

Машинное обучение (Machine Learning)

Графовая нейронная сеть (Graph Neural Network)

Уткин Л.В.

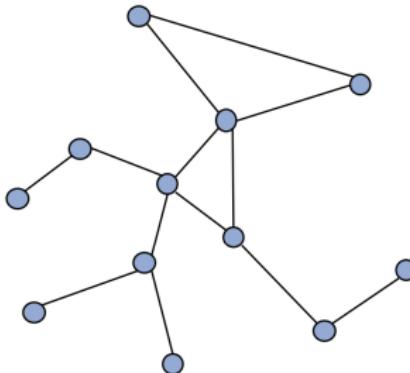
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого



Графы

- Граф - это структура данных, состоящая из двух компонентов: вершин и ребер. Граф G описывается набором вершин V и ребер E , которые он содержит: $G = (V, E)$.
- Ребра могут быть как направленными, так и ненаправленными, в зависимости от того, существуют ли направленные зависимости между вершинами.
- Вершины часто называют узлами.

Картинки как графы (1)



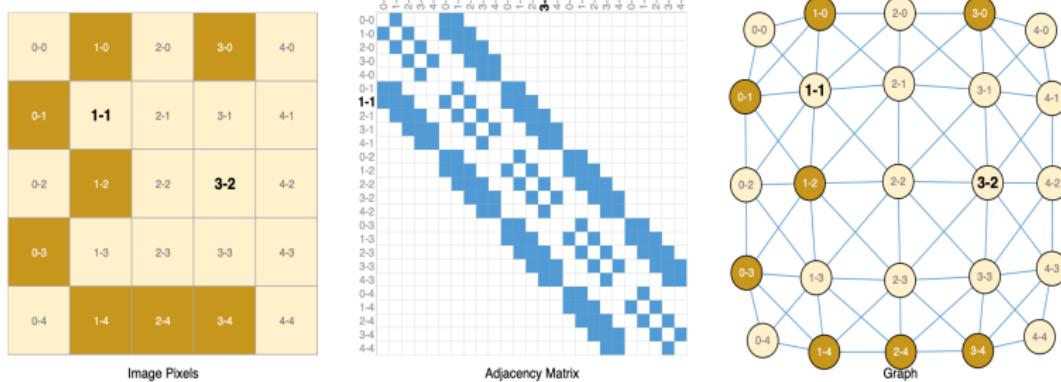
Zhiyuan Liu, Jie Zhou. Introduction to Graph Neural Networks.

DOI:10.2200/s00980ed1v01y202001aim045

Картинки как графы (2)

- Один из способов представить изображения - это графы с регулярной структурой, где каждый пиксель представляет собой узел и соединен ребром с соседними пикселями.
 - Каждый неграничный пиксель имеет 8 соседей, и информация, хранящаяся в каждом узле, представляет собой трехмерный вектор значений RGB пикселя.
 - Способ визуализации связности графа - матрица смежности.

Картинки как графы (3)



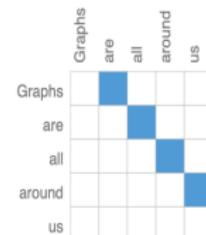
<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>

Картинки как графы (4)

- Упорядочиваем узлы, в данном случае каждый из 25 пикселей в простом изображении смайлика 5x5, и заполняем матрицу $n_{nodes} \times n_{nodes}$, если два узла имеют общее ребро. Каждое из этих трех представлений есть разные представления одного и того же фрагмента данных.

Текст как граф

- Можно оцифровывать текст, связывая индексы с каждым символом, словом или токеном и представляя текст как последовательность этих индексов.
- Это создает простой ориентированный граф, где каждый символ или индекс является узлом и соединен ребром с узлом, следующим за ним.



<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>

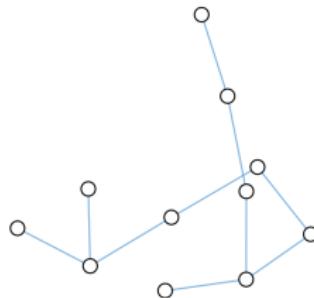
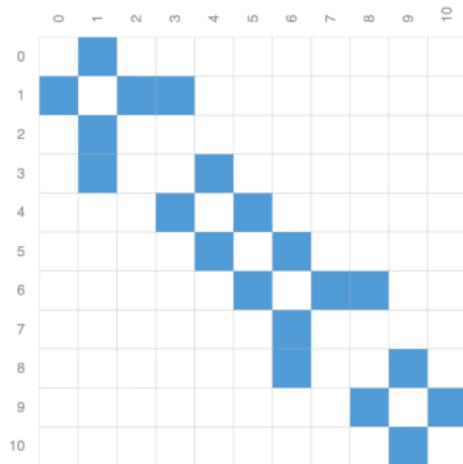
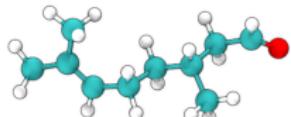
А что на практике

На практике обычно текст и изображения кодируются не так: эти графические представления избыточны, поскольку все изображения и весь текст будут иметь очень регулярную структуру. Например, изображения имеют полосчатую структуру в своей матрице смежности, потому что все узлы (пиксели) связаны в сетке. Матрица смежности для текста — это просто диагональная линия, потому что каждое слово соединяется только с предыдущим словом и со следующим.

Молекулы как графы (1)

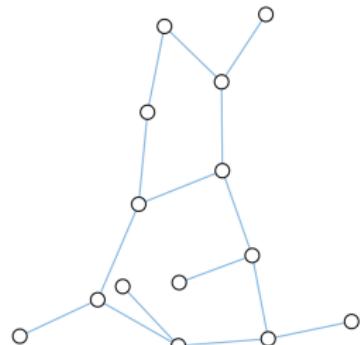
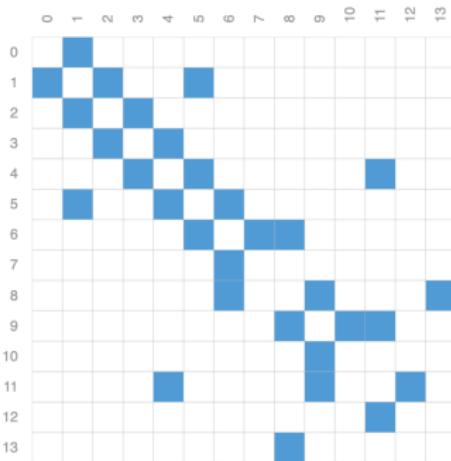
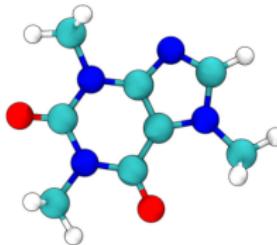
- Молекулы состоят из атомов и электронов в трехмерном пространстве.
 - Частицы молекулы взаимодействуют, но когда пара атомов застrevает на стабильном расстоянии друг от друга, мы говорим, что они связаны ковалентной связью.
 - Разные пары атомов и связей имеют разное расстояние (например, одинарные связи, двойные связи).
 - Это очень удобная и распространенная абстракция для описания трехмерного объекта в виде графа, где узлы — это атомы, а ребра — ковалентные связи.

