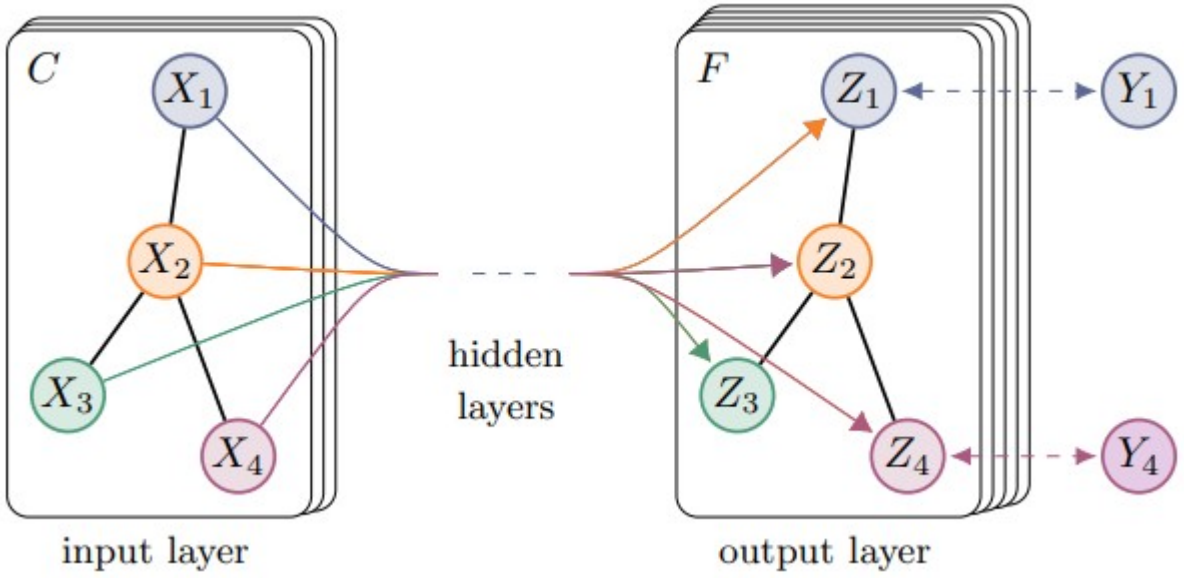

# IIC-3641 Aprendizaje Automático basado en Grafos

https://github.com/marcelomendoza/IIC3641

# - RECAPITULACIÓN -

## GNN: Una arquitectura diseñada para grafos

Observamos que los nodos del grafo para los cuales tenemos etiquetas se consideran la partición de entrenamiento. Los otros nodos son parte del entrenamiento pero ingresan sin etiqueta ya que son de testing.




Es decir, el framework de GNN define un escenario de entrenamiento semi-supervisado, útil para varias tareas como por ejemplo clasificación de nodos (AF5).

## Graph Convolutional Networks y Spectral Graph Convolutions

Las GCN lo que hacen es una simplificación de la operación de convolución, de manera que se pueda realizar directamente sobre la matriz de adyacencia, lo cual la hace eficiente:

$$g_{\theta'} \star x \approx \theta'_0 x + \theta'_1 \left(L - I_N\right) x = \theta'_0 x - \theta'_1 D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} x$$

De hecho la versión definitiva propuesta por Kipf y Welling es aún más simple:

$$g_\theta \star x \approx \theta \left(I_N + D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}\right) x$$

Lo cual se puede reescribir como:

$$Z = \tilde{D}^{-\frac{1}{2}} \tilde{A} \tilde{D}^{-\frac{1}{2}} X \Theta$$

$$\tilde{A} = A + I_N$$

$$\tilde{D}_{ii} = \sum_j \tilde{A}_{ij}$$

con $\Theta \in \mathbb{R}^{C \times F}$ y $Z \in \mathbb{R}^{N \times F}$

Una red de dos capas queda bastante sencilla:

$$\hat{A} = \tilde{D}^{-\frac{1}{2}} \tilde{A} \tilde{D}^{-\frac{1}{2}}$$

👉 $$Z = f(X, A) = \mathrm{softmax}\Big(\hat{A}\ \mathrm{ReLU}\Big(\hat{A} X W^{(0)}\Big)\, W^{(1)}\Big)$$

# - GRAPH ATTENTION NETWORKS -

## Graph Attention Networks

Las GCN de terminan la importacia de un vecino *j* en relación con un nodo target *i* en base a su peso en el enlace $A_{ij}$ (normalizado por sus grados).

