

# Глубинное обучение в анализе графовых данных

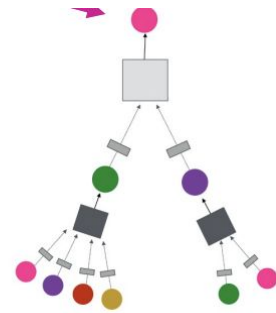
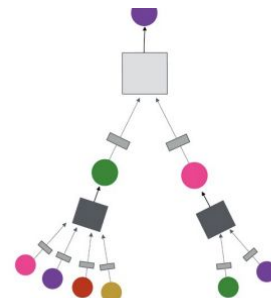
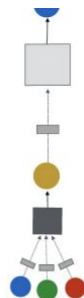
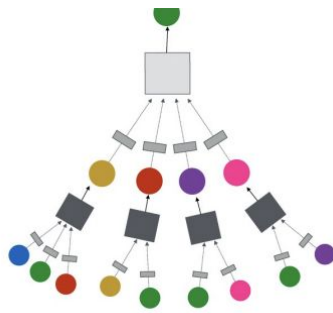
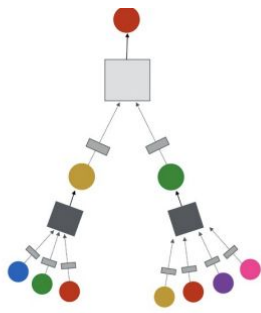
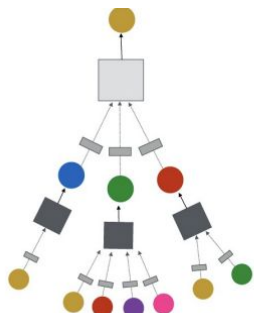
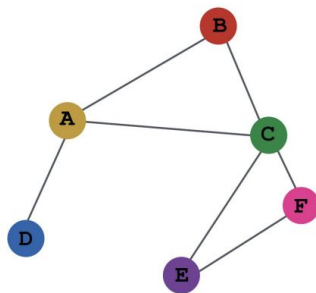
6. Архитектуры

в предыдущих сериях...