Молекулы как графы (2)



<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>

Молекулы как графы (3)

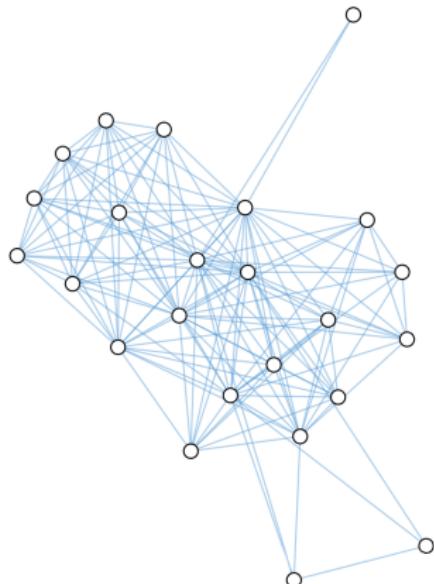
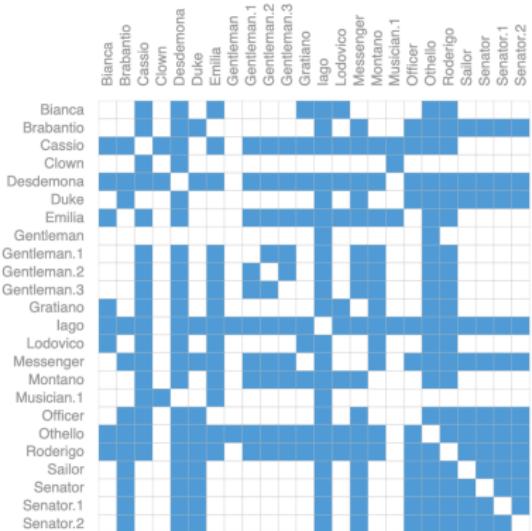


<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>

Социальные сети как графы (1)

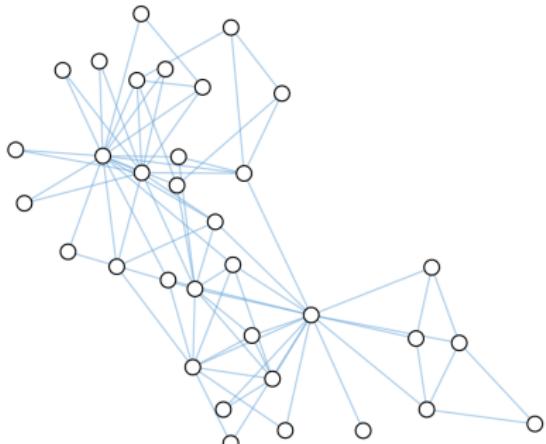
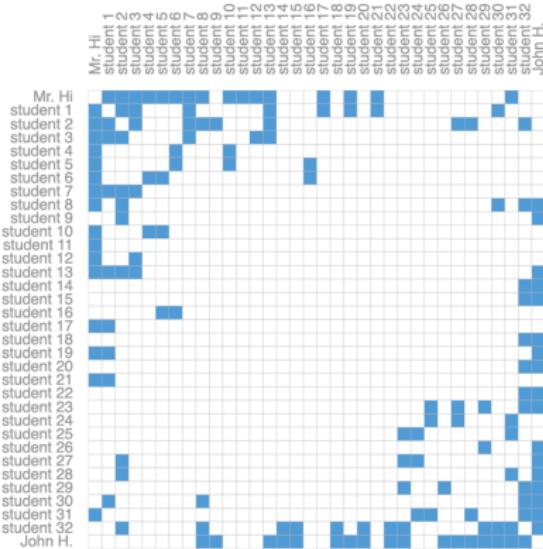
- Можно построить граф, представляющий группы людей, моделируя отдельных людей как узлы, а их отношения — как ребра.
- В отличие от изображений и текстовых данных, социальные сети не имеют одинаковых матриц смежности.

Социальные сети как графы (2)



Сеть сцен из пьесы “Отелло” (<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>)

Социальные сети как графы (3)



Взаимодействие между людьми в клубе карате

(<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>)

Сеть цитирований и другое как графы

- Можно визуализировать сети цитирований статей в виде графа, где каждая статья является узлом, а каждое направленное ребро — цитированием одной статьей другой. Можно добавить информацию о каждой статье в узел, например реферат.
- В компьютерном зрении размечают объекты в визуальных сценах. Можем строить графы, рассматривая эти объекты как узлы, а их отношения — как ребра.
- Модели машинного обучения, программный код и математические уравнения также можно представить в виде графов, где переменные - узлы, а ребра - операции.

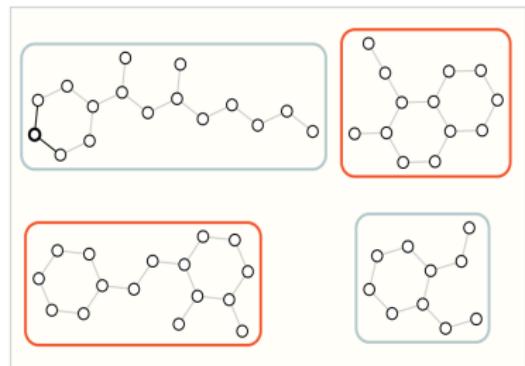
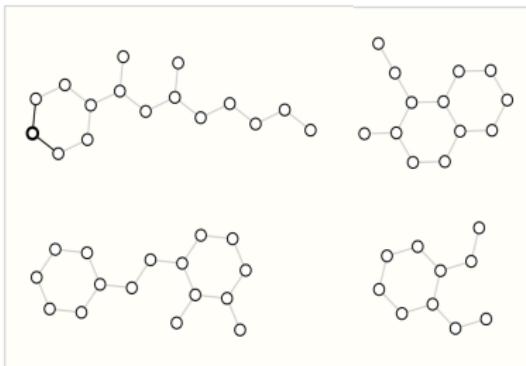
Три типа задач для графовых данных

- Существует три основных типа задач предсказания:
на уровне графа, на уровне узла и на уровне ребра.
 - На уровне графа предсказываем одно свойство для всего графа.
 - На уровне узла - некоторое свойство для каждого узла в графе.
 - На уровне ребер - свойство или наличие ребер в графе.
- Для всех трех уровней задачи могут быть решены с помощью GNN.

Задача на уровне графа (1)

- Цель - предсказать свойство всего графа. Например, для молекулы, представленной в виде графа предсказать, как пахнет молекула, или будет ли она связываться с рецептором заболевания.
- Это аналогично классификации изображений с MNIST и CIFAR, где связывают метку со всем изображением.

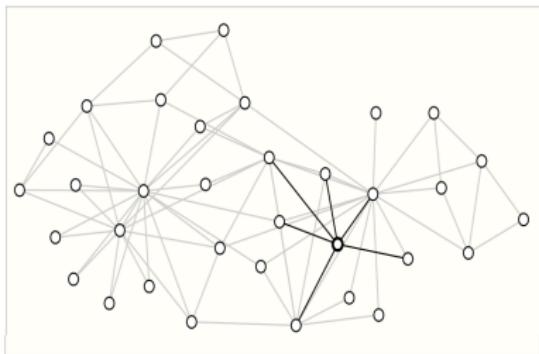
Задача на уровне графа (2)



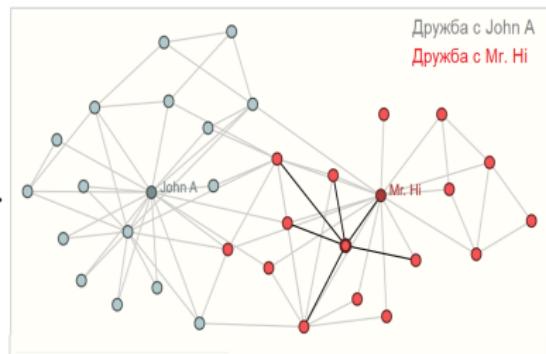
Задача на уровне узлов (1)

- Уровень узлов связан с предсказанием личности или роли каждого узла в графе.
- Пример задачи прогнозирования на уровне узла - клуб. Набор данных представляет собой единый граф социальной сети, состоящий из людей, которые находятся в дружбе или вражде с одним из двух клубов после раскола.
- Задача прогнозирования состоит в том, чтобы определить, состоит ли данный член в дружбе с Mr. Ni либо с John H. после раскола.
- В этом случае расстояние между узлом до Mr. Ni или John H. сильно коррелирует с этой меткой.
- В изображении, проблемы прогнозирования на уровне узлов аналогичны сегментации изображения, где пытаемся обозначить роль каждого пикселя в изображении.

