



Aprendizaje a través de grafos: Graph Neural Networks (GNNs)

Camilo Chacón Sartori

24/febrero/2022

Meetup Python Chile

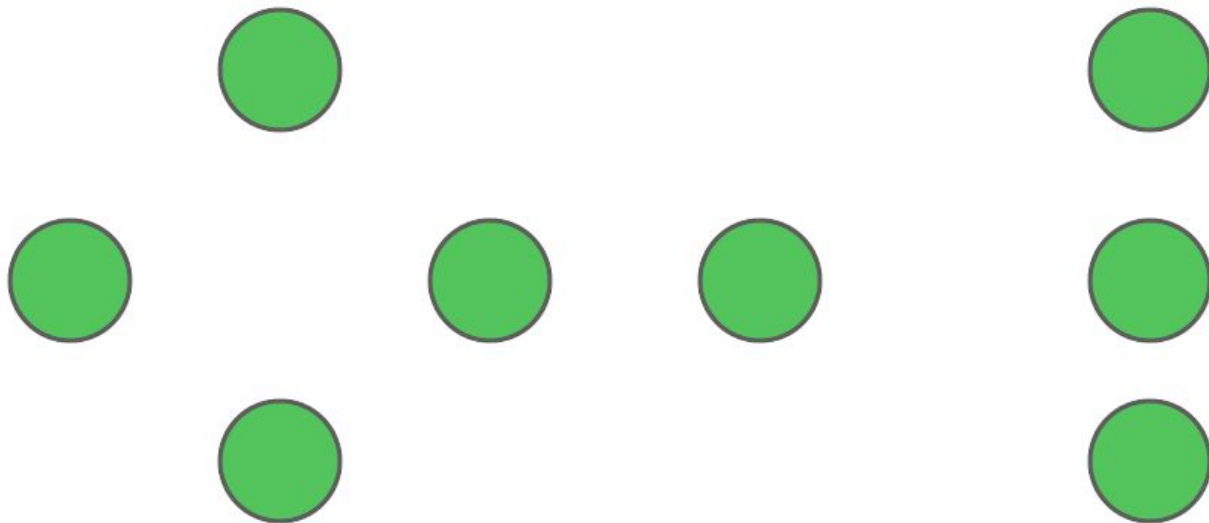


Objetivos de la charla

- Explicar de forma intuitiva las GNNs, evitando la teórica
- Dar algunos ejemplos prácticos de los problemas que se pueden resolver con GNNs
- Ver algo de código de Python + GNNs

¿Qué es un grafo?

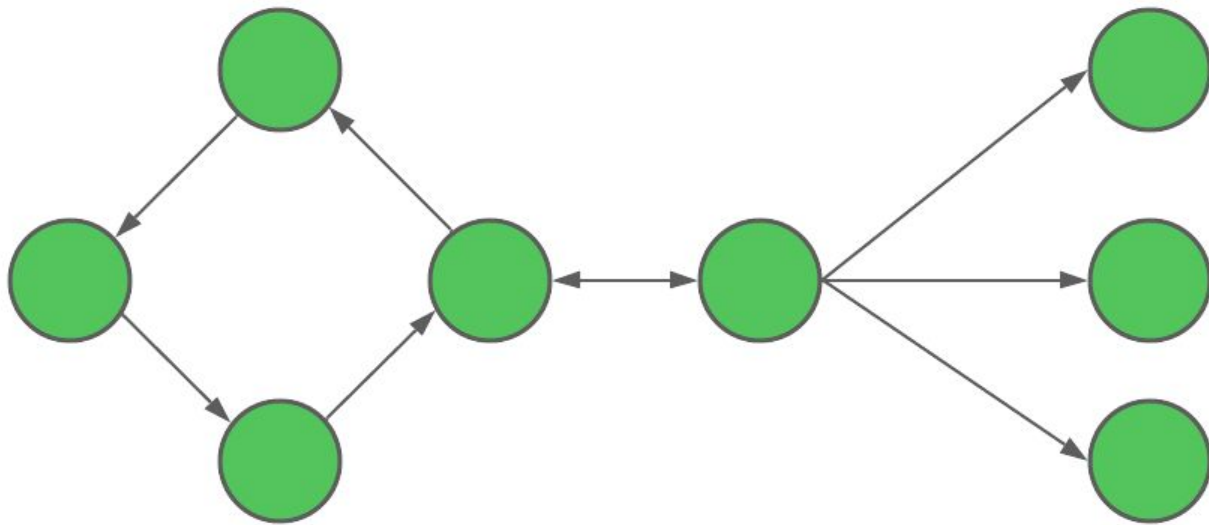
Nodos



¿Qué es un grafo?