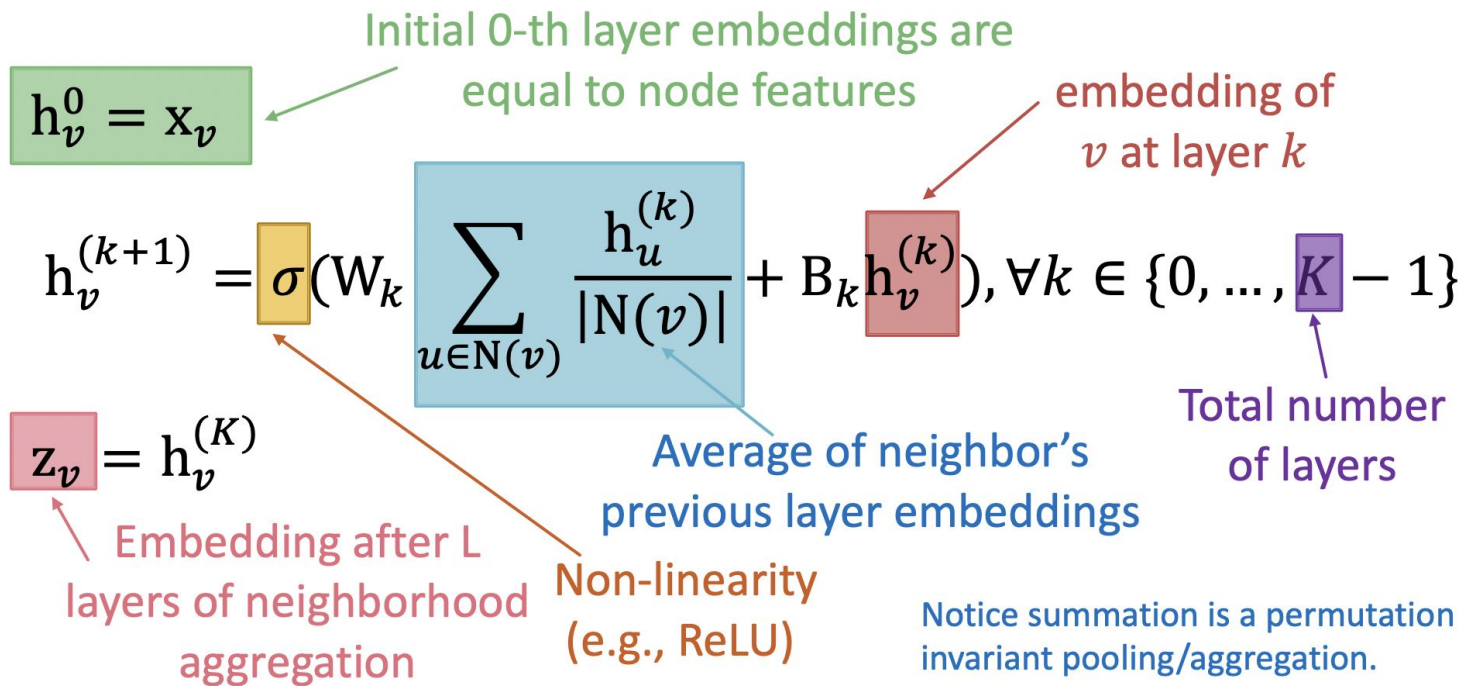
# Label Propagation

- передача информации в формате semi-supervised
- обновление состояний в каждой вершине без метки до сходимости
