel nodo o arista.

Arquitectura de una GNN con paso de mensajes.

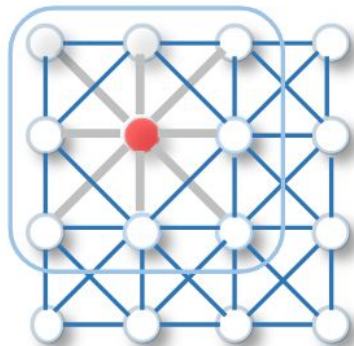


Arquitectura de una GNN con paso de mensajes.

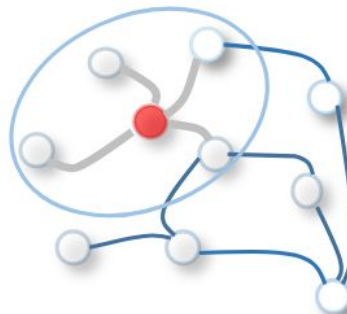


Maneras posibles en que podríamos combinar la representación de bordes y nodos en una capa GNN.

Comparativa de CNN vs GNN



(a) 2D Convolution. Analogous to a graph, each pixel in an image is taken as a node where neighbors are determined by the filter size. The 2D convolution takes the weighted average of pixel values of the red node along with its neighbors. The neighbors of a node are ordered and have a fixed size.



(b) Graph Convolution. To get a hidden representation of the red node, one simple solution of the graph convolutional operation is to take the average value of the node features of the red node along with its neighbors. Different from image data, the neighbors of a node are unordered and variable in size.

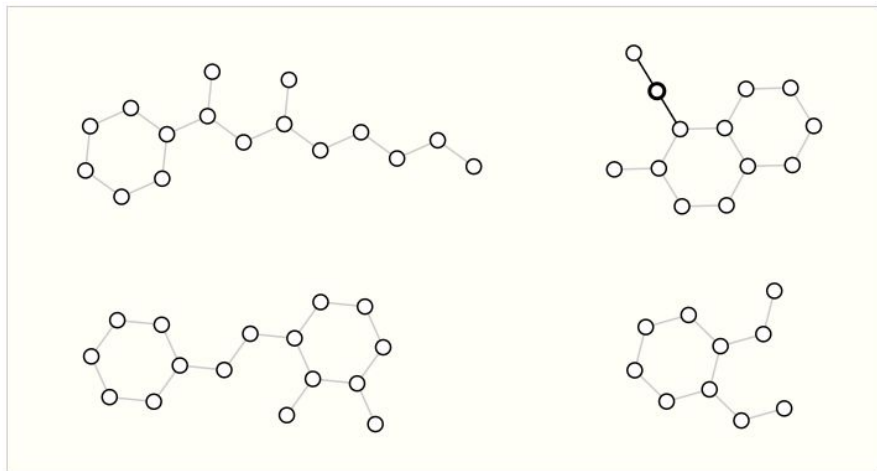
Imagen tomada de Wu, 2019.

Tipos generales de tareas de predicción

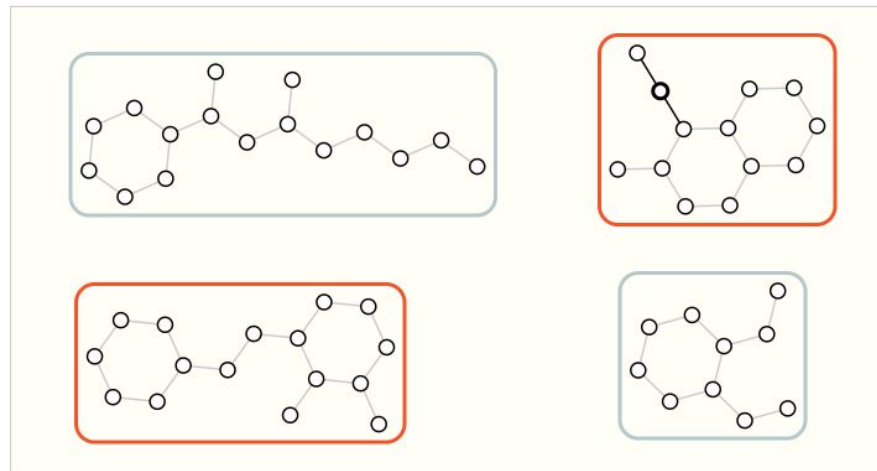
- A nivel de grafo
- A nivel nodo
- A nivel arista

A nivel de grafo

Objetivo: predecir una sola propiedad para un grafo completo.