Nodos

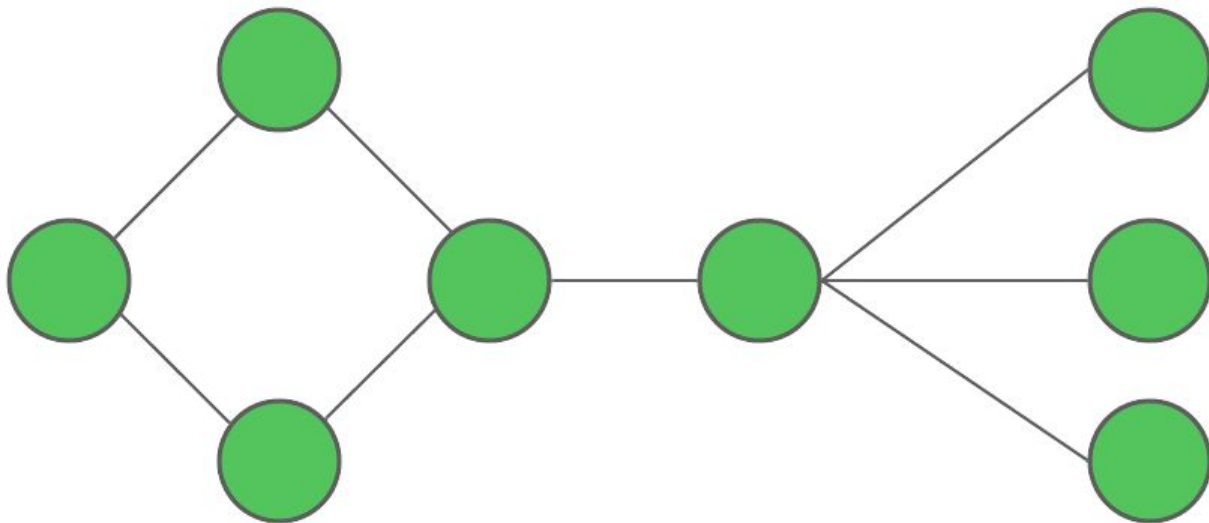
Aristas dirigidas



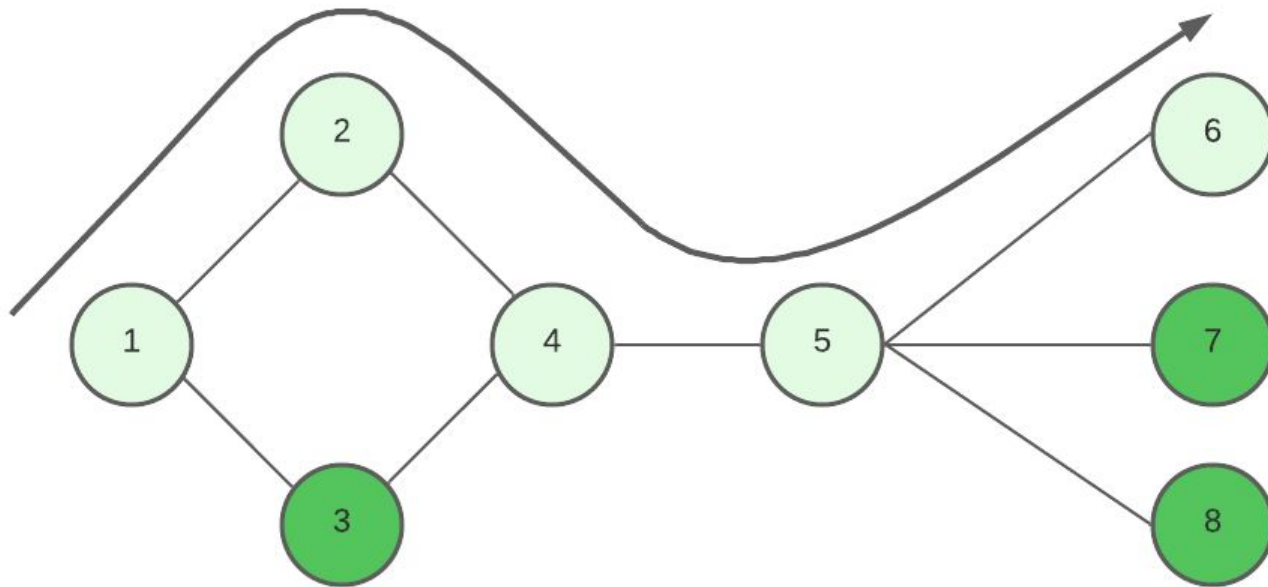
¿Qué es un grafo?

Nodos

Aristas no dirigidas

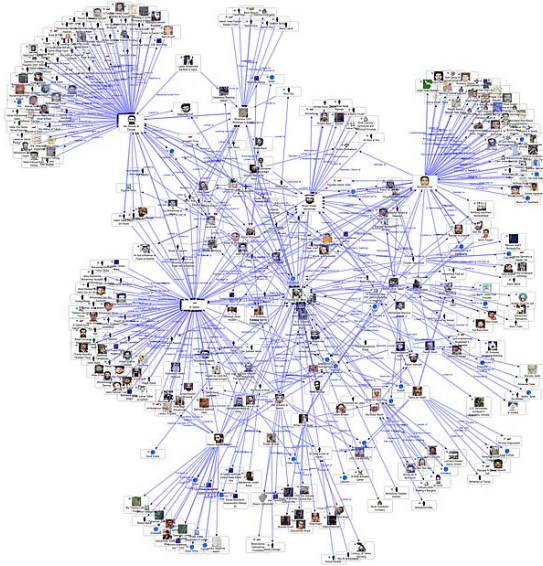


¿Qué es un grafo?

