

Graph Neural Networks and Graph Convolutional Networks

Carlos Puigserver Germán Llorente

November 19, 2023

Introducción

Las Graph Neural Networks (GNN) y las redes convolucionales gráficas (GCN) han emergido como herramientas poderosas en el campo del aprendizaje profundo, especialmente para modelar datos estructurados en forma de grafo.

Graph Neural Networks (GNN)

Las Graph Neural Networks son una clase de modelos de aprendizaje profundo diseñados para trabajar con datos estructurados en forma de gráficos. Un grafo en este contexto consiste en un conjunto de nodos (vértices) conectados por enlaces (aristas). Estos nodos y enlaces pueden representar entidades y relaciones en diversos dominios, como redes sociales, moléculas químicas, sistemas de recomendación, entre otros.

La idea central detrás de las GNN es que la información se propaga a través del grafo de manera iterativa, permitiendo que los nodos "aprendan" de sus vecinos. Este proceso se repite varias veces, permitiendo que la información se propague a través de la red de manera más amplia.

Redes Convolucionales Gráficas (GCN)

Las redes convolucionales gráficas (GCN) son un tipo específico de Graph Neural Networks que se inspiran en las convoluciones utilizadas en el procesamiento de imágenes. La singularidad de las GCN radica en su capacidad para realizar operaciones de convolución en datos estructurados de tipo gráfico.

En el contexto de GCN, consideremos un grafo $G = (V, E)$, donde V es el conjunto de nodos y E es el conjunto de enlaces. Cada nodo v_i en el grafo tiene una característica asociada x_i . La operación de convolución en GCN se expresa mediante la siguiente ecuación:

$$h_i^{(l+1)} = \sigma \left(\sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \frac{1}{c_{ij}} W^{(l)} h_j^{(l)} \right)$$

Donde:

- $h_i^{(l)}$ es la representación del nodo i en la capa l .
- $\mathcal{N}(i)$ es el conjunto de nodos vecinos de i .
- $W^{(l)}$ es la matriz de pesos asociada a la capa l .
- c_{ij} es una constante de normalización para compensar la variabilidad en el número de vecinos.
- σ es la función de activación.

Esta ecuación muestra cómo la representación de un nodo en una capa posterior ($l + 1$) se calcula sumando las representaciones de sus nodos vecinos ponderadas por los pesos $W^{(l)}$. Este proceso se repite en varias capas para permitir la propagación de información a través del grafo.

Regularización y Pooling en GCN

Para mejorar el rendimiento y la generalización de las redes convolucionales gráficas (GCN), se pueden aplicar técnicas de regularización y operaciones de pooling.

Regularización

- **Dropout en GCN:** Similar a las redes neuronales convencionales, se puede aplicar dropout en GCN para evitar el sobreajuste. El dropout se aplica durante el entrenamiento, donde aleatoriamente se desactivan nodos, ayudando a prevenir la dependencia excesiva de ciertos nodos durante la propagación de la información.

$$\tilde{A} = A + \epsilon I$$

$$D^{-\frac{1}{2}} \tilde{A} D^{-\frac{1}{2}} X W$$

Donde A es la matriz de adyacencia, D es la matriz diagonal de grados de los nodos, X es la matriz de características de los nodos, W es la matriz de pesos, e ϵ es un hiperparámetro pequeño para evitar la división por cero.

Pooling en GCN

- **Agregación de nodos:** GCN puede beneficiarse de operaciones de pooling para reducir el tamaño del grafo. Una técnica común es el pooling de agrupación (*Graph Pooling*), que reduce el número de nodos y sus conexiones al seleccionar subgrafos más representativos.

$$\text{Nodo Agrupado}_i = F \left(\sum_{j \in \text{Vecinos}(i)} \text{Nodo}_j \right)$$

Transfer Learning en GCN

Una técnica poderosa en GCN es el aprendizaje por transferencia (*transfer learning*). En lugar de entrenar un modelo desde cero, se pueden aprovechar los conocimientos aprendidos de un modelo preentrenado en un dominio relacionado. Esto es especialmente útil cuando los datos de entrenamiento son limitados.

Evaluación y Métricas en GCN

La evaluación de modelos GCN es crucial para comprender su rendimiento. Algunas métricas comunes incluyen la precisión, el recall y la F1-score. Además, en problemas de clasificación, la matriz de confusión proporciona información detallada sobre los aciertos y errores del modelo.

Aplicaciones Prácticas de GCN

Las redes convolucionales gráficas tienen aplicaciones prácticas en una variedad de campos:

- **Redes Sociales:** Para analizar la estructura de las relaciones en redes sociales y predecir conexiones futuras.
- **Química Computacional:** Para predecir propiedades moleculares y diseñar nuevos compuestos.
- **Recomendación:** En sistemas de recomendación para modelar interacciones entre usuarios y elementos recomendados.

En resumen, las Graph Neural Networks, y en particular las redes convolucionales gráficas, ofrecen un enfoque poderoso para modelar datos estructurados en forma de grafo. Su versatilidad y aplicaciones prácticas los convierten en herramientas clave en el aprendizaje profundo.