Задача на уровне узлов (2)



Input: Граф с узлами без меток

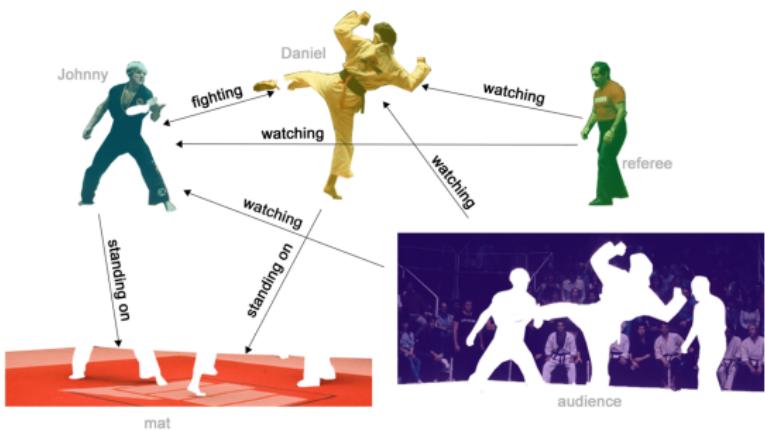


Output: Метки узлов

Задача на уровне ребер (1)

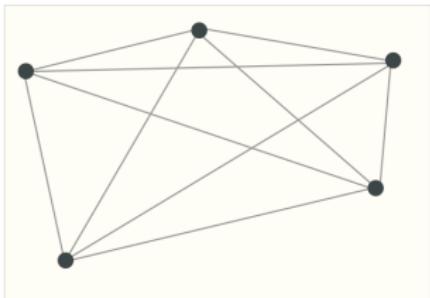
- Пример - понимание сцены изображения.
- Помимо идентификации объектов на изображении, модели глубокого обучения можно использовать для прогнозирования взаимосвязи между ними.
- Можно сформулировать это как классификацию на уровне ребер: узлы - объекты на изображении, нужно предсказать, какие из этих узлов имеют общее ребро или каково значение этого ребра.

Задача на уровне ребер (2)

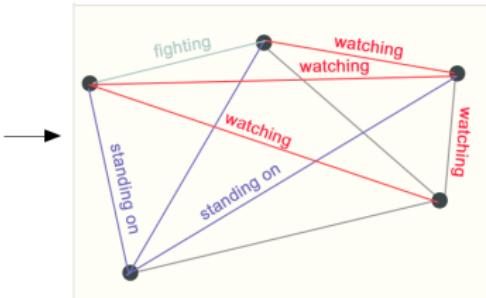


<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>

Задача на уровне ребер (3)



Input: полный граф,
неразмеченные ребра



Output: метки ребер

<https://distill.pub/2021/gnn-intro/>

Графовая нейронная сеть (Graph Neural Network)

- Графовая нейронная сеть (GNN) - тип нейронной сети, который работает со структурой графа.
- Типичное применение GNN - классификация узлов.
- По сути, каждый узел в графе связан с меткой, и мы хотим предсказать метку узлов с некоторой вероятностью.
- В постановке задачи классификации узлов каждый узел v характеризуется своим признаком \mathbf{x}_v и связан с меткой t_v .

Графовая нейронная сеть (Graph Neural Network)

- Дан частично размеченный граф G , цель - использовать размеченные узлы для предсказания меток неразмеченных.
- Он учится представлять каждый узел v с помощью d -мерного вектора (эмбеддинга) \mathbf{h}_v , который содержит информацию о его окрестности.

Состояние встраивания (1)

- Пусть f - параметрическая функция, называемая локальной переходной функцией, которая является общей для всех узлов и обновляет состояние узла в соответствии с входной окрестностью.
- Пусть g - локальная выходная функция, которая описывает, как выход был произведен.
- Тогда \mathbf{h}_v и o_v (метка узла) определяются следующим образом:

$$\mathbf{h}_v = f(\mathbf{x}_v, \mathbf{x}_{co[v]}, \mathbf{h}_{ne[v]}, \mathbf{x}_{ne[v]})$$

$$o_v = g(\mathbf{h}_v, \mathbf{x}_v)$$

Состояние встраивания (2)

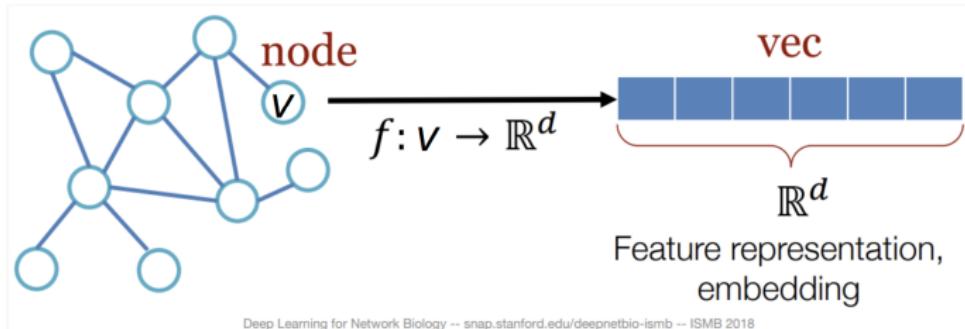
- Тогда \mathbf{h}_v и o_v (метка узла) определяются следующим образом:

$$\mathbf{h}_v = f(\mathbf{x}_v, \mathbf{x}_{co[v]}, \mathbf{h}_{ne[v]}, \mathbf{x}_{ne[v]})$$

$$o_v = g(\mathbf{h}_v, \mathbf{x}_v)$$

- $\mathbf{x}_v, \mathbf{x}_{co[v]}, \mathbf{h}_{ne[v]}, \mathbf{x}_{ne[v]}$ - признаки v , признаки его ребер, состояний, и признаки узлов в окрестностях (всех соседей) v соответственно.

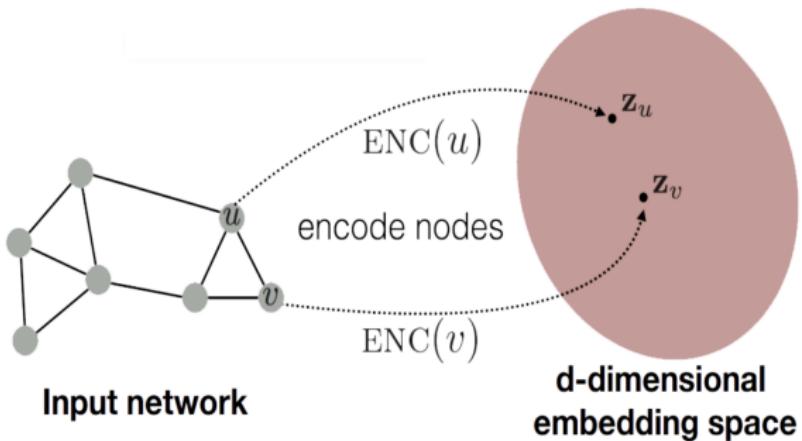
Иллюстрация эмбеддинга узла



Цели

- ➊ Определить энкодер - функцию соответствия ENC , которая задачт преобразование узла v в вектор $z(v)$ или h_v
- ➋ Определить меру близости в графе, которую будем подавать на вход энкодера
- ➌ Оптимизировать параметры энкодера таким образом, чтобы семантическая близость узлов давала близость векторов $z(v)$ в пространстве \mathbb{R}^d

Иллюстрация цели



Уравнения для глобальных функций

- Пусть \mathbf{H} , \mathbf{O} , \mathbf{X} и \mathbf{X}_N - это векторы, построенные путем конкатенации всех эмбеддингов \mathbf{h}_v , всех выходных данных O_v , всех признаков \mathbf{x}_v и всех признаков узлов $\mathbf{x}_{ne[v]}$ соответственно. Тогда можно представить уравнения в более компактной форме:

$$\mathbf{H} = F(\mathbf{H}, \mathbf{X})$$

$$\mathbf{O} = G(\mathbf{H}, \mathbf{X}_N)$$

- F - глобальная функция перехода, а G - глобальная выходная функция, которые являются конкатенацией f и g для всех узлов в графе соответственно.
- Значение \mathbf{H} является фиксированным и однозначно определяется в предположении, что F - это карта сжатия.

Итерационный процесс обновления (1)

- Т.к. ищем уникальное решение для \mathbf{h}_v , можем применить теорему Банаха о неподвижной точке и переписать приведенное выше уравнение как итерационный процесс обновления

$$\mathbf{H}^{t+1} = F(\mathbf{H}^t, \mathbf{X})$$

- Такая операция часто называется передачей сообщений или объединением соседей.
- \mathbf{H}^t обозначает t -ую итерацию \mathbf{H} . Динамическая система из этого уравнения сходится экспоненциально быстро к решению уравнения $\mathbf{H} = F(\mathbf{H}, \mathbf{X})$ для любого начального значения \mathbf{H}^0 .