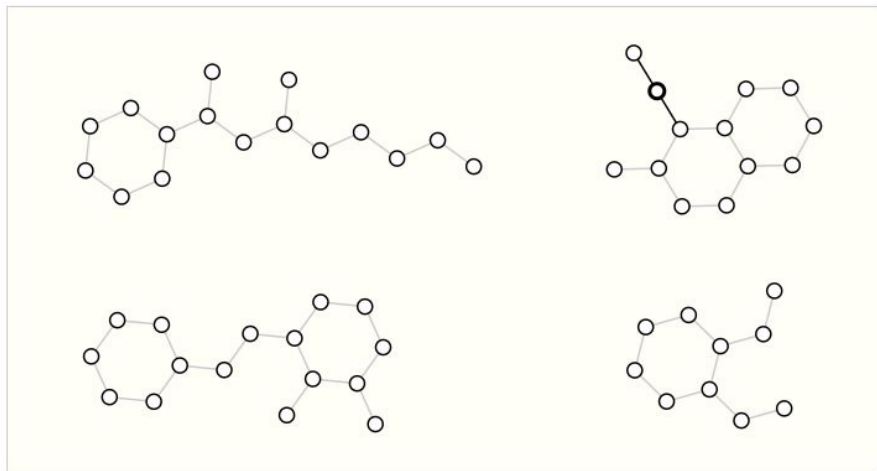
Input: graphs



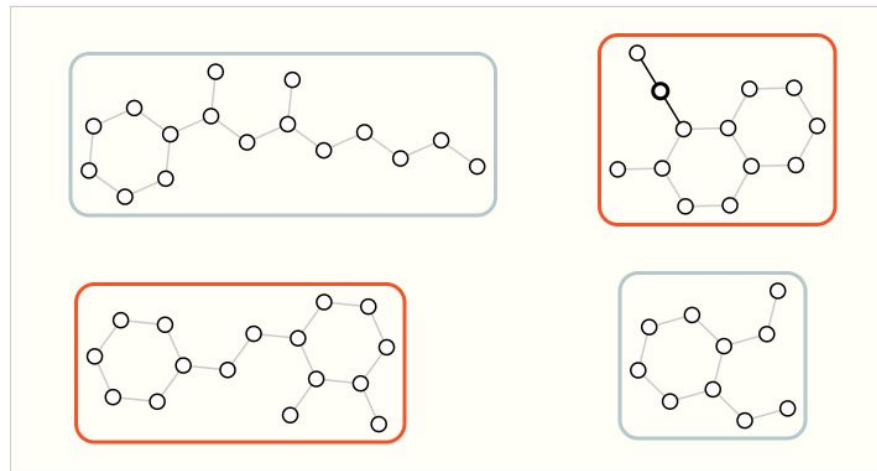
Output: labels for each graph, (e.g., "does the graph contain two rings?")

A nivel de grafo

Objetivo: predecir una sola propiedad para un grafo completo.



Input: graphs

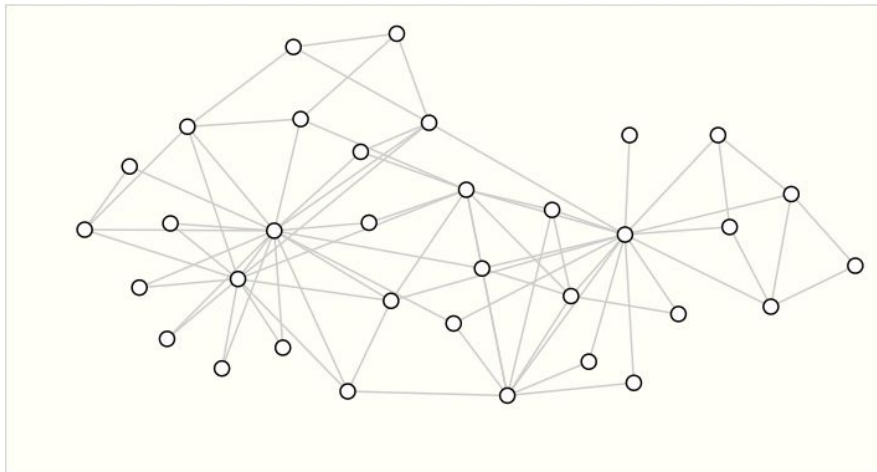


Output: labels for each graph, (e.g., "does the graph contain two rings?")

