

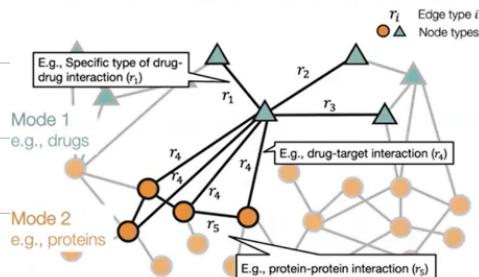
GNNs for Biology

生物网络(Biological Networks)面临的挑战:

- 异质相互作用
- 多来源的数据
- 大量噪声及测量平台的局限

1. Safe drugs and drug combinations

Decagon 在一个多药联用的知识图谱上定义。图中包含表示药物和蛋白质的不同类型的节点及表示不同类型互作的边。

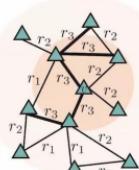


Decagon 包含编码器(生成节点嵌入)和解码器(由嵌入信息预测药物人间的互作类型)。

通过常规的异质图消息传递进行

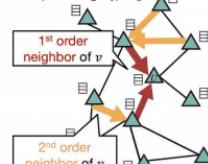
特征更新

1) Determine a node's computation graph for each edge type



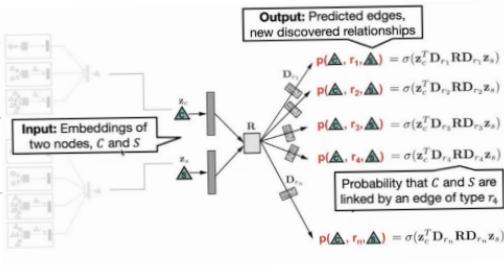
2) Learn how to transform and propagate information across computation graph

Example for edge type r_3 :

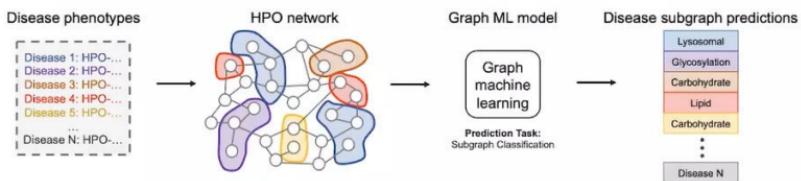


(Encoder)

日期:



2. Patient outcomes and disease classification



在由疾病表型构成的图中进行子图级别的任务。

子图嵌入不能通过对子图中节点的嵌入进行简单聚合实现：

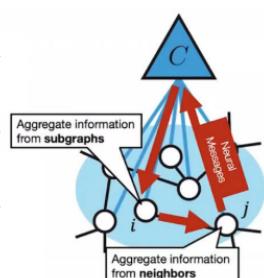
- 无法有效表示子图大小
- 无法表示丰富的连接模式
- 无法表示子图节点在图中的分布

[SubGNN]

#1 Subgraph Message Passing:

- 属性 x 的信息 m_x 由锚点补丁 (anchor patches) 传递到子图

- 锚点补丁是一系列采样自 G 的子图，补丁 A_p, A_n, A_s 分别捕捉位置、邻居及结构信息



日期:

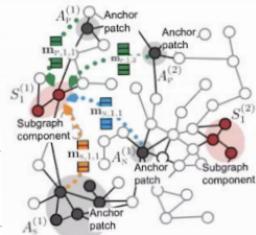
锚点补丁与子图组件的相似性函数,用于提供权重

$$MSG_x^{A \rightarrow S} = \gamma_x(S^{(c)}, A_x) \cdot a_x$$

$$g_{x,c} = AGG_M(\{MSG_x^{A \rightarrow S^{(c)}} \mid A \in A_x\})$$

$$h_{x,c} \leftarrow \sigma(W_x \cdot [g_{x,c}; h_{x,c}])$$

X性质特异的表征



#2 Property-aware Routing

· 对于每个性质 X (位置,邻居,结构) 的通道,有3个关键组件

① 相似性函数 $\gamma_x : (S^{(c)}, A_x) \rightarrow [0, 1]$

② 锚点补丁采样函数: $\varphi_x : (G, S^{(c)}) \rightarrow A_x$

③ 锚点补丁编码器: $\psi_x : A_x \rightarrow a_x$

3. Effective disease treatments

[Meta learning]

元学习是“学习如何学习”的任务,旨在构建能快速适应新任务或环境的模型,通过利用过去学到的知识加速或改进在未见任务上的效果。

日期： /

Meta-Training

Training task 1

Support set



Training task 2 . . .

Support set



Query set



Query set



Meta-Testing

Test task 1 . . .

Support set



Query set



[G-Meta]

G-Meta 是一个用于节点分类的元学习器，元学习器负责调整 GNN 参数，以使器更好地适应新任务。