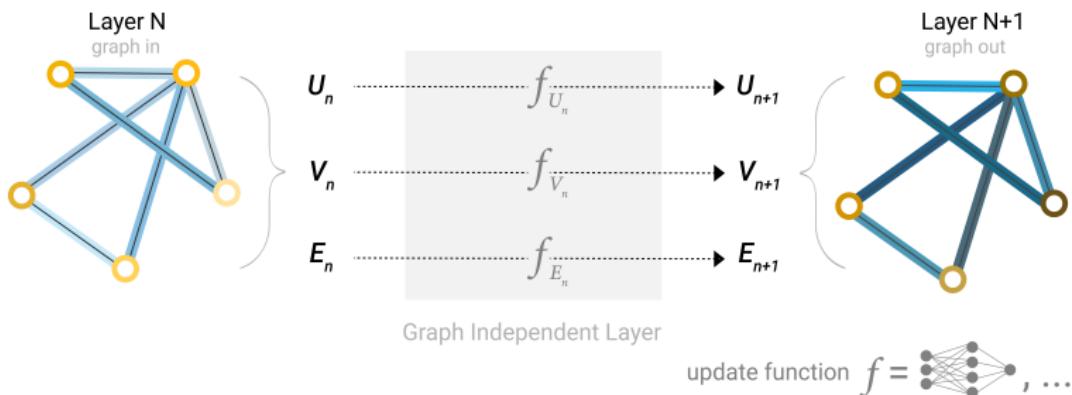
Итерационный процесс обновления (2)

- f и g можно интерпретировать как полносвязные нейронные сети. Потери L2: $loss = \sum_{i=1}^p (t_i - o_i)^2$
- p - число контролируемых узлов.
- Алгоритм обучения основан на стратегии градиентного спуска и состоит из следующих шагов:
 - Эмбеддинги \mathbf{h}_v^t итерационно обновляются $\mathbf{h}_v = f(\mathbf{x}_v, \mathbf{x}_{co[v]}, \mathbf{h}_{ne[v]}, \mathbf{x}_{ne[v]})$ до момента T . Они стремятся к фиксированному значению $\mathbf{H}^t \approx \mathbf{H}$.
 - Градиент весов \mathbf{W} вычисляется из функции потерь.
 - Веса \mathbf{W} обновляются в соответствии с градиентом, вычисленным на последнем шаге.

GNN в общем

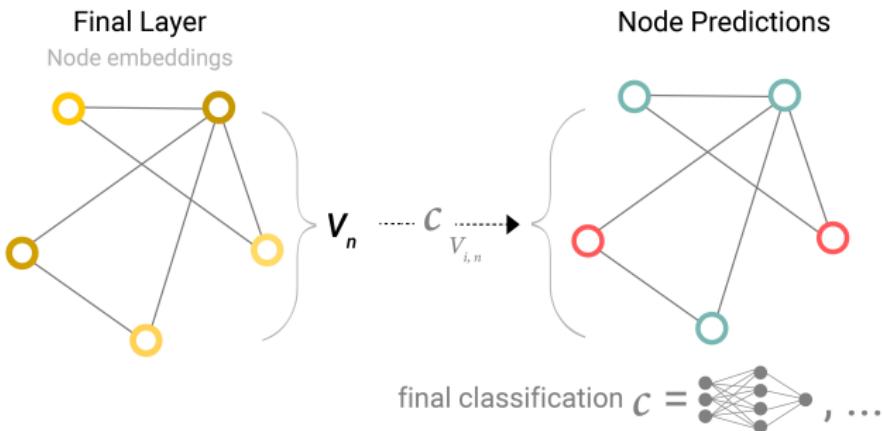
- GNN использует отдельный многослойный персепtron (MLP) для каждого компонента графа: называем это слоем GNN.
- Для каждого вектора узла применяем MLP и возвращаем обученный вектор узла.
- Делаем то же самое для каждого ребра, обучая эмбеддинги для каждого ребра,
- а также для вектора глобального контекста, обучая один эмбеддинг для всего графа.

GNN в общем



Один слой простой GNN. Граф является входом, и каждый компонент (V , E , U) обновляется MLP для создания нового графа.

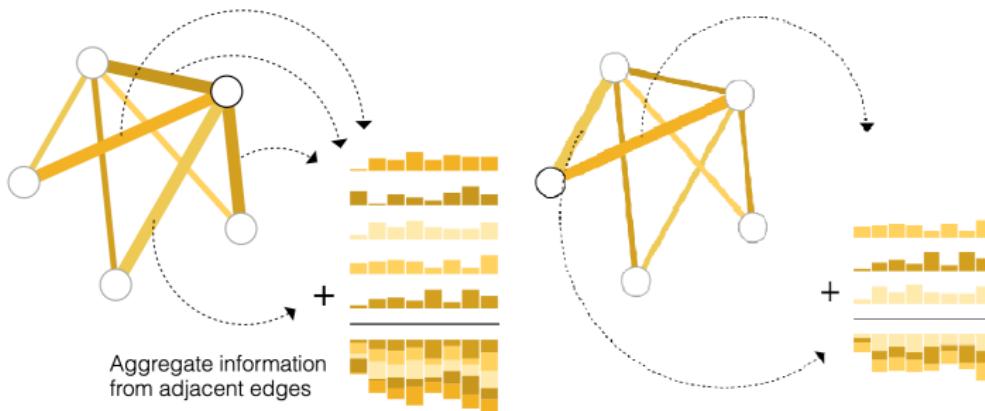
GNN c pooling (1)



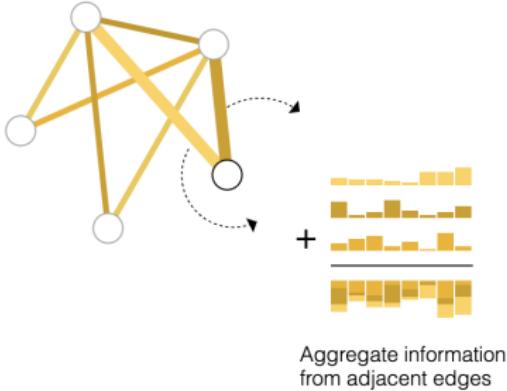
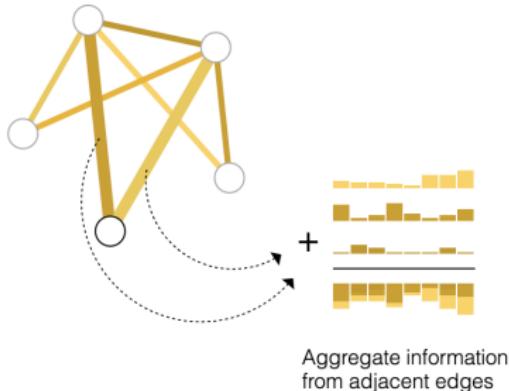
GNN с pooling (2)

- Pooling происходит в два этапа:
 - ➊ Для каждого элемента, который нужно объединить, собираются все их эмбеддинги и конкатенируются в матрицу.
 - ➋ Собранные эмбеддинги затем агрегируются, обычно с помощью операции суммирования.