Analogía en problemas de clasificación de imágenes: asociar una etiqueta a una imagen completa.

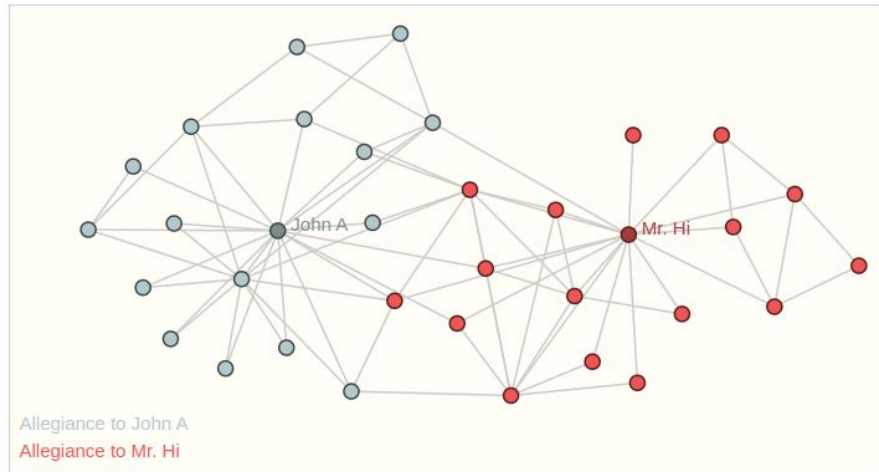
A nivel nodo

Objetivo: predecir la identidad / etiqueta de cada nodo dentro de un grafo.



Input: graph with unlabeled nodes

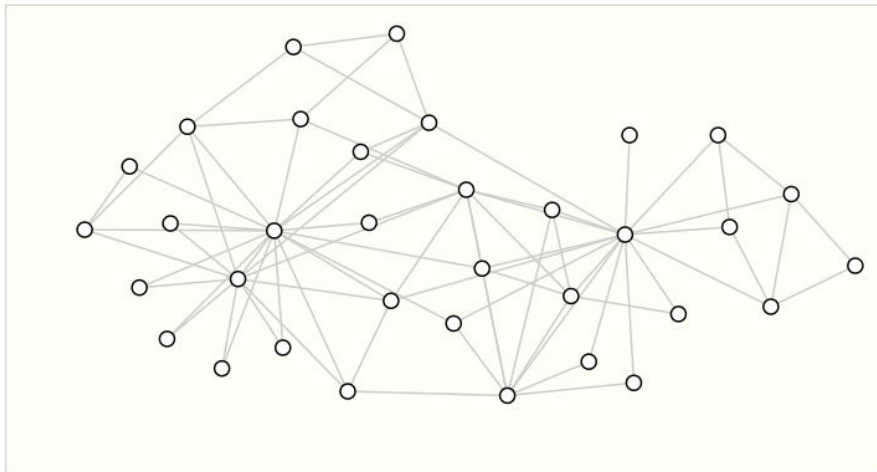
→



Output: graph node labels

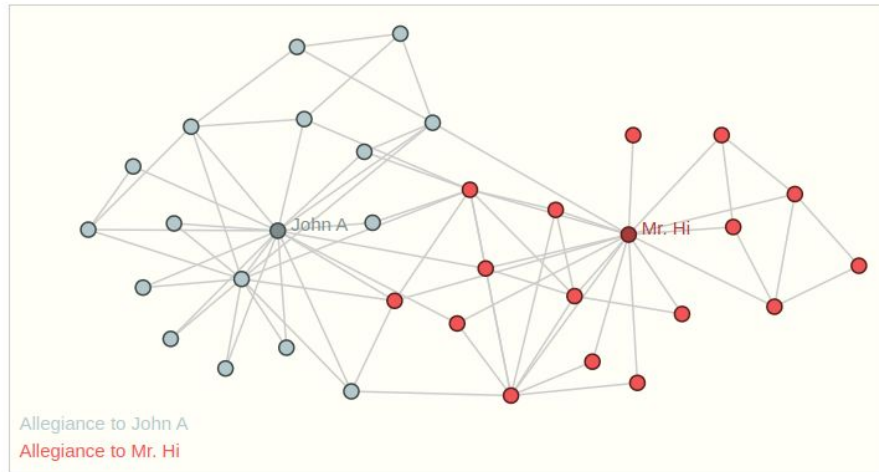
A nivel nodo

Objetivo: predecir la identidad / rol / etiqueta de cada nodo dentro de un grafo.