Podríamos parametrizar estos pesos, de manera que la red los aprenda. Las Graph Attention Networks (GAT) se basan en esta idea y aprenden la importancia de cada nodo en base al mecanismo de atención (Bahdanau et al 2015).

**Graph Attention Layer**. Se define un mecanismo de self-attention en los nodos, los cuales miden los coeficientes de atención de todo par de nodos a través de unas capa de atención compartida:

$$W \in \mathbb{R}^{F \times F'}$$

$$e_{ij} = a(WH_i^{k-1}, WH_j^{k-1}) \qquad a : \mathbb{R}^{F'} \times \mathbb{R}^{F'} \rightarrow R$$

$$H^k \in \mathbb{R}^{N \times F'}$$

$$H^{k-1} \in \mathbb{R}^{N \times F}$$

Notamos que *a* define **atención global** en la capa k en base a las representaciones de la capa k-1.

Veličković, P., Cucurull, G., Casanova, A., Romero, A., Liò, P., & Bengio, Y. (2018). Graph attention networks. In 6th International Conference on Learning Representations (ICLR 2018)

## Graph Attention Networks

La GAT de atención global en la práctica se restringue al vecindario del nodo objetivo, incluyendo al nodo target en el vecindario (autorelación). De esta manera, el mecanismo de atención es consistente con *A*.

Para hacer a los coeficientes comparables entre distintos nodos, se normaliza usando un función Softmax:

$$\alpha_{ij} = \text{Softmax}_j(\{e_{ij}\}) = \frac{\exp(e_{ij})}{\sum_{l \in N(i)} \exp(e_{il})}$$

vecindario de *i*

El mecanismo de atención en las GAT se implementa usando redes feed-forward incluyendo una transformación lineal que colapsa desde 2F' a un escalar: concatenación

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp(\text{LeakyReLU}(W_2[WH_i^{k-1} || WH_j^{k-1}]))}{\sum_{l \in N(i)} \exp(\text{LeakyReLU}(W_2[WH_i^{k-1} || WH_l^{k-1}]))}$$

$$W_2 \in \mathbb{R}^{1 \times 2F'}$$

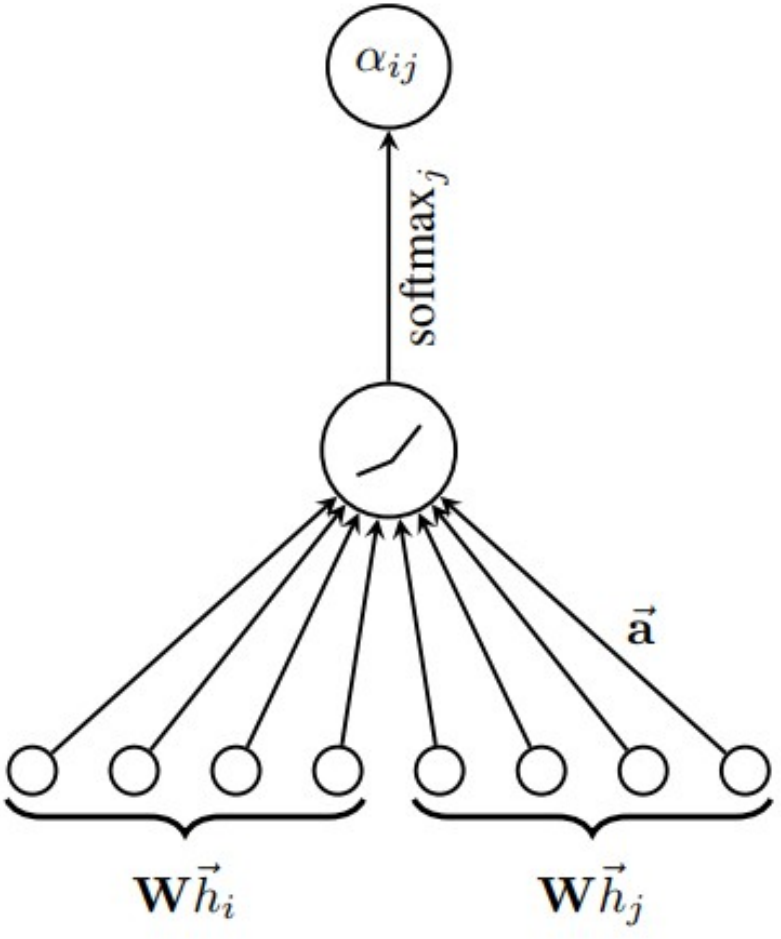
Veličković, P., Cucurull, G., Casanova, A., Romero, A., Liò, P., & Bengio, Y. (2018). Graph attention networks. In 6th International Conference on Learning Representations (ICLR 2018)