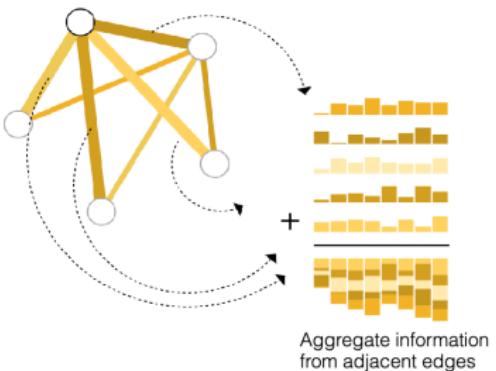
GNN с pooling (3)



GNN с pooling (4)

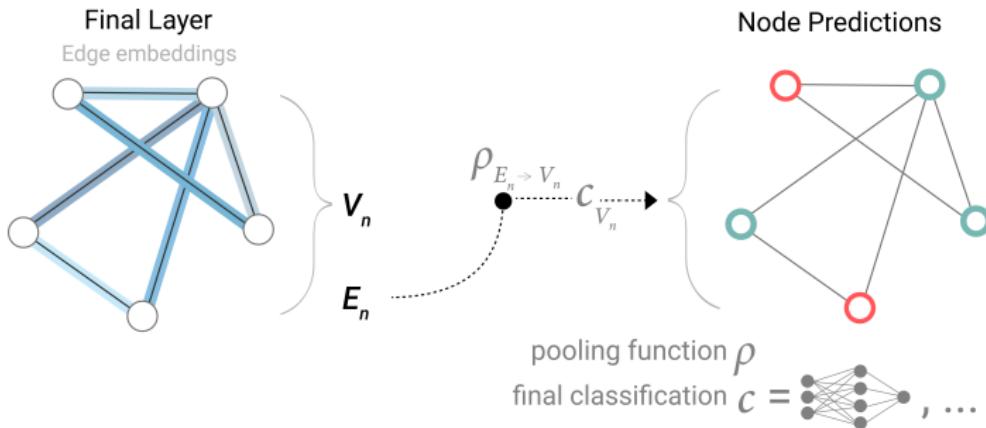


GNN с pooling (5)



GNN с pooling и признаками ребер

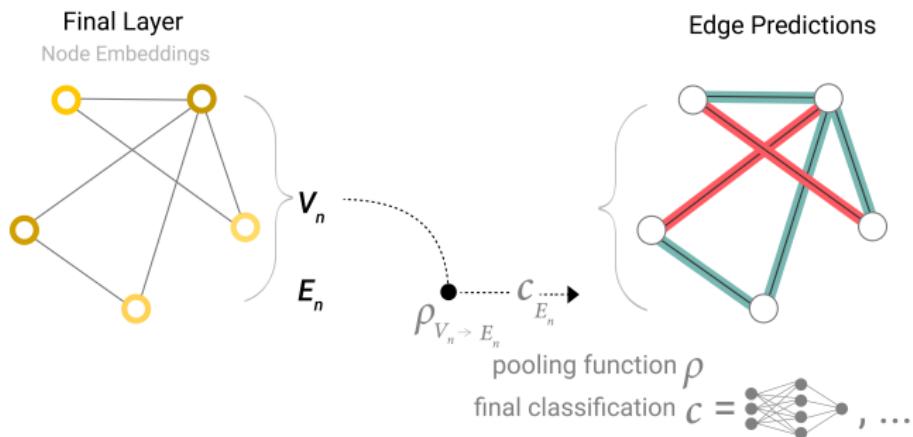
Если у нас есть только признаки уровня ребер и надо предсказать информацию о двоичном узле, можно также использовать pooling для направления информации туда, куда она должна идти. Модель выглядит так



GNN с pooling и признаками узлов

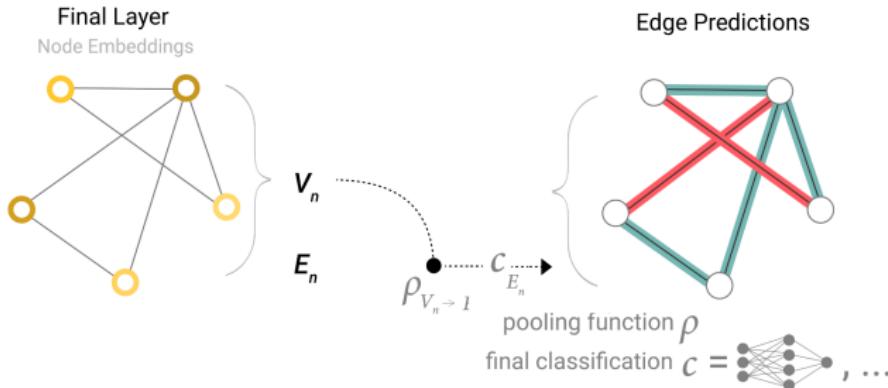
Если у нас есть только признаки уровня узлов и нужно предсказать бинарную информацию на уровне ребер, модель выглядит следующим образом.

Узлы могут быть распознаны как объекты изображения, и мы пытаемся предсказать, имеют ли объекты общие отношения (бинарные ребра).



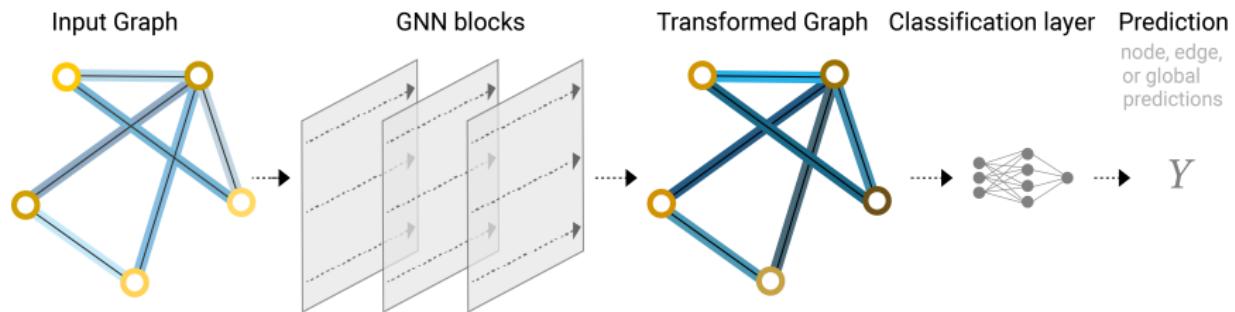
GNN с pooling и признаками узлов

Если у нас есть только признаки уровня узлов и нужно предсказать бинарное глобальное свойство, нам нужно собрать всю доступную информацию об узле и агрегировать ее. Это похоже на слои Global Average Pooling в CNN. То же самое можно сделать и с ребрами.



GNN c pooling

В примерах классификационная модель сможет быть легко заменена любой дифференцируемой моделью или адаптирована к многоклассовой классификации с использованием обобщенной линейной модели.



GNN и pooling

- Метод объединения (pooling) послужит строительным блоком для построения более сложных моделей GNN.
- Если есть новые атрибуты графа, просто нужно определить, как передавать информацию из одного атрибута в другой.
- В простейшей формулировке GNN не использовалась связность графа внутри слоя GNN.
- Каждый узел обрабатывается независимо, как и каждое ребро, а также глобальный контекст.

GNN: message passing

- Можно делать более сложные прогнозы, используя pooling в слое GNN, чтобы обученные эмбеддинги знали о связности графа.
- Это можно сделать, используя передачу сообщений (message passing, нейронное распространение), где соседние узлы или ребра обмениваются информацией и влияют на обновленные эмбеддинги.

GNN: message passing между частями графа (1)

- Идея message passing проста - вершины графа посылают сообщения, и новое представление каждой вершины получается как функция Φ от:
 - Предыдущего представления вершины
 - Сообщений соседей
- $\mathbf{h}_v^{(k)} = \Phi(\mathbf{h}_v^{(k-1)}, \mathbf{X}_{\mathcal{N}(v)}^{(k)})$, где $\mathbf{h}_v^{(k-1)}$ – предыдущее представление вершины,
 $\mathbf{X}_{\mathcal{N}(v)}^{(k)} = AGG^{(k)} \left(\mathbf{h}_u^{(k-1)}, u \in \mathcal{N}(v) \right)$ - представления соседей
- Message passing - процесс итеративной агрегации соседей (neighborhood aggregation).

GNN: message passing между частями графа (2)

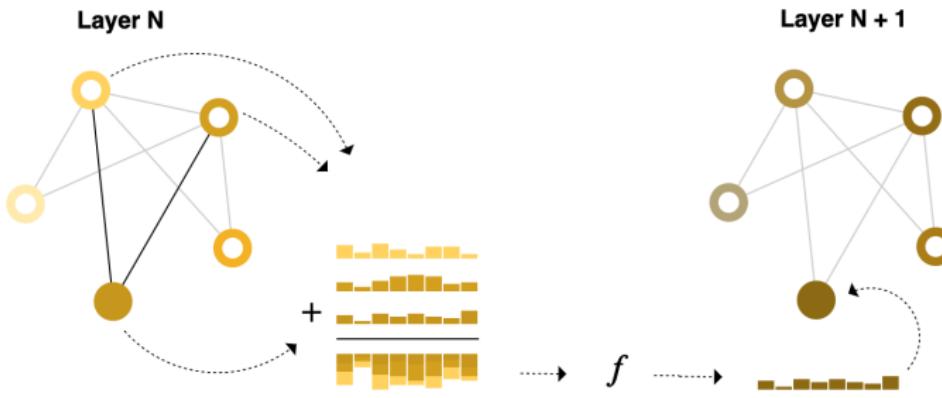
- Message passing работает в три этапа:
 - ❶ Каждый узел в графе вычисляет **message** для каждого из своих соседей. Сообщения являются функцией узла, соседа и ребра между ними.
 - ❷ Сообщения отправляются, и каждый узел **агрегирует** полученные сообщения, используя инвариантную к перестановке функцию (т.е. не имеет значения, в каком порядке получены сообщения). Эта функция обычно является суммой или средним значением.
 - ❸ После получения сообщений каждый узел **обновляет** (**updates**) свои атрибуты в зависимости от своих текущих атрибутов и агрегированных сообщений.