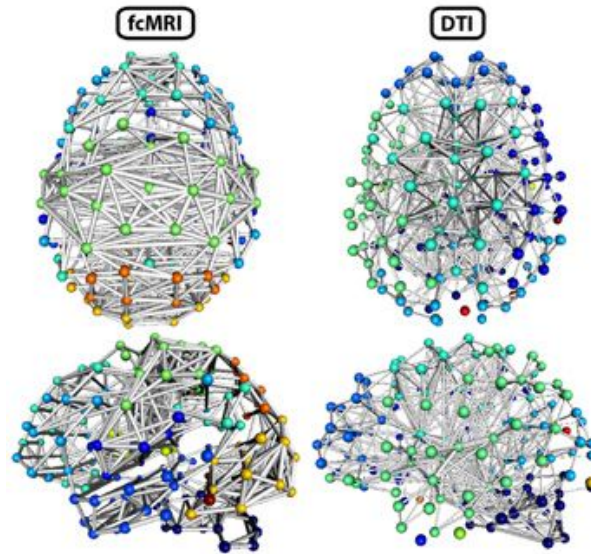


Algunos tipos de grafos

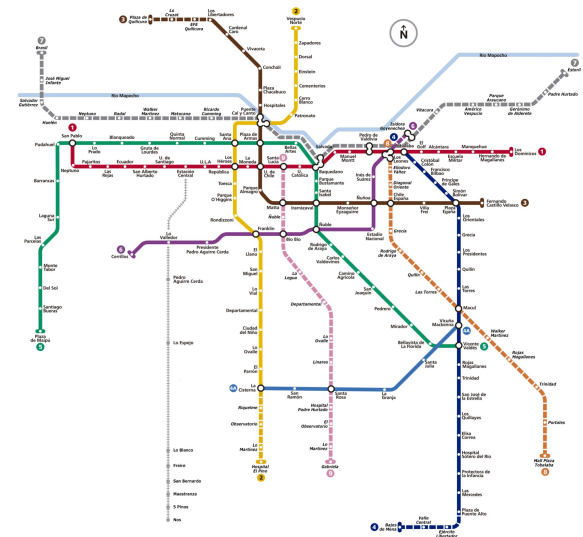
(A)



(B)



(C)



(A): <https://ismguide.com/leveraging-social-graph-tools-case-study/>

(B): <https://www.spectrumnews.org/news/toolbox/imaging-database-catalogs-brain-connectivity/>

(C): https://es.wikipedia.org/wiki/Archivo:Mapa_Metro_de_Santiago.png



¿Por qué usar grafos?

- Los grafos proveen una manera abstracta de modelar relaciones e interacciones
- Resolver problemas complejos con representaciones simples
- La teoría de grafo se ha utilizado en el análisis de redes sociales, sistemas anti fraudes, predicciones sobre el comportamiento del tráfico, etc.



Métodos tradicionales y sus limitaciones

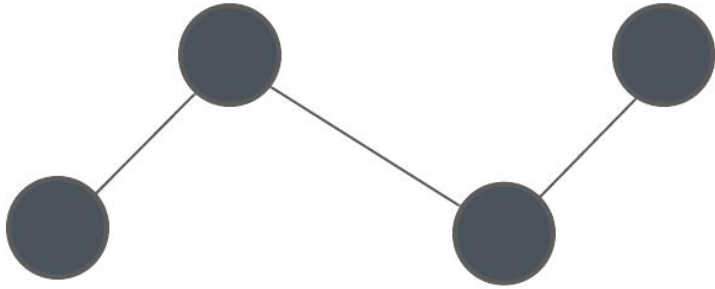
- Algoritmos de búsqueda: Breadth-first search (BFS), Deep-first search (DFS)
- Algoritmos de camino más corto: Dijkstra (1959), Bellman-Ford (1958), Yen (1971)
- Algoritmos de clustering: K-mean



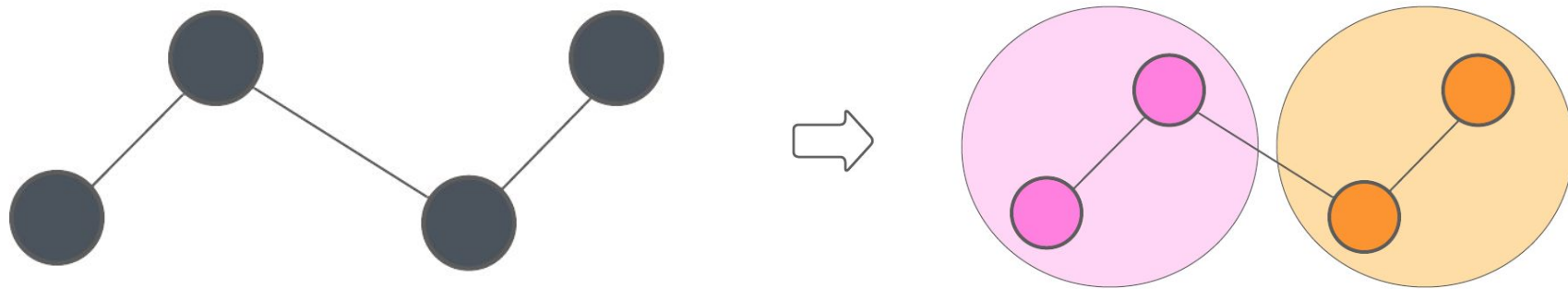
¿Qué es una Graph Neural Networks (GNNs)?

- Una red neuronal artificial que puede ser aplicada directamente a grafos
- ¿Problemas que pueden resolver las GNNs?
 - Clasificación de nodos
 - Predicción de aristas
 - Clasificación grafos

Clasificación de nodos



Clasificación de nodos



Clasificación de nodos

Zachary's karate club.

Desde el artículo: "An Information Flow Model for Conflict and Fission in Small Groups" by Wayne W. Zachary, 1977.