## Graph Attention Networks

El mecanismo de atención global define un vector de atención a nivel de features, por eso es de largo 2F':

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp(\text{LeakyReLU}(W_2[WH_i^{k-1}||WH_j^{k-1}]))}{\sum_{l\in N(i)}\exp(\text{LeakyReLU}(W_2[WH_i^{k-1}||WH_l^{k-1}]))}$$

Puedes verse como:




$$W_2 \in \mathbb{R}^{1\times 2F'}$$

## Graph Attention Networks

Finalmente, la GAT obtiene la representación del nodo en la capa *k* por medio de una combinación lineal de representaciones de la capa *k-1* ponderada por los coeficientes de atención:

$$H_i^k = \sigma\left(\sum_{j \in N(i)} \alpha_{ij} W H_j^{k-1}\right), \qquad W \in \mathbb{R}^{F \times F'}$$

Las GAT muestran inestabilidad durante el proceso de entrenamiento, por lo que incorporan el mecanismo de multi-head attention. Básicamente, se usan *K* mecanismos independientes de atención y el resultado se concatena:

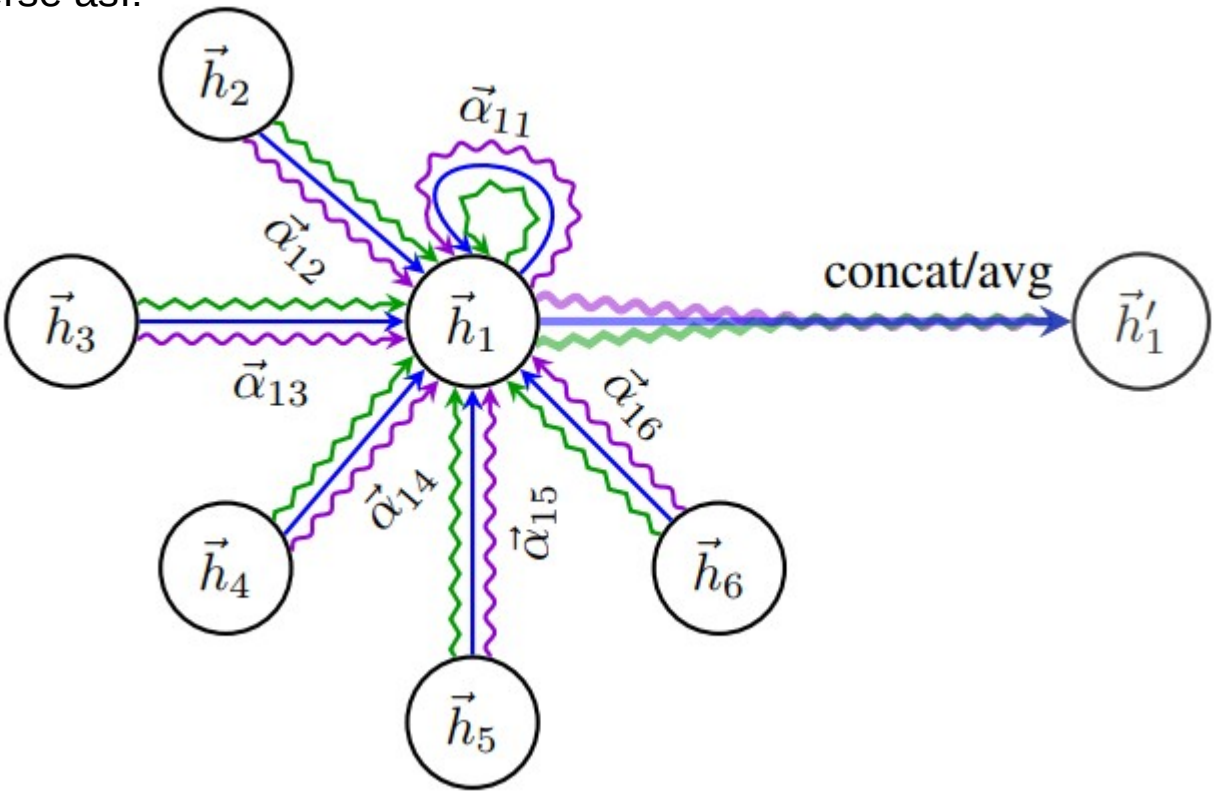
$$\vec{h}_i' = \Big\Vert_{k=1}^{K} \sigma\left(\sum_{j \in \mathcal{N}_i} \alpha_{ij}^k \mathbf{W}^k \vec{h}_j\right)$$