Эта процедура происходит синхронно для всех узлов в графе, так что на каждом шаге передачи сообщения все узлы обновляются.

GNN: message passing между частями графа (3)

- Так как pooling может применяться как к узлам, так и к ребрам, передача сообщений может происходить между узлами или ребрами.
- Эти шаги являются ключевыми для использования связности графов. Можно создать более сложные варианты передачи сообщений в слоях GNN, которые дадут модели GNN с возрастающей мощностью.

GNN: message passing (1)

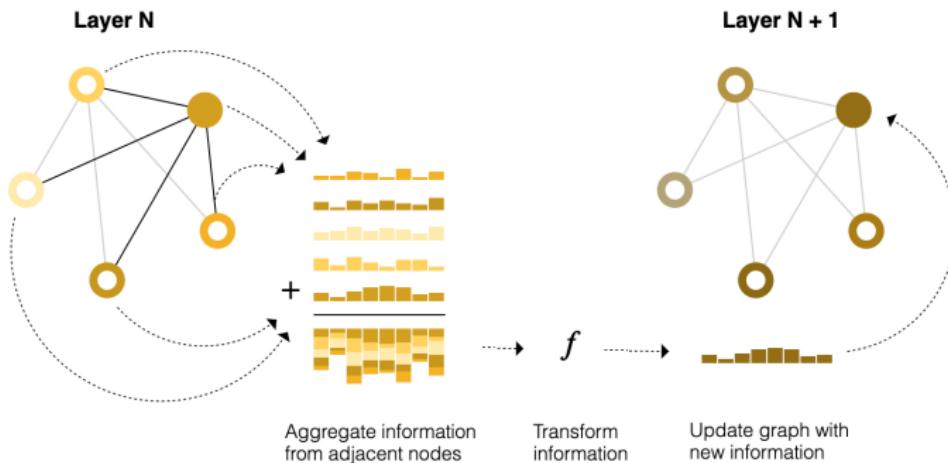


Aggregate information
from adjacent nodes

Transform
information

Update graph with
new information

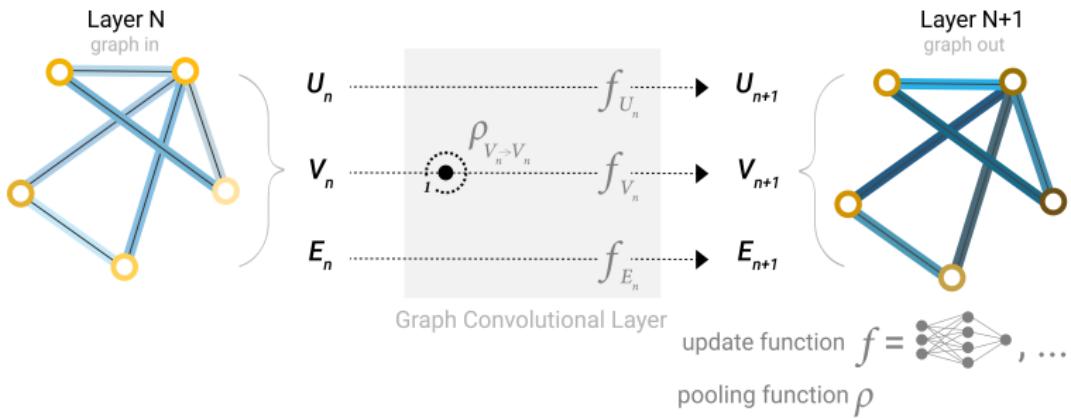
GNN: message passing (2)



GNN: message passing (3)

- Эта последовательность операций, примененная один раз, есть простейший тип message passing GNN.
- Это как стандартная свертка: message passing и свертка - это операции по агрегированию и обработке информации о соседях элемента для обновления значения элемента. В графах элемент - это узел, а в изображениях - пиксель. Однако количество соседних узлов в графе может быть переменным, в отличие от изображения, где каждый пиксель имеет заданное количество соседей.
- Путем объединения слоев GNN, передающих сообщения, узел может включать информацию со всего графа: после трех слоев узел получает информацию об узлах, находящихся на расстоянии трех шагов от него.

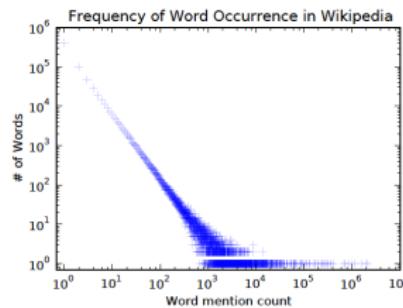
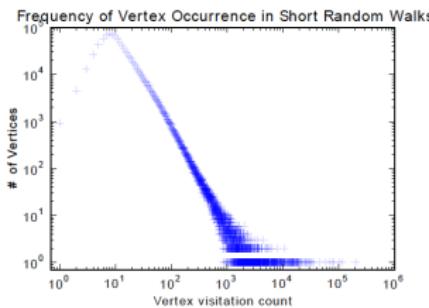
GNN: message passing (4)



DeepWalk (B.Perozzi et al. 2014)

B. Perozzi, et al. 2014. DeepWalk: online learning of social representations. In Proceedings of the KDD '14, pp.701–710.

DeepWalk - это первый алгоритм, предлагающий эмбеддинги узлов, обученных без учителя. Это похоже на эмбеддинги слов с точки зрения процесса обучения. Мотивация заключается в том, что распределение как узлов на графе, так и слов в корпусе подчиняется степенному закону (см. YouTube Social Graph и Wikipedia Article Text)



Алгоритм DeepWalk (1)

- Алгоритм содержит два шага:

- ① Выполнение случайных обходов узлов в графе для создания последовательностей узлов
- ② Запуск SkipGram, чтобы обучить эмбеддинг каждого узла на основе последовательностей узлов, сгенерированных на шаге 1.

SkipGram - это языковая модель, которая максимизирует вероятность совместного появления слов, в заданном окне W . В общем виде Skip-Gram действует методом скользящего окна, пытаясь спрогнозировать окружающие слова, имея в середине известное целевое слово.

Алгоритм DeepWalk (2)

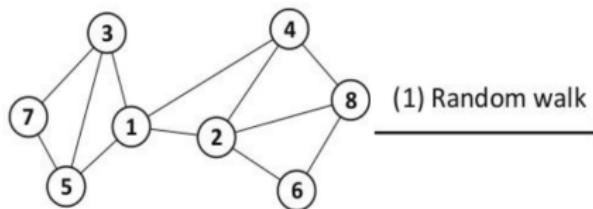
- Начиная с целевого узла (корня), случайным образом выбираем узел, соседний данному и достраиваем до него путь.
- Далее случайным образом выбираем узел, соседний тому, что нашли на предыдущем шаге, достраиваем до него путь и так далее, пока не будет сделано заданное количество шагов.

Алгоритм DeepWalk - более формально

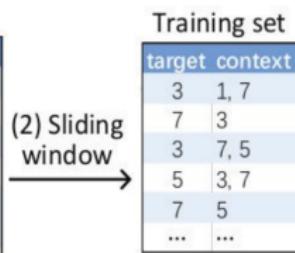
- Генератор случайных блужданий в графе G отбирает равномерно случайную вершину v_i как корень случайного блуждания \mathcal{W}_{v_i} .
- На каждом шаге случайного блуждания следующий узел равномерно выбирается из соседей предыдущего узла. Затем каждая последовательность разрезается на подпоследовательности длиной $2|w| + 1$, где w - размер окна в SkipGram.
- Т.о. SkipGram перебирает все возможные словосочетания в случайном блуждании, которые появляются в окне w . Для каждого мы сопоставляем каждую вершину v_j ее текущему вектору представления $\Phi(v_j) \in \mathbb{R}^d$. Имея представление v_j , максимизируем вероятность его соседей в блуждании.