Input: graph with unlabeled nodes

→

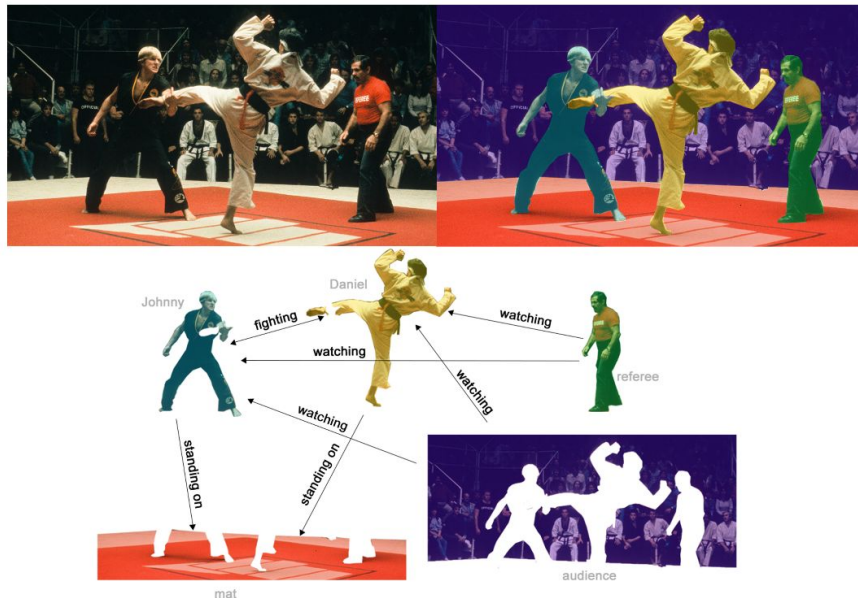


Output: graph node labels

Analogía con imágenes: realizar segmentación

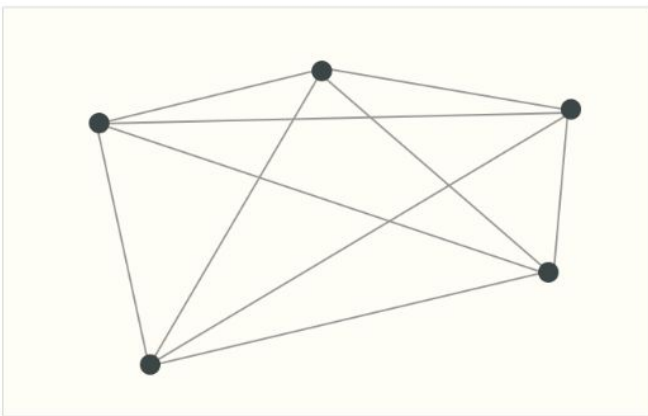
A nivel arista

Objetivo: predecir la propiedad o presencia de aristas en un gráfico.

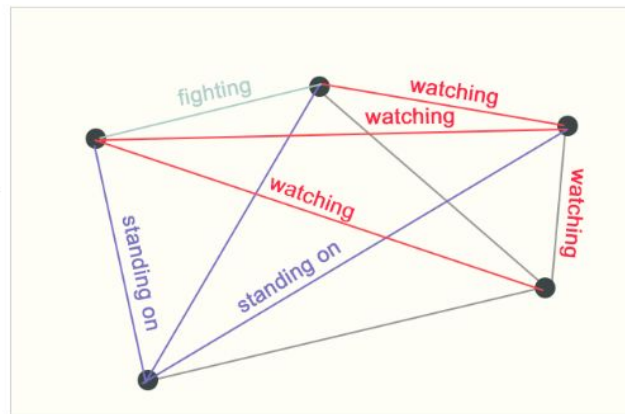


A nivel arista

Objetivo: predecir la propiedad o presencia de aristas en un gráfico.