## Graph Attention Networks

Con el mecanismo multi-head attention, las reds GAT en la última capa en lugar de concatenar promedian:

$$\vec{h}'_i = \sigma\left(\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\sum_{j\in\mathcal{N}_i}\alpha_{ij}^{k}\mathbf{W}^{k}\vec{h}_j\right)$$

El proceso puede verse así:



## Graph Attention Networks

Ventajas de la GAT:

- Self-attention es paralelizable a nivel de enlaces.
- No se requiere calcular información espectral ya que opera directamente sobre el grafo.
- Analizar los coeficientes de atención beneficia la interpretabilidad del modelo.

Jerga relevante: aprendizaje sobre la misma estructura en modo semi-supervisado se llama **transducción** (el algoritmo tiene acceso a todos los nodos durante el entrenamiento pero sólo algunos tienen etiqueta). Aprendizaje sobre los mismos nodos pero enlaces nuevos se denomina **inducción** (es decir, el A del ejemplo de testing no se conoce durante el entrenamiento).

Datasets clásicos para estos escenarios:

| | **Cora** | **Citeseer** | **Pubmed** | **PPI** |
|---|---|---|---|---|
| **Task** | Transductive | Transductive | Transductive | Inductive |
| **# Nodes** | 2708 (1 graph) | 3327 (1 graph) | 19717 (1 graph) | 56944 (24 graphs) |
| **# Edges** | 5429 | 4732 | 44338 | 818716 |
| **# Features/Node** | 1433 | 3703 | 500 | 50 |
| **# Classes** | 7 | 6 | 3 | 121 (multilabel) |
| **# Training Nodes** | 140 | 120 | 60 | 44906 (20 graphs) |
| **# Validation Nodes** | 500 | 500 | 500 | 6514 (2 graphs) |
| **# Test Nodes** | 1000 | 1000 | 1000 | 5524 (2 graphs) |

# - RELATIONAL GCN -

## Relational GCN

Una limitación de las GAT es que no son fácilmente extendibles a grafos multirelacionales.

Por otro lado, las GCN son extendibles a multirelaciones lo que les permite vectorizar KGs. Se extienden incorporando una idea denominada message-passing.

**Message-passing**: La idea es usar el framework de las GNNs definiendo las dos funciones AGGREGATE y COMBINE. En el caso de AGGREGATE, esta se define en base a un mecanismo de paso de mensajes a nivel de nodos. Luego se suman todos los mensajes del vecindario:

Features del enlace

$$m_i^k = \sum_{i \in N(j)} M_k(H_i^{k-1}, H_j^{k-1}, e_{ij})$$

mensaje entre el nodo i y j en la capa k, usualmente una transformación lineal

La función COMBINE se encarga de hacer un update de la representación del nodo i en la capa k:

$$H_i^k = U_k(H_i^{k-1}, m_i^k)$$

Función (GRU, activación, u otra)

Gilmer, J., Schoenholz, S. S., Riley, P. F., Vinyals, O., & Dahl, G. E. (2017). Neural message passing for quantum chemistry. In Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning (pp. 1263–1272). PMLR.