DeepWalk - случайные блуждания

случайные блуждания по графу + word2vec



#seq.	traveling	path
seq.1	1,3,7,3,5,7,5,1	
seq.2	4,8,4,2,8,4,1,4	
seq.3	5,7,5,1,5,1,2,1	
seq.4	8,6,2,6,2,6,8,6	
...	...	
seq.32	1,3,1,5,7,5,1,5	



$$\frac{1}{|V|} \sum_{i=1}^{|V|} \sum_{-c \leq j \leq c} \log p(v_{i+j} | Y_i) \rightarrow \max,$$

$$p(v_{i+j} | Y_i) = \frac{\exp(Y_{i+j}^T Y_i)}{\sum_{k=1}^{|V|} \exp(Y_k^T Y_i)}$$

Алгоритм DeepWalk - softmax

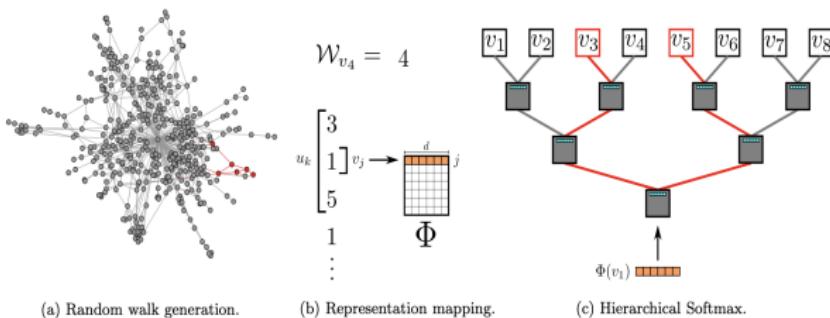
- Иерархический softmax применяется для вычислений softmax из-за огромного количества узлов. Чтобы вычислить значение softmax для каждого отдельного выходного элемента, мы должны вычислить все $\exp(x_k)$ для всех элементов k :

$$\text{softmax}(x_i) = \frac{\exp(x_i)}{\sum_{k=1}^K \exp(x_k)}$$

Иерархический softmax (1)

- Иерархический softmax использует бинарное дерево. Все листья v_1, v_2, \dots, v_8 являются вершинами графа.
- В каждом внутреннем узле есть двоичный классификатор, чтобы решить, какой путь выбрать. Чтобы вычислить вероятность вершины v_k , нужно вычислить вероятность каждого подпути на пути от корня до листа v_k .
- Т.к. вероятность дочерних элементов каждого узла равна 1, свойство суммы вероятностей всех вершин, равное 1, сохраняется в иерархическом softmax.
- Время вычисления элемента уменьшено до $O(\log |V|)$, так как самый длинный путь для бинарного дерева ограничен $O(\log(n))$, где n - количество листьев.

Иерархический softmax (2)



Окно длины $2W + 1$ скользит по случайному блужданию \mathcal{W}_{v_4} , отображая центральную вершину v_1 в ее представление $\Phi(v_1)$. Иерархический Softmax факторизует $\Pr(v_3|\Phi(v_1))$ и $\Pr(v_5|\Phi(v_1))$, соответствующих путям, начинающимся в корне и заканчивающимся в v_3 и v_5 . Представление Φ обновляется, чтобы максимизировать вероятность совпадения v_1 с его контекстом $\{v_3, v_5\}$.

DeepWalk GNN

- После обучения DeepWalk GNN модель научилась хорошо представлять каждый узел.
- Разные цвета обозначают разные метки на входном графике.
- На выходном графе (эмбеддинги размерности 2) узлы с одинаковыми метками сгруппированы вместе, в то время как большинство узлов с разными метками правильно разделены.

DeepWalk: основной алгоритм

Algorithm 1 DEEPWALK(G, w, d, γ, t)

Input: graph $G(V, E)$ window size w walk length t
embedding size d walks per vertex γ

Output: matrix of vertex representations $\Phi \in \mathbb{R}^{|V| \times d}$

- ```

1: Initialization: Sample Φ from $\mathcal{U}^{|V|}$
2: Build a binary Tree T from V
3: for $i = 0$ to γ do
4: $\mathcal{O} = \text{Shuffle}(V)$
5: for each $v_i \in \mathcal{O}$ do
6: $\mathcal{W}_{v_i} = \text{RandomWalk}(G, v_i, t)$
7: SkipGram(Φ , \mathcal{W}_{v_i} , w)
8: end for
9: end for

```

# DeepWalk: алгоритм ScipGram

---

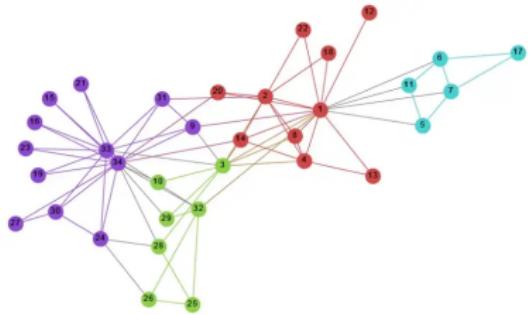
**Algorithm 2** SkipGram( $\Phi, \mathcal{W}_{v_i}, w$ )

---

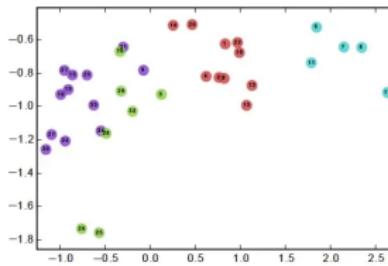
- 1: **for each**  $v_j \in \mathcal{W}_{v_i}$  **do**
- 2:   **for each**  $u_k \in \mathcal{W}_{v_i}[j - w : j + w]$  **do**
- 3:      $J(\Phi) = -\log \Pr(u_k | \Phi(v_j))$
- 4:      $\Phi = \Phi - \alpha * \frac{\partial J}{\partial \Phi}$
- 5:   **end for**
- 6: **end for**

---

## DeepWalk (пример)



(a) Input: Karate Graph



### (b) Output: Representation

# DeepWalk

- Основная проблема DeepWalk - сети не хватает способности к обобщению.
- Всякий раз, когда появляется новый узел, он должен по новой обучить модель, чтобы представить этот узел.
- Таким образом, такая GNN не подходит для динамических графов, где узлы в графах постоянно меняются.

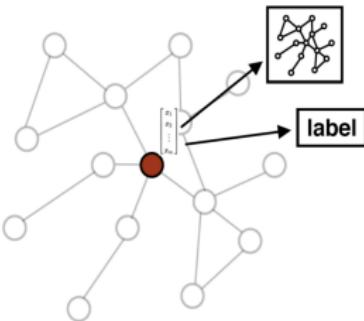
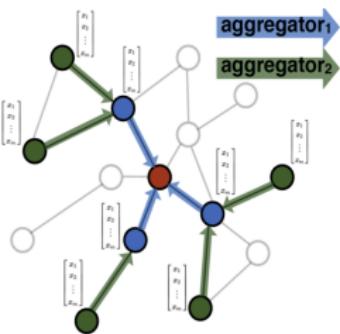
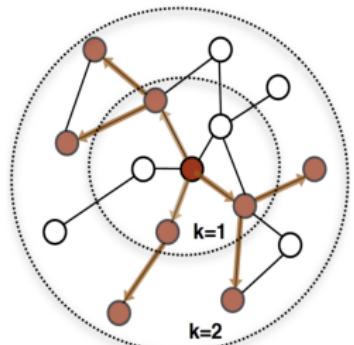
# GraphSage

- W.L. Hamilton, et al. Inductive Representation Learning on Large Graphs. arXiv:1706.02216, 2017.
- GraphSage решает проблемы DeepWalk, обучая эмбеддинг для каждого узла индуктивным способом.
- Каждый узел представлен совокупностью своих соседей. Т.о. даже если в графе появляется новый узел, который не был учтен во время обучения, он все равно может быть правильно представлен соседними узлами.