- сходимость не гарантирована

# Графовые свертки

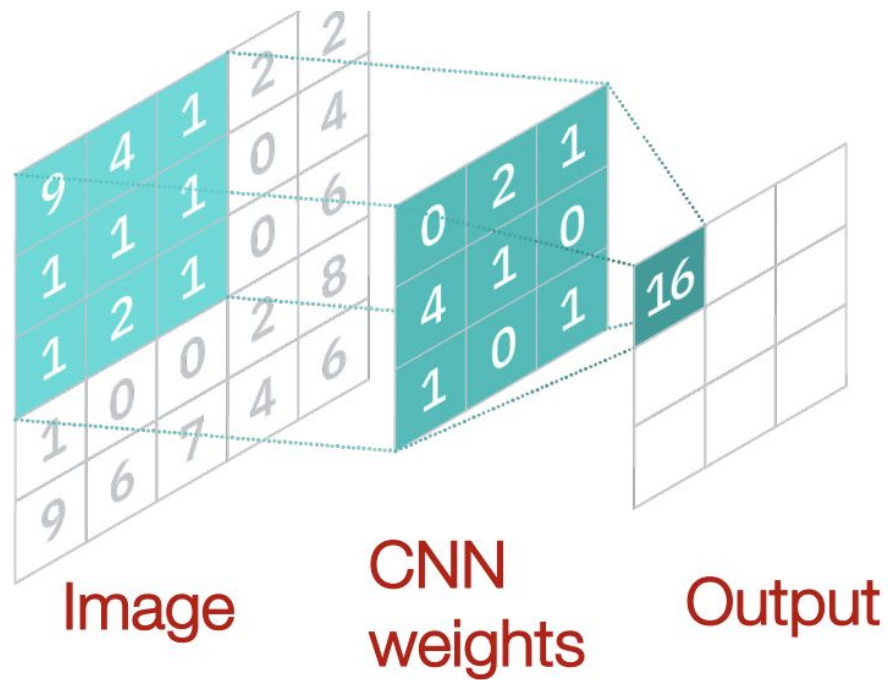
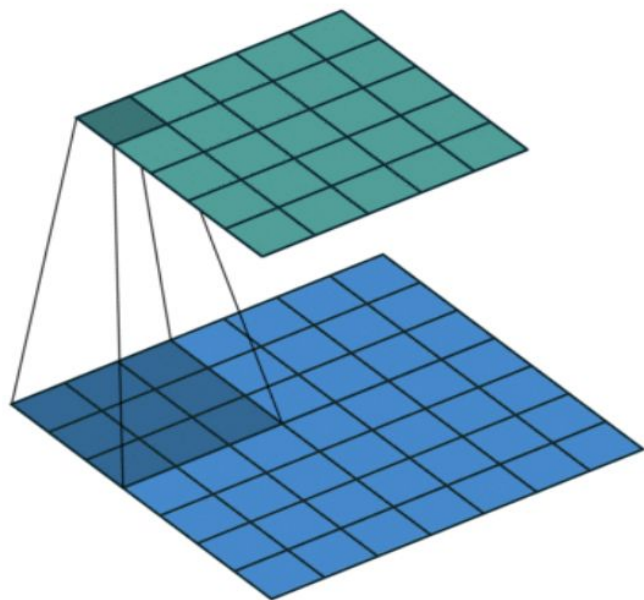


