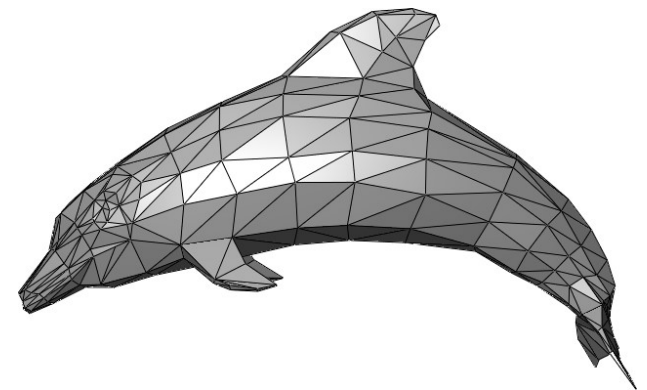
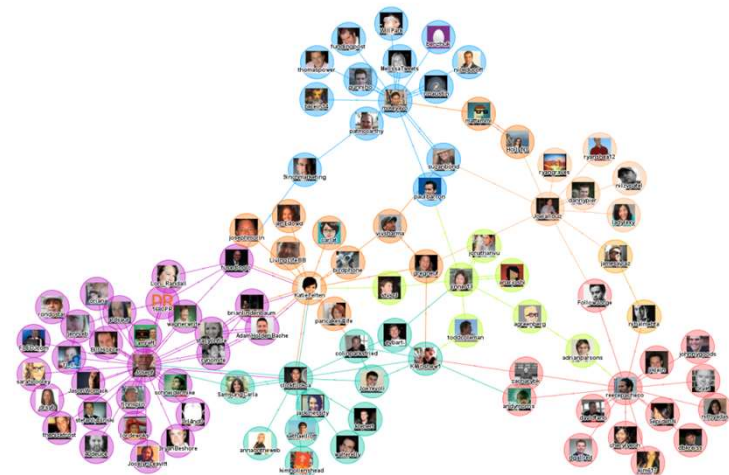
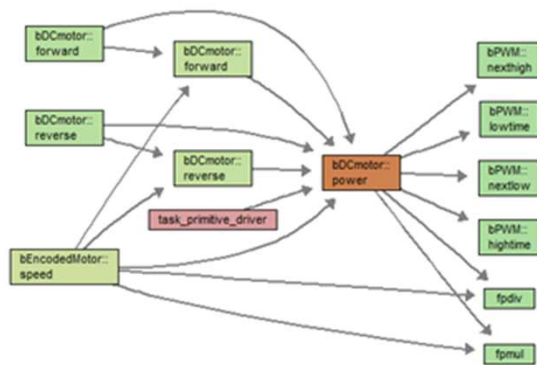
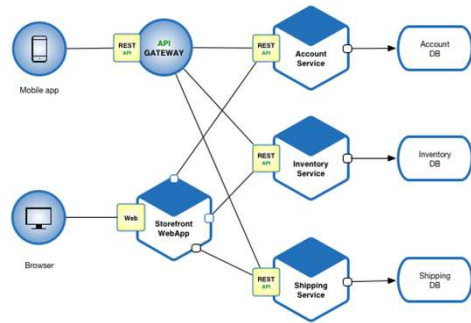
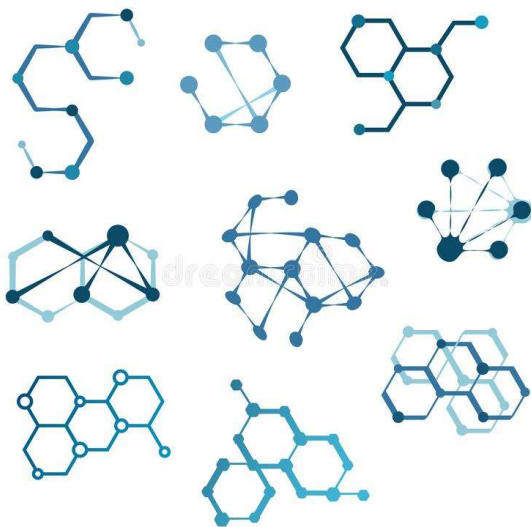


Введение

Типы графов



Мотивация

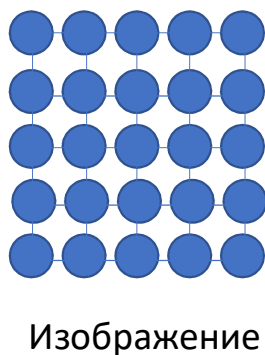
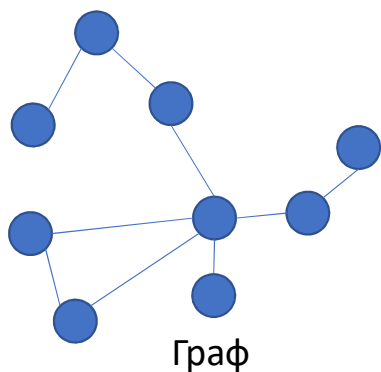
- Сложные системы, содержащие относительные связи, можно представить в виде графа
- Явно моделируя отношения в системе, можно достигнуть лучшей производительности
- Почему бы не попробовать использовать возможности машинного обучения для этого?