## Relational GCN

Fijémonos que las GCN pueden verse como un caso especial de message-passing:

$$h_i^{(l+1)} = \sigma\left(\sum_{m \in \mathcal{M}_i} g_m(h_i^{(l)}, h_j^{(l)})\right)$$

$$g_m(h_i, h_j) = W h_j$$

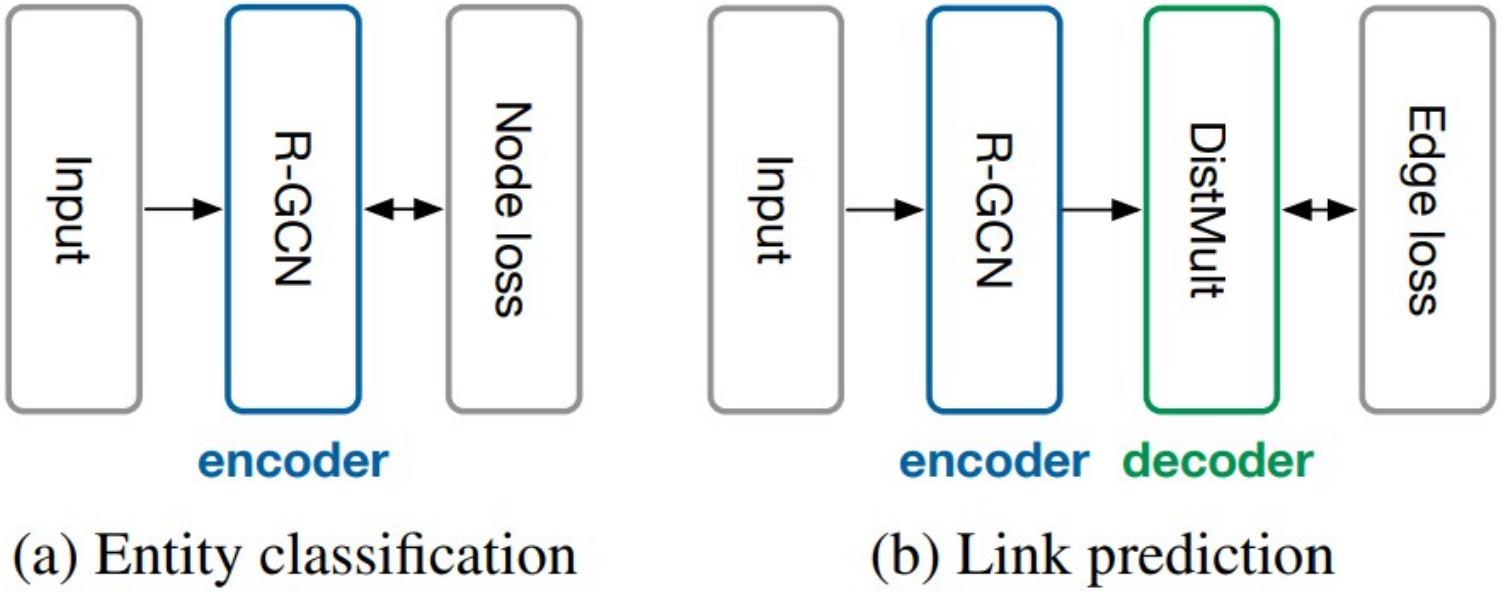
Para incorporar múltiples relaciones, la R-GCN se extiende de la siguiente forma:

$$h_i^{(l+1)} = \sigma\left(\sum_{r \in \mathcal{R}} \sum_{j \in \mathcal{N}_i^r} \frac{1}{c_{i,r}} W_r^{(l)} h_j^{(l)} + W_0^{(l)} h_i^{(l)}\right)$$

parámetros de la relación

## Relational GCN

El entrenamiento depende de la tarea. En clasificación de nodos, la función de pérdida se define directamente a nivel de nodos (cross-entropy en transducción). En predicción de enlaces, agregamos un modelo de scoring en base a los embeddings de los nodos, usualmente DistMult.




👉 Schlichtkrull, M., Kipf, T. N., Bloem, P., van den Berg, R., Titov, I., & Welling, M. (2018). Modeling relational data with graph convolutional networks. European Semantic Web Conference (pp. 593-607).