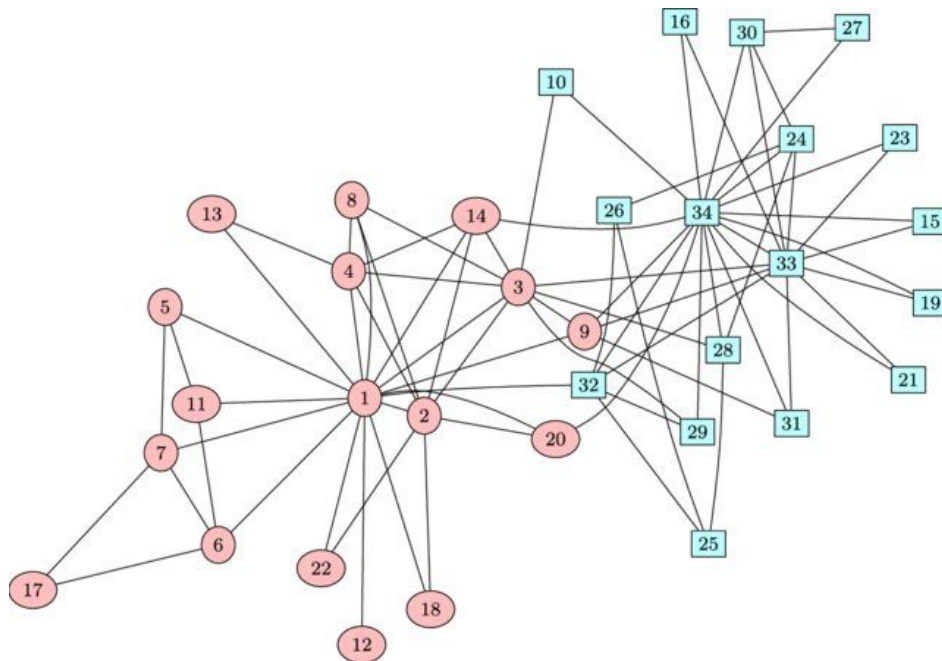
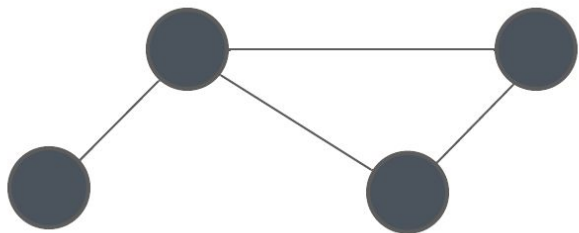


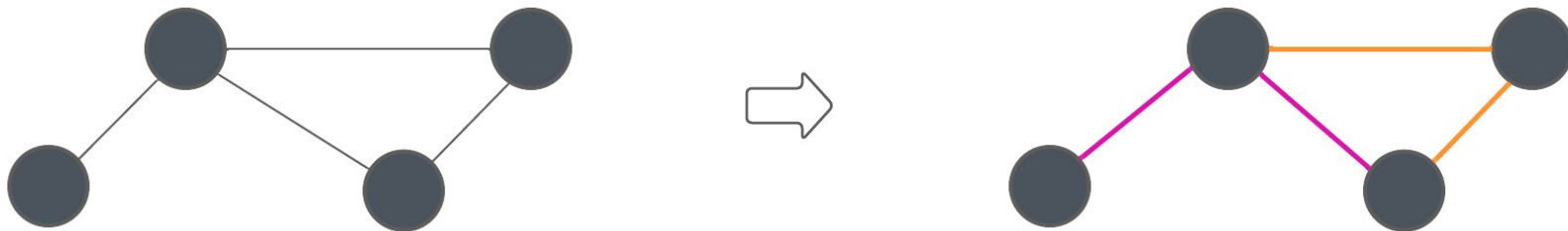
Imagen extraída:

https://www.researchgate.net/publication/236902276_Detection_of_structurally_homogeneous_subsets_in_graphs