- Современные средства глубокого обучения ориентированы на простые сетки и последовательности

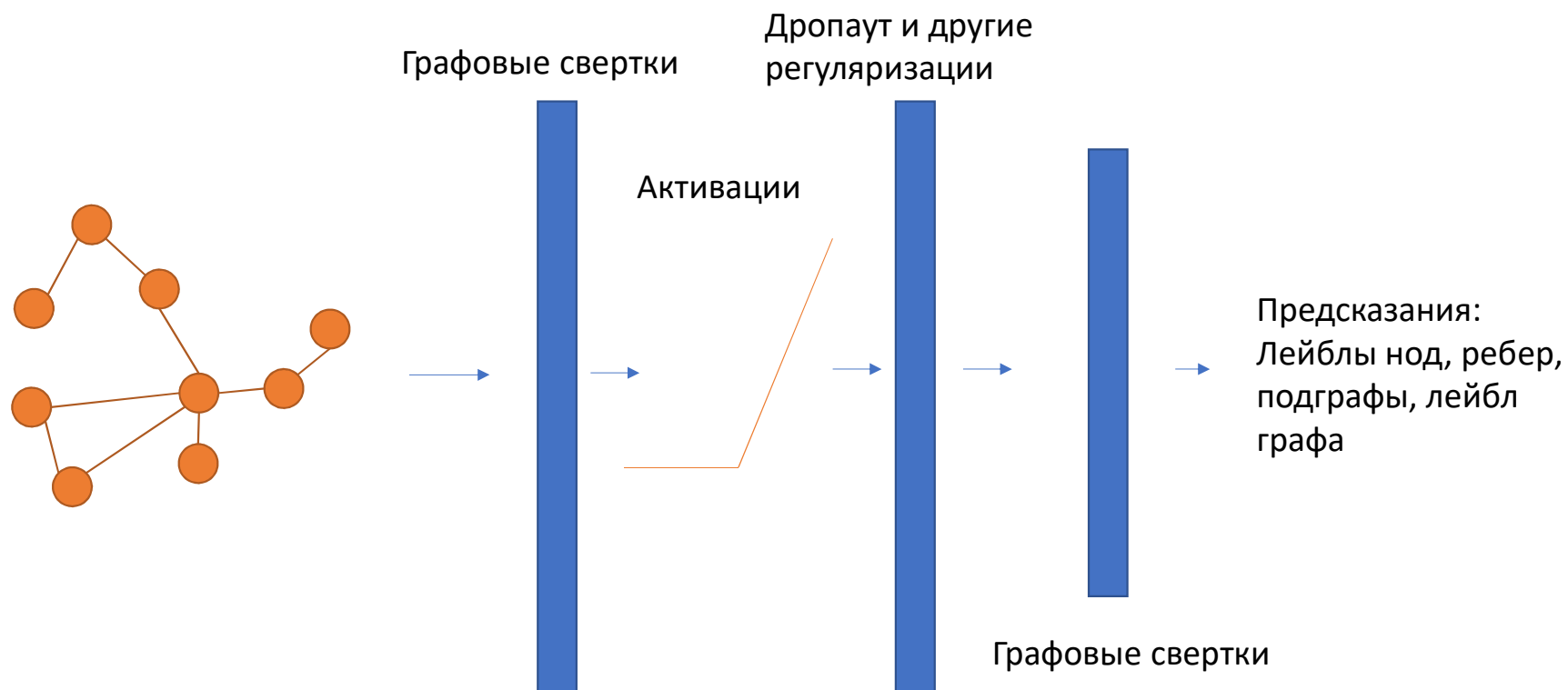


Почему только сейчас?