# Графовые свертки

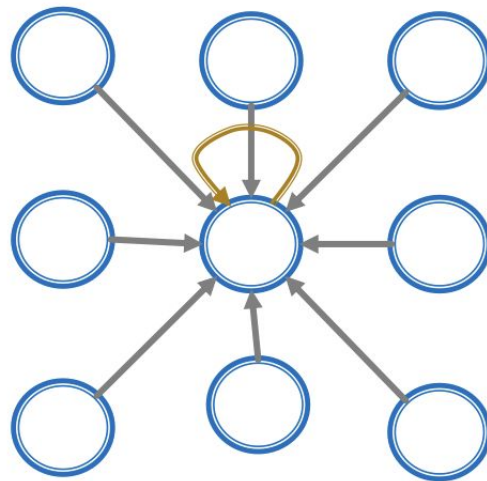
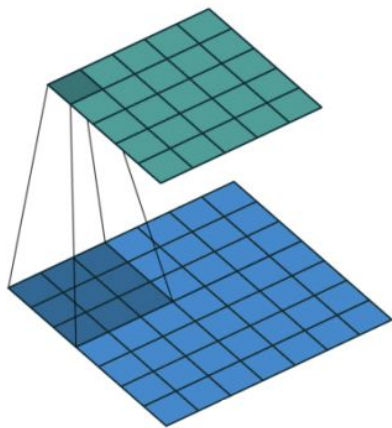


Архитектуры

# GNN/CNN



# GNN/CNN



$$h_v^{(l+1)} = \sigma(\sum_{u \in N(v) \cup \{v\}} W_l^u h_u^{(l)}), \forall l \in \{0, \dots, L-1\}$$

$$h_v^{(l+1)} = \sigma(\sum_{u \in N(v)} \mathbf{W}_l^u h_u^{(l)} + B_l h_v^{(l)}), \forall l \in \{0, \dots, L-1\}$$



# GNN/CNN

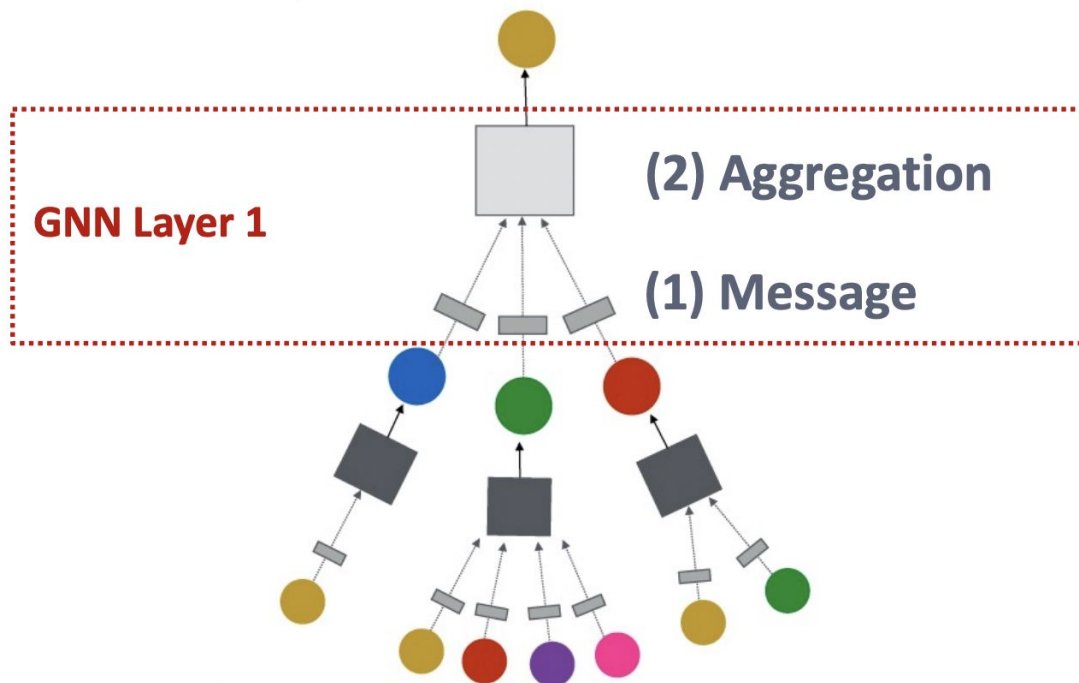
$$\text{GNN formulation: } \mathbf{h}_v^{(l+1)} = \sigma(\mathbf{W}_l \sum_{u \in \mathbf{N}(v)} \frac{\mathbf{h}_u^{(l)}}{|\mathbf{N}(v)|} + \mathbf{B}_l \mathbf{h}_v^{(l)}), \forall l \in \{0, \dots, L-1\}$$