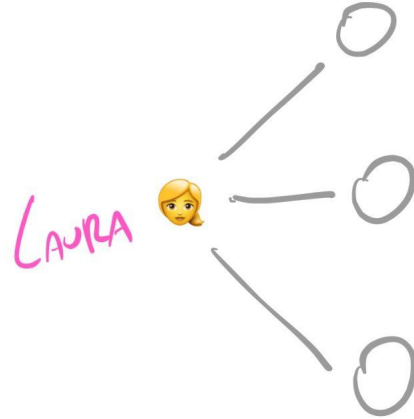
Predicción de aristas



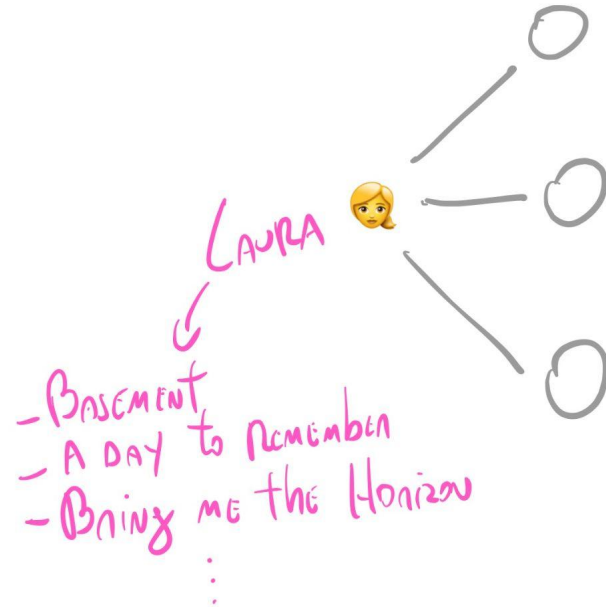
Predicción de aristas



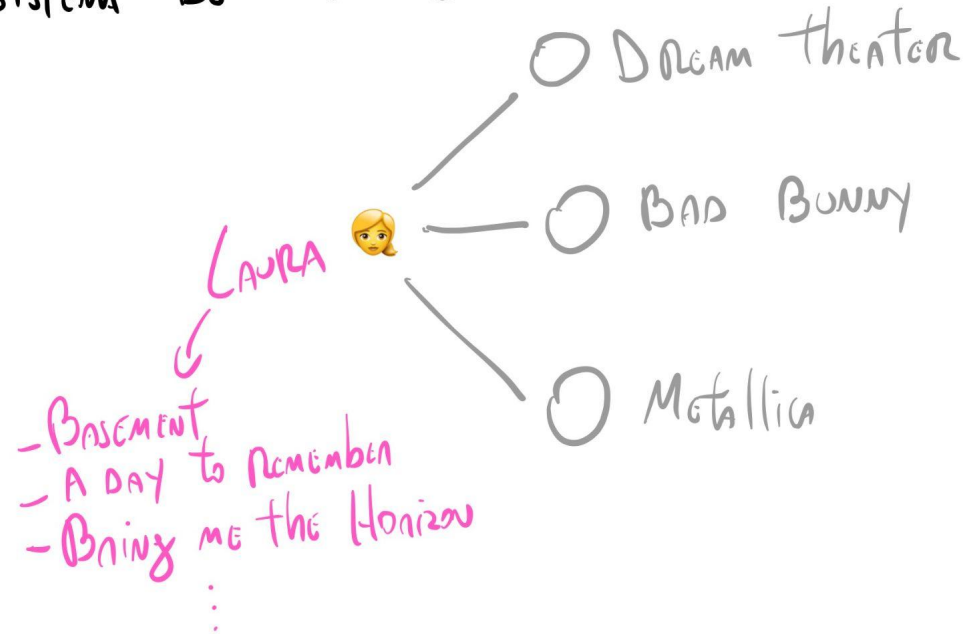
Sistema DE RECOMENDACIÓN DE MÚSICA



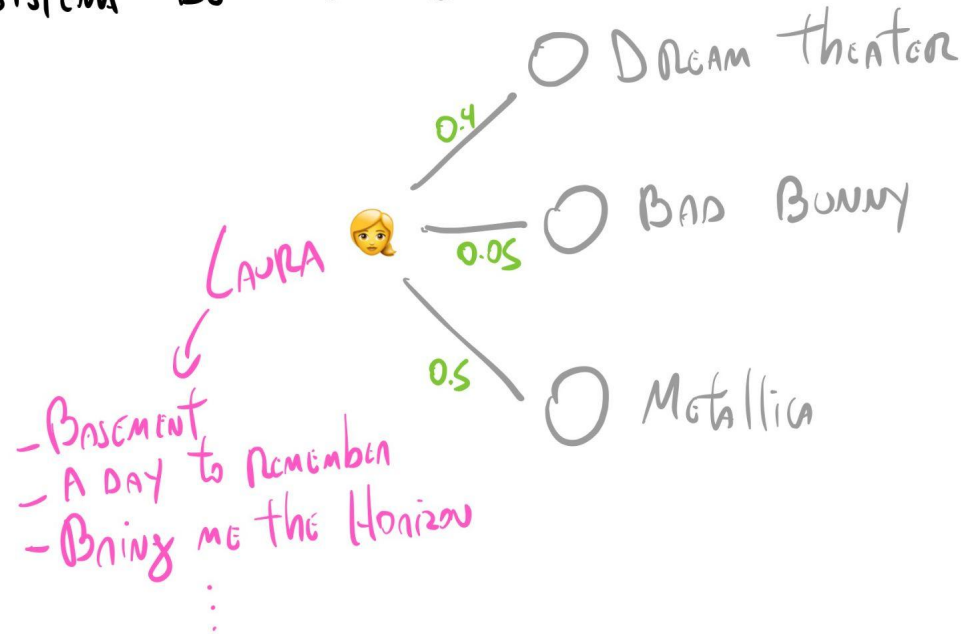
Sistema de Recomendación de Música



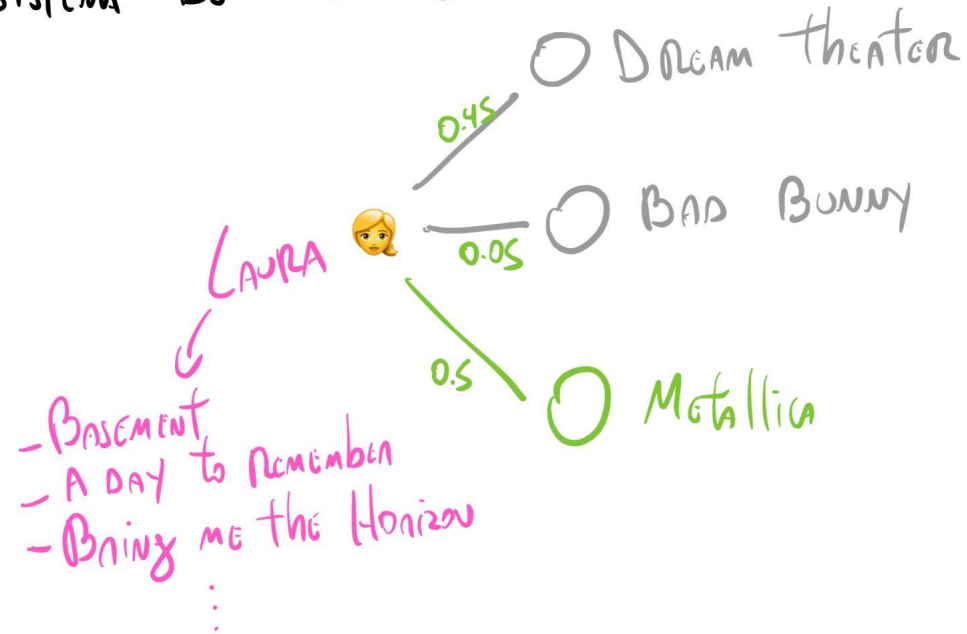