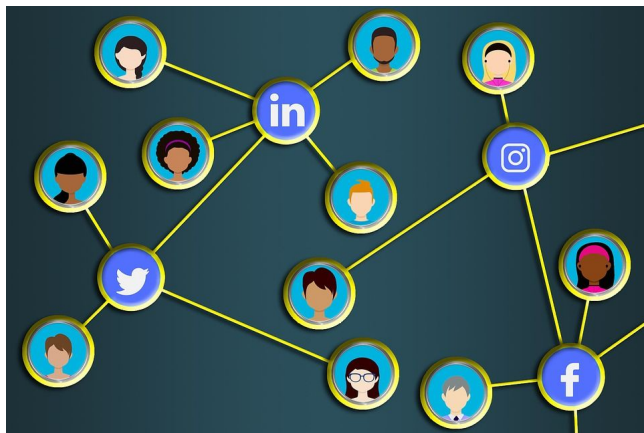
Input: fully connected graph, unlabeled edges



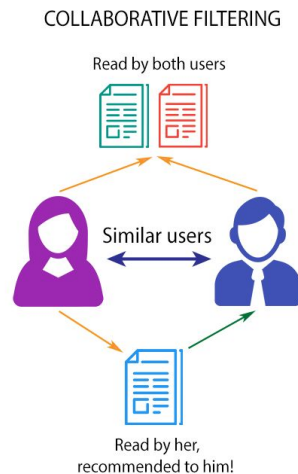
Output: labels for edges

¿Dónde se utilizan los grafos?

Los gráficos son excelentes para abordar problemas complejos de relaciones e interacciones.



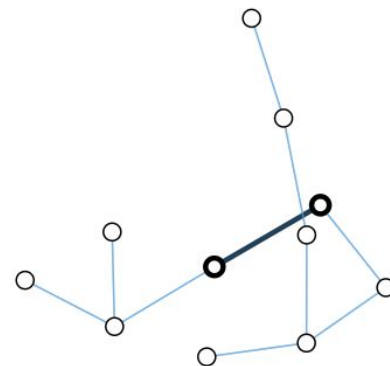
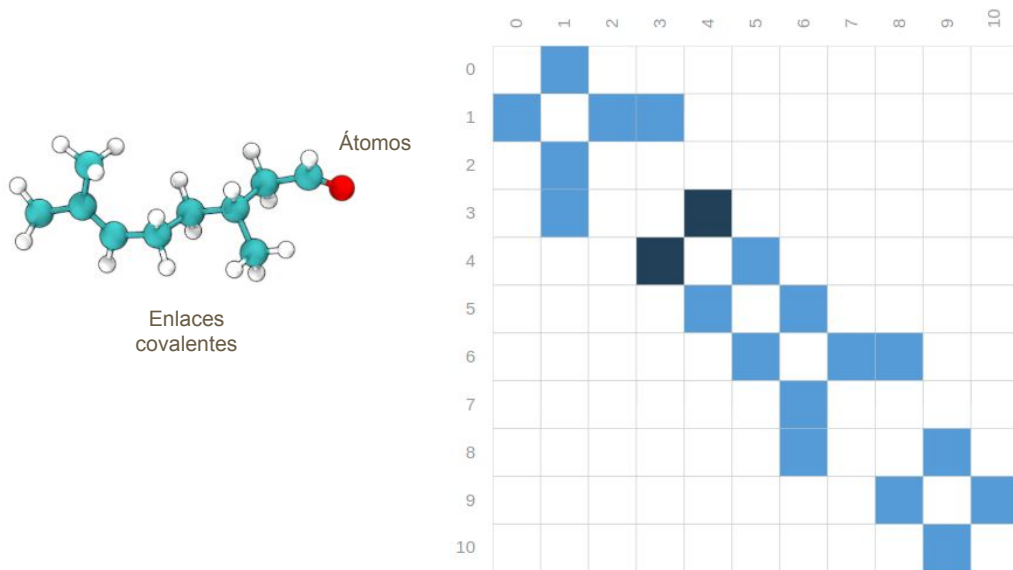
Social graph
Imagen tomada de Tabitha Njogu, 2022.



Sistemas de recomendación
Imagen tomada de Sanket Doshi, 2019.

- Moléculas
- Citaciones en artículos

Moléculas como grafos



(Izquierda) Representación 3D de la molécula de Citronelal. (Centro) Matriz de adyacencia de los enlaces en la molécula. (Derecha) Representación gráfica de la molécula.