$$\text{CNN formulation: } \mathbf{h}_v^{(l+1)} = \sigma(\sum_{u \in \mathbf{N}(v)} \mathbf{W}_l^u \mathbf{h}_u^{(l)} + \mathbf{B}_l \mathbf{h}_v^{(l)}), \forall l \in \{0, \dots, L-1\}$$

# GNN/Transformer

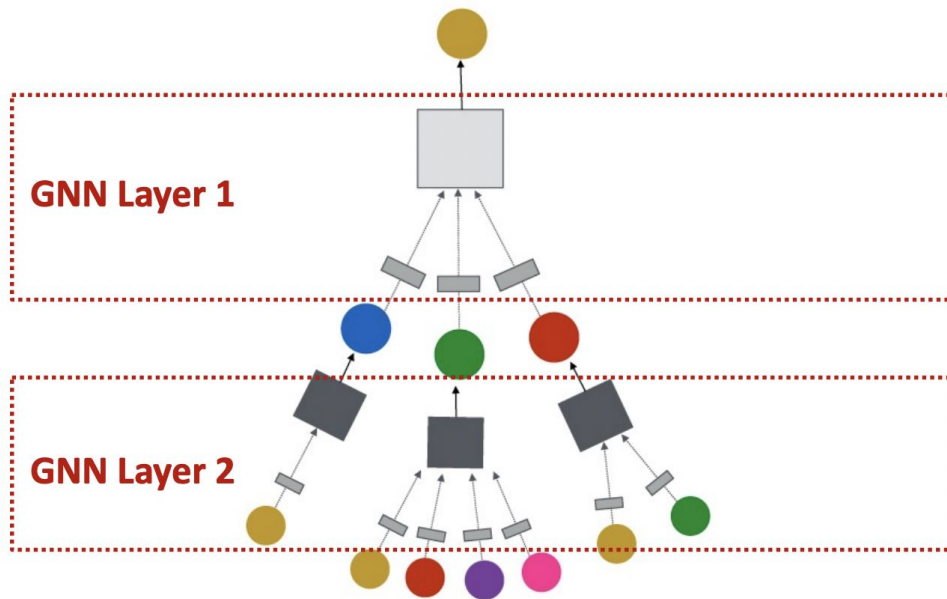
- полносвязный граф текста

# Части GNN



# Части GNN

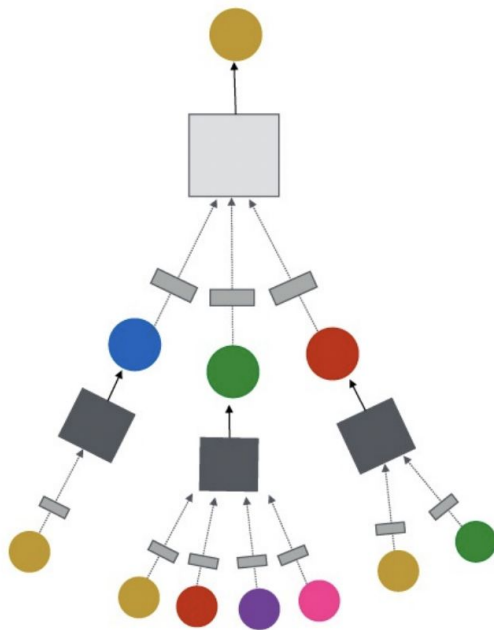
## 3) Связь слоев



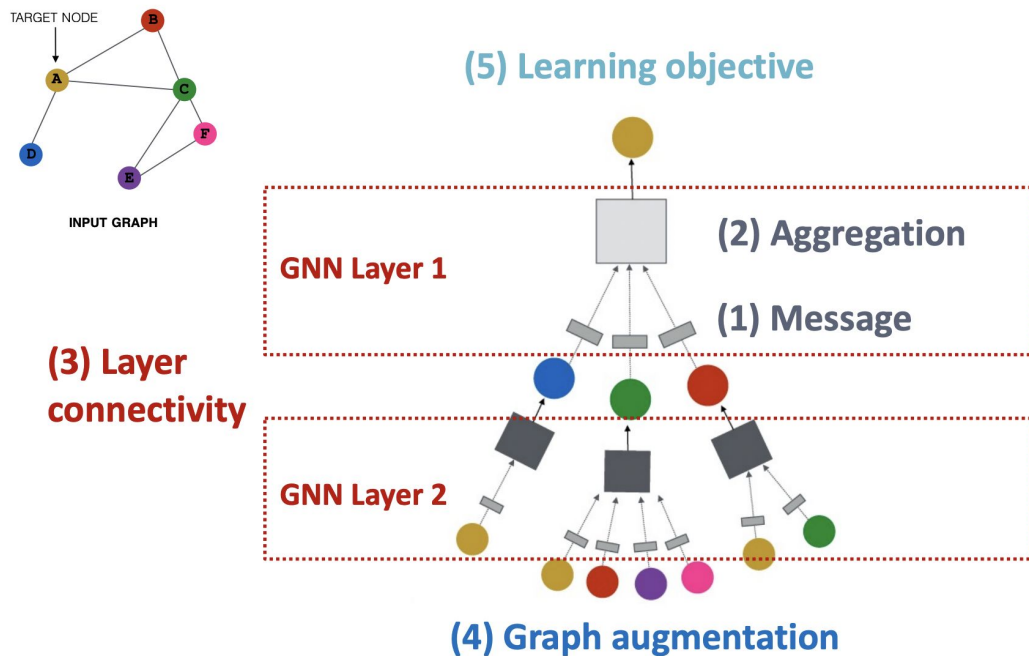
# Части GNN

4) Аугментация

5) Задача



# Части GNN



## Вычисление сообщения

1)

$$\mathbf{m}_u^{(l)} = \text{MSG}^{(l)} \left( \mathbf{h}_u^{(l-1)} \right)$$

## Агрегация

2)





$$\mathbf{h}_v^{(l)} = \text{AGG}^{(l)} \left( \left\{ \mathbf{m}_u^{(l)}, u \in N(v) \right\} \right)$$



# Проблемы с первыми двумя шагами

Информация, которая содержится в самой вершине может потеряться

Надо ее не забыть

1)     $\mathbf{m}_u^{(l)} = \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_u^{(l-1)}$    $\mathbf{m}_v^{(l)} = \mathbf{B}^{(l)} \mathbf{h}_v^{(l-1)}$

2)  $\mathbf{h}_v^{(l)} = \text{CONCAT} \left( \text{AGG} \left( \left\{ \mathbf{m}_u^{(l)}, u \in N(v) \right\} \right), \mathbf{m}_v^{(l)} \right)$