Sistema de Recomendación de Música



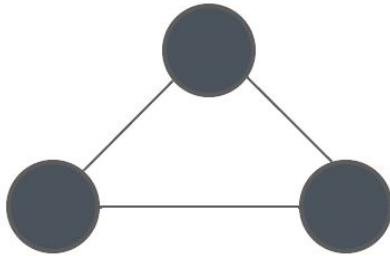
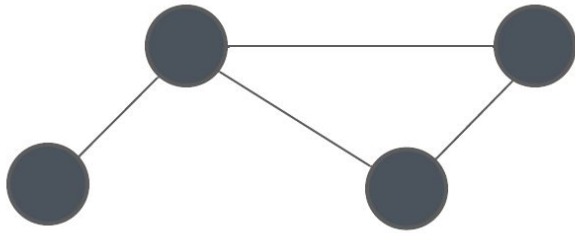
Sistema de Recomendación de Música



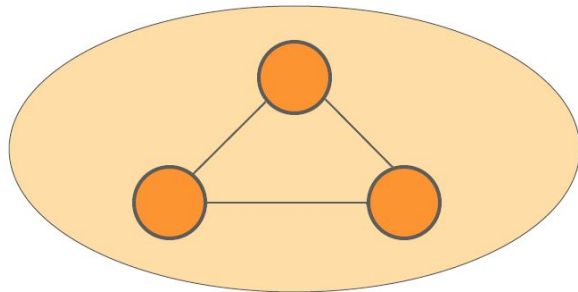
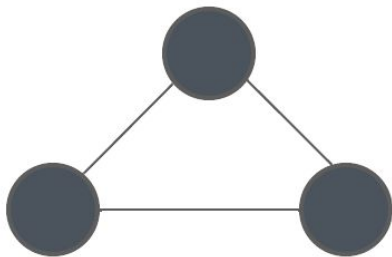
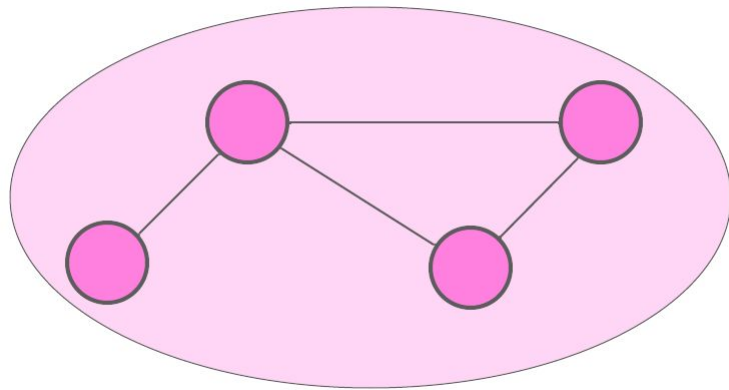
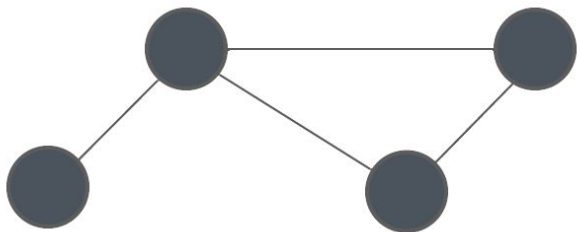
Sistema de Recomendación de Música