# GraphSage и соседи узла

- Вместо обучения отдельного эмбеддинга для каждого узла мы обучаем набор функций-агрегаторов, которые учатся агрегировать информацию об объектах из локального окружения узла.
- Каждая функция агрегатора собирает информацию с разного количества узлов в зависимости от глубины поиска от заданного узла.
- При тестировании используется обученная систему для получения эмбеддингов для полностью невидимых узлов.

# GraphSage (пример)



## Алгоритм GraphSage

**Algorithm 1:** GraphSAGE embedding generation (i.e., forward propagation) algorithm

**Input** : Graph  $\mathcal{G}(\mathcal{V}, \mathcal{E})$ ; input features  $\{\mathbf{x}_v, \forall v \in \mathcal{V}\}$ ; depth  $K$ ; weight matrices  $\mathbf{W}^k, \forall k \in \{1, \dots, K\}$ ; non-linearity  $\sigma$ ; differentiable aggregator functions  $\text{AGGREGATE}_k, \forall k \in \{1, \dots, K\}$ ; neighborhood function  $\mathcal{N} : v \rightarrow 2^{\mathcal{V}}$

**Output:** Vector representations  $\mathbf{z}_v$  for all  $v \in \mathcal{V}$

```

1 $\mathbf{h}_v^0 \leftarrow \mathbf{x}_v, \forall v \in \mathcal{V};$
2 for $k = 1 \dots K$ do
3 for $v \in \mathcal{V}$ do
4 $\mathbf{h}_{\mathcal{N}(v)}^k \leftarrow \text{AGGREGATE}_k(\{\mathbf{h}_u^{k-1}, \forall u \in \mathcal{N}(v)\});$
5 $\mathbf{h}_v^k \leftarrow \sigma \left(\mathbf{W}^k \cdot \text{CONCAT}(\mathbf{h}_v^{k-1}, \mathbf{h}_{\mathcal{N}(v)}^k) \right)$
6 end
7 $\mathbf{h}_v^k \leftarrow \mathbf{h}_v^k / \|\mathbf{h}_v^k\|_2, \forall v \in \mathcal{V}$
8 end
9 $\mathbf{z}_v \leftarrow \mathbf{h}_v^K, \forall v \in \mathcal{V}$

```

# GraphSage

- Внешний цикл указывает номер итерации обновления, а  $\mathbf{h}_v^k$  обозначает эмбеддинг узла  $v$  на итерации обновления  $k$  (глубина поиска).
- На каждой итерации  $\mathbf{h}_v^k$  обновляется на основе функции агрегации, эмбеддингов  $v$  и окрестности  $v$  в предыдущей итерации и весовой матрицы  $\mathbf{W}^k$ .
- Предлагаются три функции агрегации:

# GraphSage: Mean aggregator

- Агрегатор среднего вычисляет среднее значение эмбеддингов узла и его соседей:

$$\mathbf{h}_v^k \leftarrow \sigma \left( \mathbf{W} \cdot \text{mean} \left( \{\mathbf{h}_v^{k-1}\} \cup \{\mathbf{h}_u^{k-1}, \forall u \in \mathcal{N}(v)\} \right) \right)$$

- Агрегатор не использует операцию конкатенации в строке 5 кода. Эту операцию можно рассматривать как “skip-connection”, что значительно улучшило производительность модели.

# GraphSage: LSTM aggregator

- Поскольку узлы в графе не имеют порядка, они назначают порядок случайным образом, переставляя эти узлы.
- При использовании LSTM-агрегации вершины из окрестности упорядочиваются и последовательность их представлений подается в рекуррентную LSTM-сеть.

## GraphSage: Pooling aggregator (1)

- Выполняет поэлементный pooling на множестве соседей. Пример max-pooling:

$$AGGREGATE_k^{pool} = \max \left( \{ \sigma \left( \mathbf{W}_{pool} \mathbf{h}_{u_i}^{k-1} + \mathbf{b} \right), \forall u_i \in \mathcal{N}(v) \} \right)$$

- которую можно заменить функцией mean-pooling или любой другой симметричной функцией pooling. Это указывает на то, что pooling агрегатор работает лучше всего, в то время как агрегатор mean-pooling и max-pooling имеют одинаковую производительность.

# GraphSage: Pooling aggregator (2)

- Функция потерь определяется как:

$$J_G(\mathbf{z}_u) = -\log \left( \sigma \left( \mathbf{z}_u^T \mathbf{z}_u \right) \right) - Q \cdot \mathbb{E}_{v_n \sim P_n(v)} \log \left( \sigma \left( -\mathbf{z}_u^T \mathbf{z}_u \right) \right)$$

- где  $u$  и  $v$  встречаются одновременно в случайному блуждании фиксированной длины, а  $v_n$  - “негативные” примеры, которые не встречаются одновременно с  $u$ ,  $Q$  и  $P_n(v)$  - число “негативных” примеров и их распределение вероятностей,  $\mathbf{z}_u$  - выходные векторы

## GraphSage: Pooling aggregator (2)

- Функция потерь определяется как:

$$J_G(\mathbf{z}_u) = -\log (\sigma (\mathbf{z}_u^T \mathbf{z}_u)) - Q \cdot \mathbb{E}_{v_n \sim P_n(v)} \log (\sigma (-\mathbf{z}_u^T \mathbf{z}_n))$$

- Функция потерь побуждает более близкие узлы иметь одинаковые эмбеддинги, а далекие друг от друга - быть разделенными в пространстве. При таком подходе узлы будут получать все больше и больше информации о своем окружении.

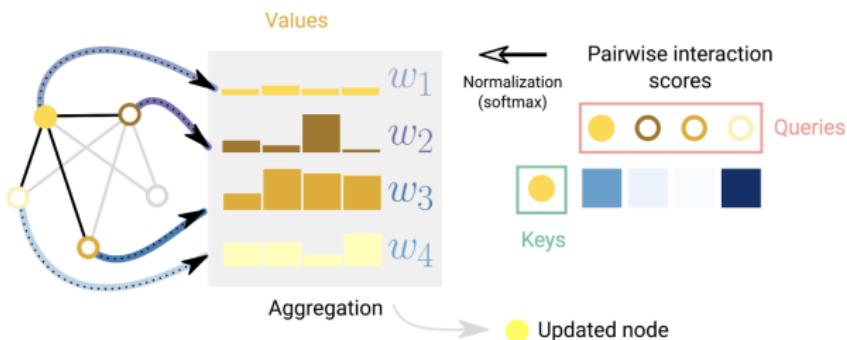
# Graph Attention Networks (1)

- Другой способ передачи информации между атрибутами графа - это модель внимание. Например, когда рассматриваем суммирование (агрегацию) узла и его соседних узлов на расстоянии 1-го ребра, можно также рассмотреть возможность использования взвешенной суммы. Тогда задача состоит в том, чтобы связать веса инвариантным к перестановкам способом.
- Один из подходов - использование скалярной скоринговой функции, которая присваивает веса на основе пар узлов  $f(node_i, node_j)$ .
- В этом случае оценочную функцию можно интерпретировать как функцию, которая измеряет, насколько релевантен соседний узел по отношению к центральному узлу.

# Graph Attention Networks (2)

- Веса можно нормализовать, например, с помощью функции softmax, чтобы сосредоточить большую часть веса на соседе, наиболее важном для узла по отношению к задаче.
- Эта концепция лежит в основе сетей Graph Attention Networks (GAT) и Set Transformers.
- Инвариантность перестановок сохраняется, потому что скоринговая функция анализирует пары узлов.

## Graph Attention Networks (3)



Модель внимания для одного узла по отношению к соседним узлам. Для каждого ребра вычисляется оценка взаимодействия, нормализуется и используется для взвешивания вложений узлов.

# Graph Attention Networks (4)

- Трансформеры можно рассматривать как GNN с механизмом внимания.
- Согласно этому представлению, трансформер моделирует несколько элементов (например, токены) как узлы в полностью связанном графе, а механизм внимания назначает эмбеддинги ребер каждой паре узлов, которые используются для вычисления весов внимания.
- Разница заключается в предполагаемом шаблоне связи между объектами, GNN предполагает разреженный шаблон, а трансформер моделирует все соединения.

# Вопросы

?