Then aggregate from node itself

First aggregate from neighbors

# GCN

$$\mathbf{h}_v^{(l)} = \sigma \left( \mathbf{W}^{(l)} \sum_{u \in N(v)} \frac{\mathbf{h}_u^{(l-1)}}{|N(v)|} \right)$$

$$\mathbf{h}_v^{(l)} = \sigma \left( \underbrace{\sum_{u \in N(v)}}_{\text{Aggregation}} \underbrace{\mathbf{W}^{(l)} \frac{\mathbf{h}_u^{(l-1)}}{|N(v)|}}_{\text{Message}} \right)$$

$$1) \quad \mathbf{m}_u^{(l)} = \frac{1}{|N(v)|} \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_u^{(l-1)}$$

$$2) \quad \mathbf{h}_v^{(l)} = \sigma \left( \text{Sum} \left( \left\{ \mathbf{m}_u^{(l)}, u \in N(v) \right\} \right) \right)$$

# GraphSage

$$\mathbf{h}_v^{(l)} = \sigma \left( \mathbf{W}^{(l)} \cdot \text{CONCAT} \left( \mathbf{h}_v^{(l-1)}, \text{AGG} \left( \left\{ \mathbf{h}_u^{(l-1)}, \forall u \in N(v) \right\} \right) \right) \right)$$

1) - внутри AGG

2)  $\mathbf{h}_{N(v)}^{(l)} \leftarrow \text{AGG} \left( \left\{ \mathbf{h}_u^{(l-1)}, \forall u \in N(v) \right\} \right)$

$$\mathbf{h}_v^{(l)} \leftarrow \sigma \left( \mathbf{W}^{(l)} \cdot \text{CONCAT}(\mathbf{h}_v^{(l-1)}, \mathbf{h}_{N(v)}^{(l)}) \right)$$

# GraphSage AGG

$$\text{AGG} = \sum_{u \in N(v)} \frac{\mathbf{h}_u^{(l-1)}}{|N(v)|}$$

**Aggregation** **Message computation**

$$\text{AGG} = \text{Mean}(\{\text{MLP}(\mathbf{h}_u^{(l-1)}), \forall u \in N(v)\})$$

**Aggregation** **Message computation**

$$\text{AGG} = \text{LSTM}([\mathbf{h}_u^{(l-1)}, \forall u \in \pi(N(v))])$$

**Aggregation**

## L2 нормализация

$$\mathbf{h}_v^{(l)} \leftarrow \frac{\mathbf{h}_v^{(l)}}{\|\mathbf{h}_v^{(l)}\|_2} \quad \forall v \in V \text{ where } \|u\|_2 = \sqrt{\sum_i u_i^2} \text{ } (\ell_2\text{-norm})$$

# GAT

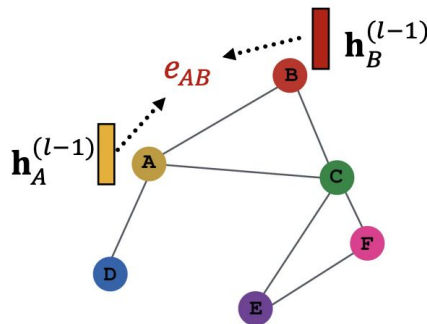
$$\mathbf{h}_v^{(l)} = \sigma\left(\sum_{u \in N(v)} \alpha_{vu} \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_u^{(l-1)}\right)$$

Attention weights

- в GCN/GraphSage  $\alpha_{vu}$  -  $\alpha_{vu} = \frac{1}{|N(v)|}$
- проблема - все вершины одинаково важны

## Подсчет внимания

$$e_{vu} = a(\mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_u^{(l-1)}, \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_v^{(l-1)})$$



$$e_{AB} = a(\mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_A^{(l-1)}, \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_B^{(l-1)})$$

## Подсчет внимания

$$\alpha_{vu} = \frac{\exp(e_{vu})}{\sum_{k \in N(v)} \exp(e_{vk})}$$

- **Weighted sum** based on the **final attention weight**

$\alpha_{vu}$

$$\mathbf{h}_v^{(l)} = \sigma(\sum_{u \in N(v)} \alpha_{vu} \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_u^{(l-1)})$$

Weighted sum using  $\alpha_{AB}$ ,  $\alpha_{AC}$ ,  $\alpha_{AD}$ :

$$\mathbf{h}_A^{(l)} = \sigma(\alpha_{AB} \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_B^{(l-1)} + \alpha_{AC} \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_C^{(l-1)} + \alpha_{AD} \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_D^{(l-1)})$$