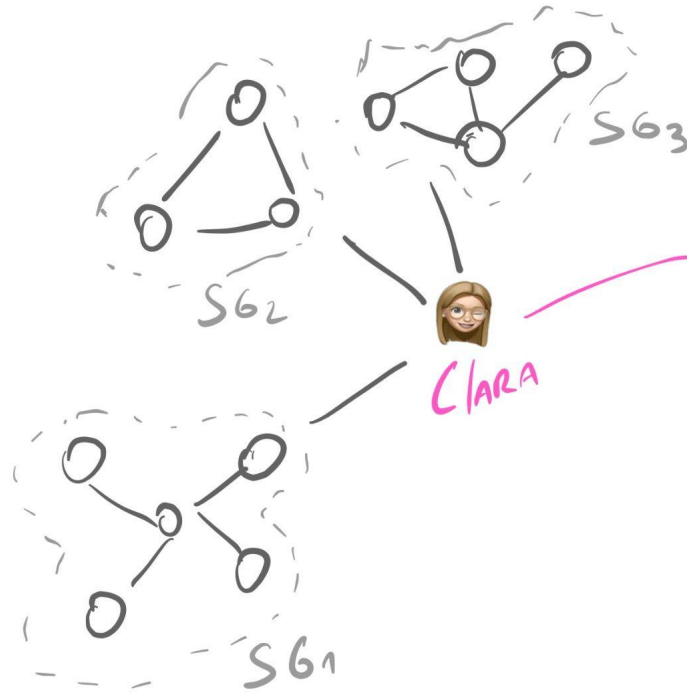


Clasificación de grafo

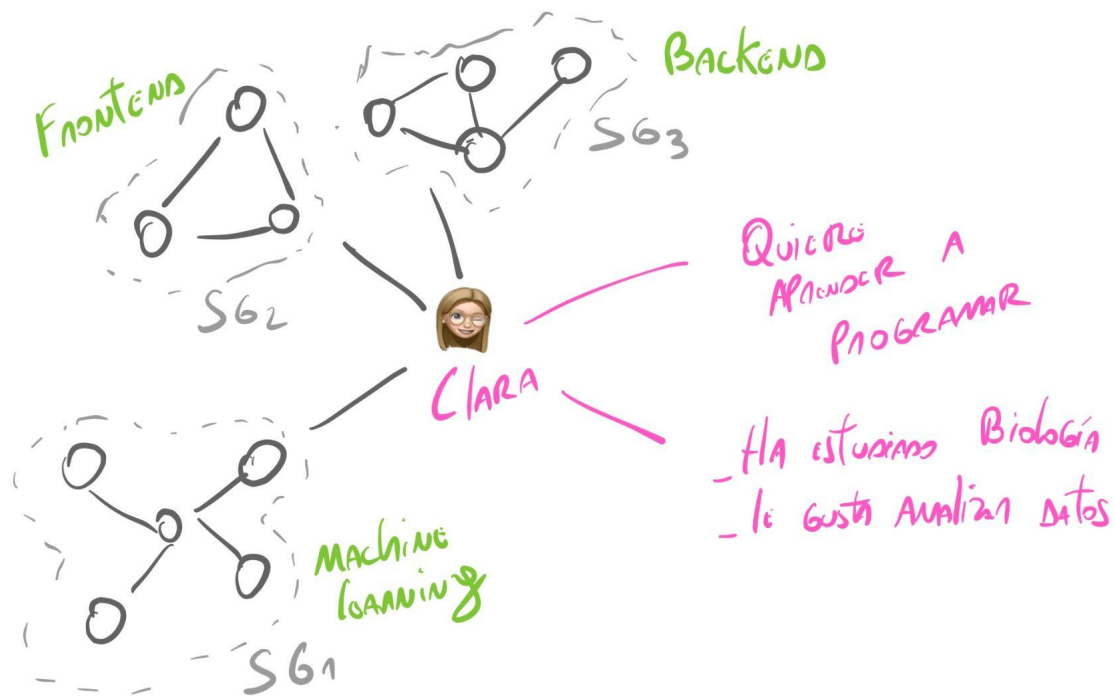


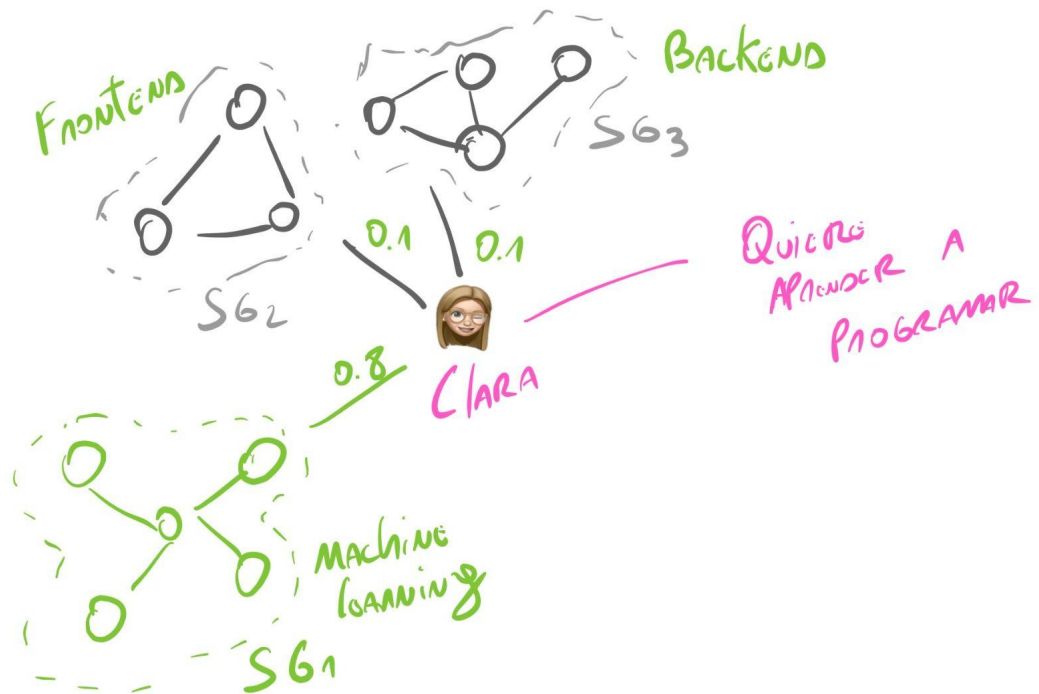
Clasificación de grafo



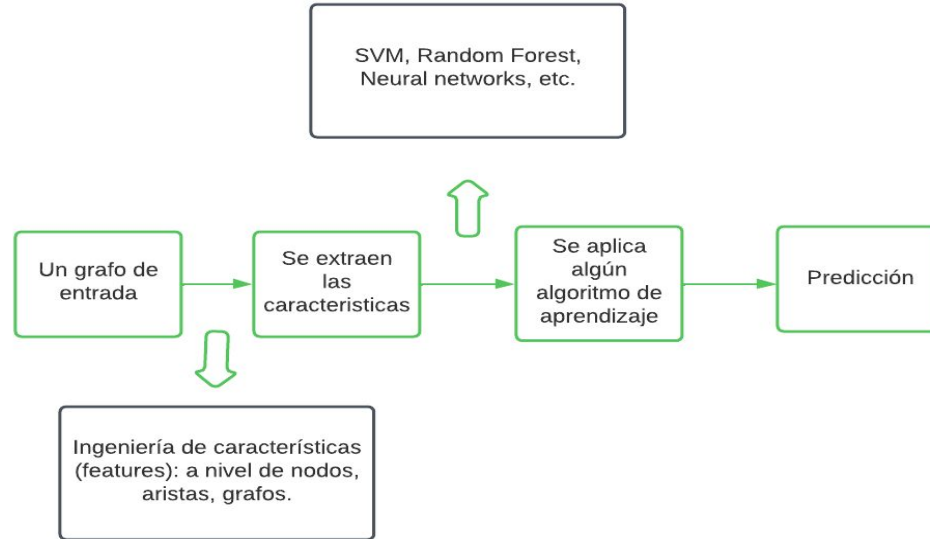


QUIERO
APRENDER A
PROGRAMAR

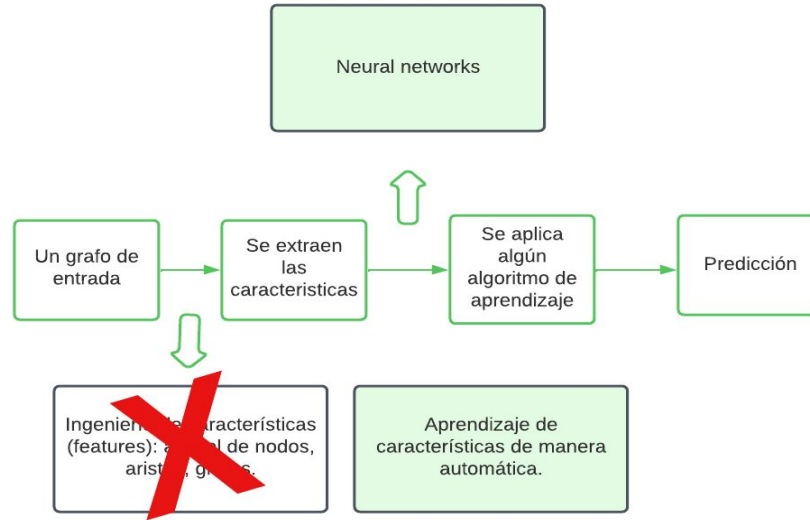




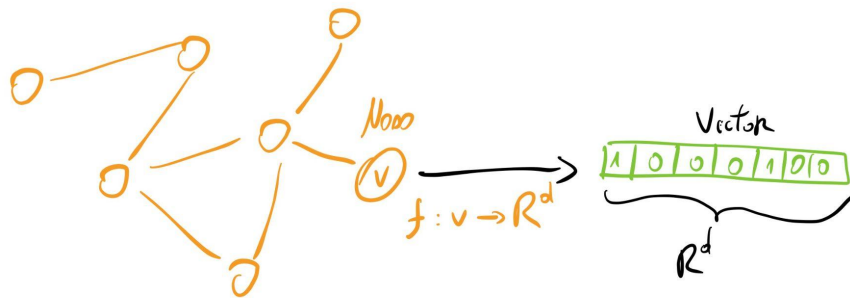
Método tradicional para aplicar ML sobre grafos



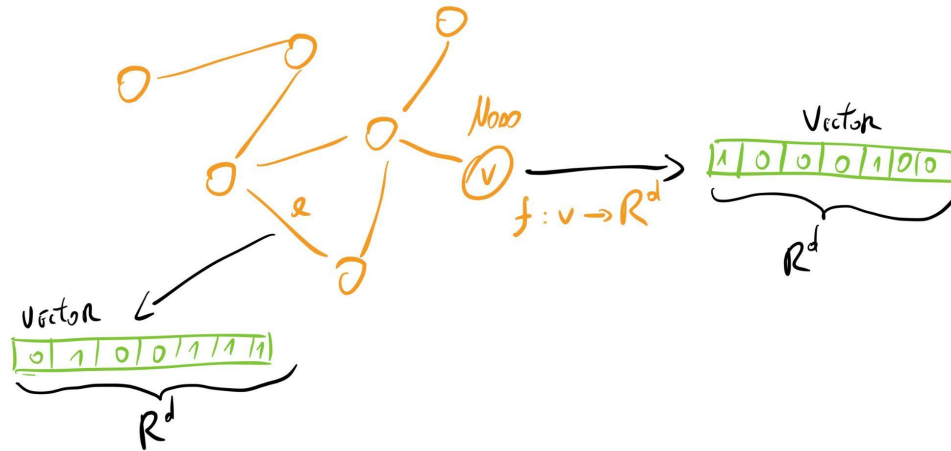
Método tradicional para aplicar ML sobre grafos



Nodes embedding (nodos embebidos)



Nodes embedding (nodos embebidos)





Algunas cuestiones finales

- La idea es detectar la similitud en los nodos y la estructura de la red
- El aprendizaje de los nodos embebidos es auto-supervisado o no supervisado
 - Porque no hay etiquetas (label) en los nodos
 - Porque no hay características (features) explícitas



Bibliotecas para trabajar con GNNs en Python

- DGL
- PyTorch
- NetworkX



Referencias

- <https://towardsdatascience.com/an-introduction-to-graph-neural-network-gnn-for-analysing-structured-data-afce79f4cfdc>
- CS224W: Machine Learning with Graphs | 2021 | Lecture 3.1 - Node Embeddings
<https://youtu.be/rMq21iY61SE>
- Libro: Graph Representation Learning, Hamilton, William.