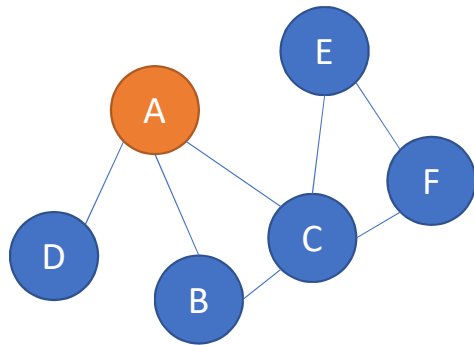
- Произвольный размер
- Нет жестких локальных связей, как в изображениях или текстах
- Часто меняются динамически
- Нет порядка или фиксированной точки начала



Что мы хотим получить

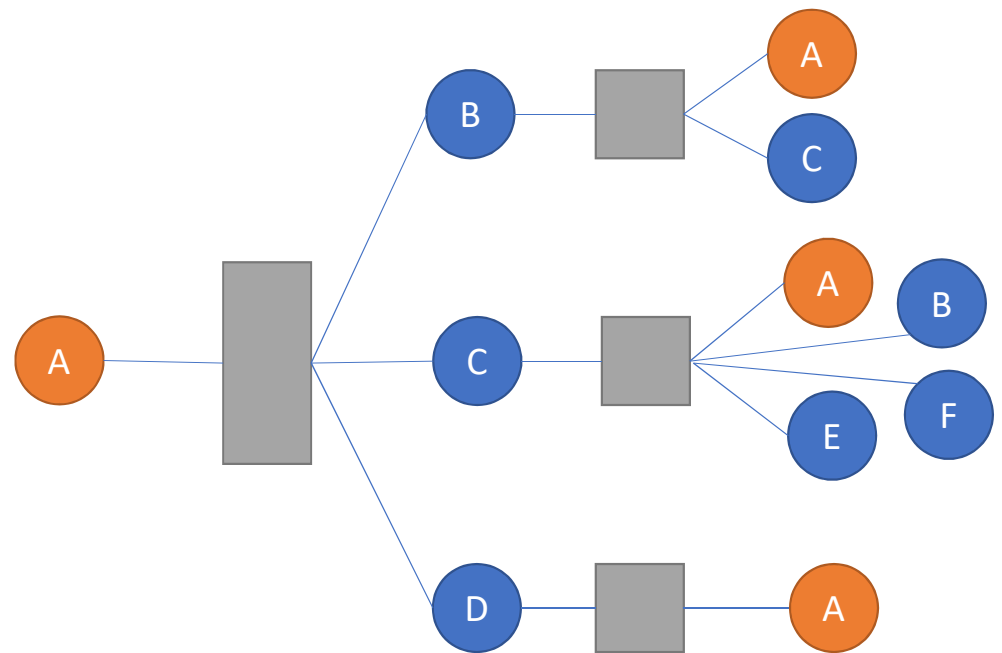


Простые преобразования

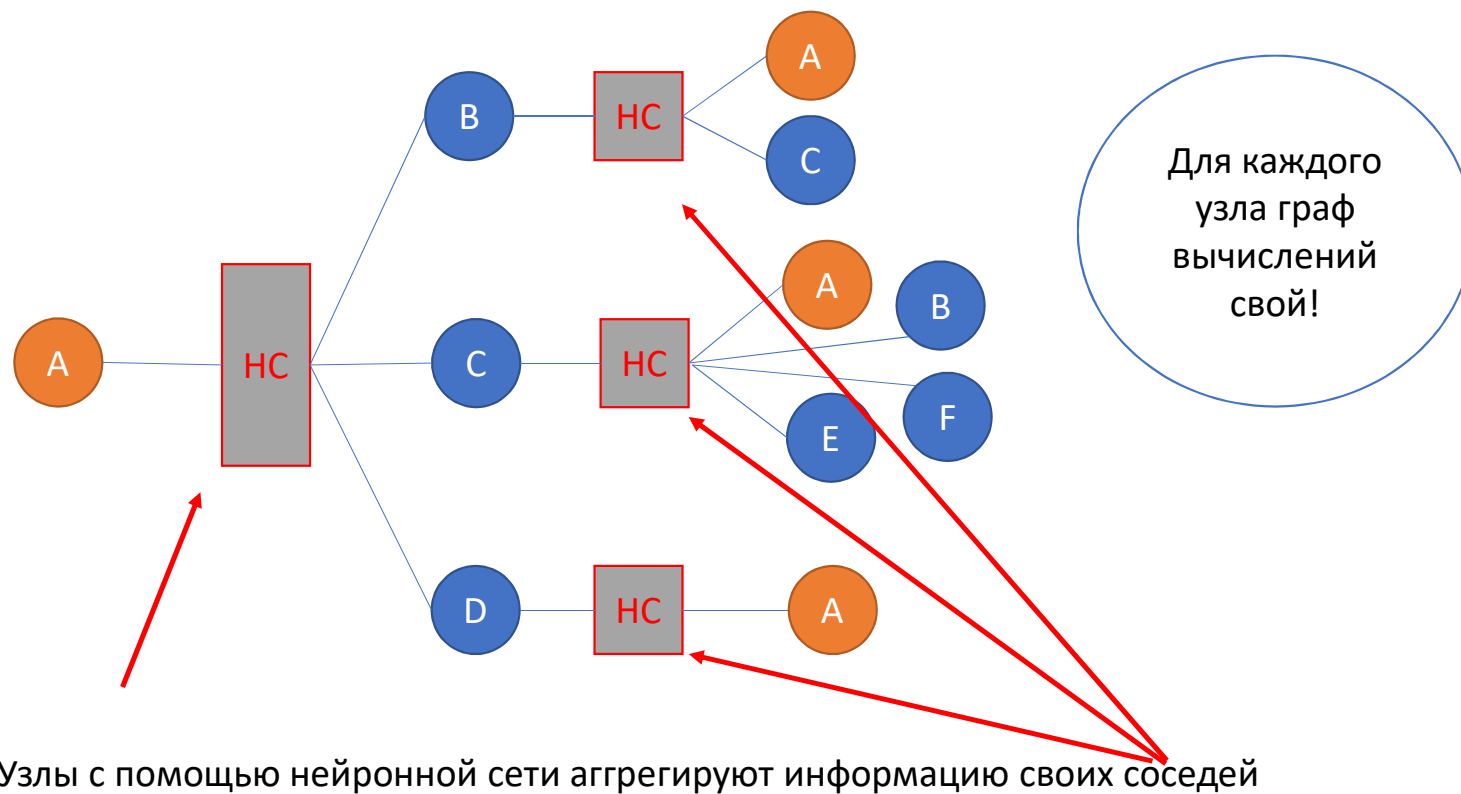


Каждый узел задает граф вычислений

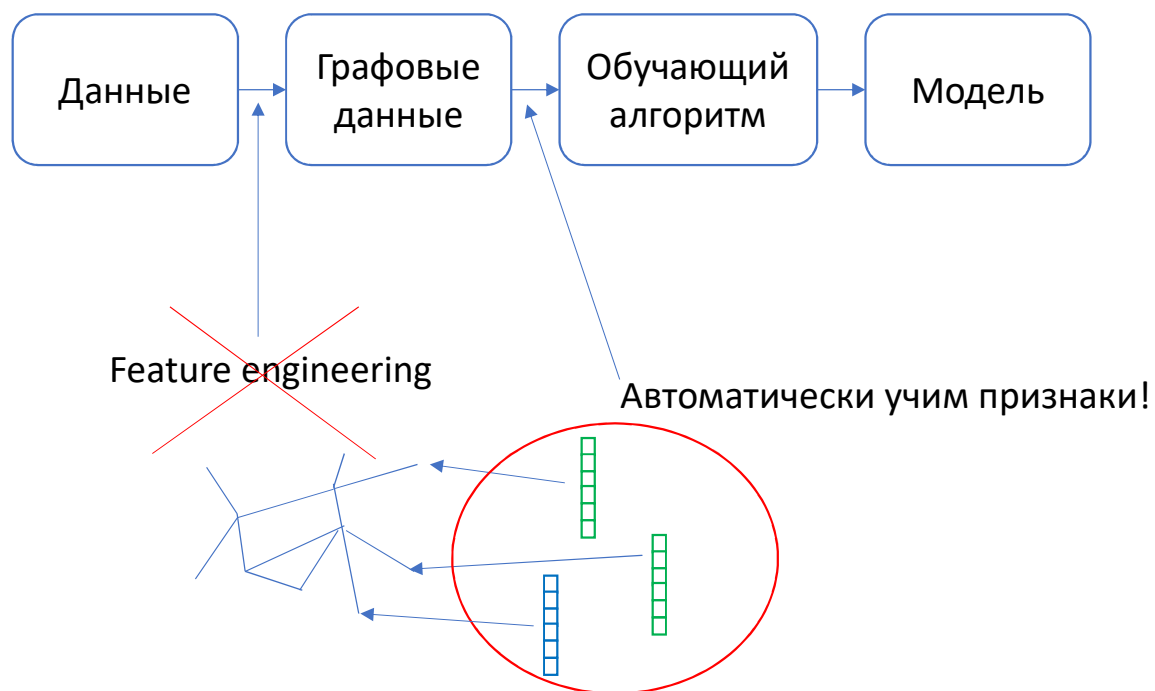
Каждое ребро в этом графе – агрегация или трансформация



Интуиция



Машинное обучение на графах



Задачи

Классификация узлов (ребер): предсказываем свойство узла (ребра)

Пример: Категоризация онлайн-пользователей/элементов

Прогнозирование ссылок: предскажем, отсутствуют ли связи между двумя узлами

Пример: завершение графа знаний

Классификация графов: категоризируем различные графы

Пример: предсказание свойств молекулы

Кластеризация: определим, образуют ли узлы сообщество

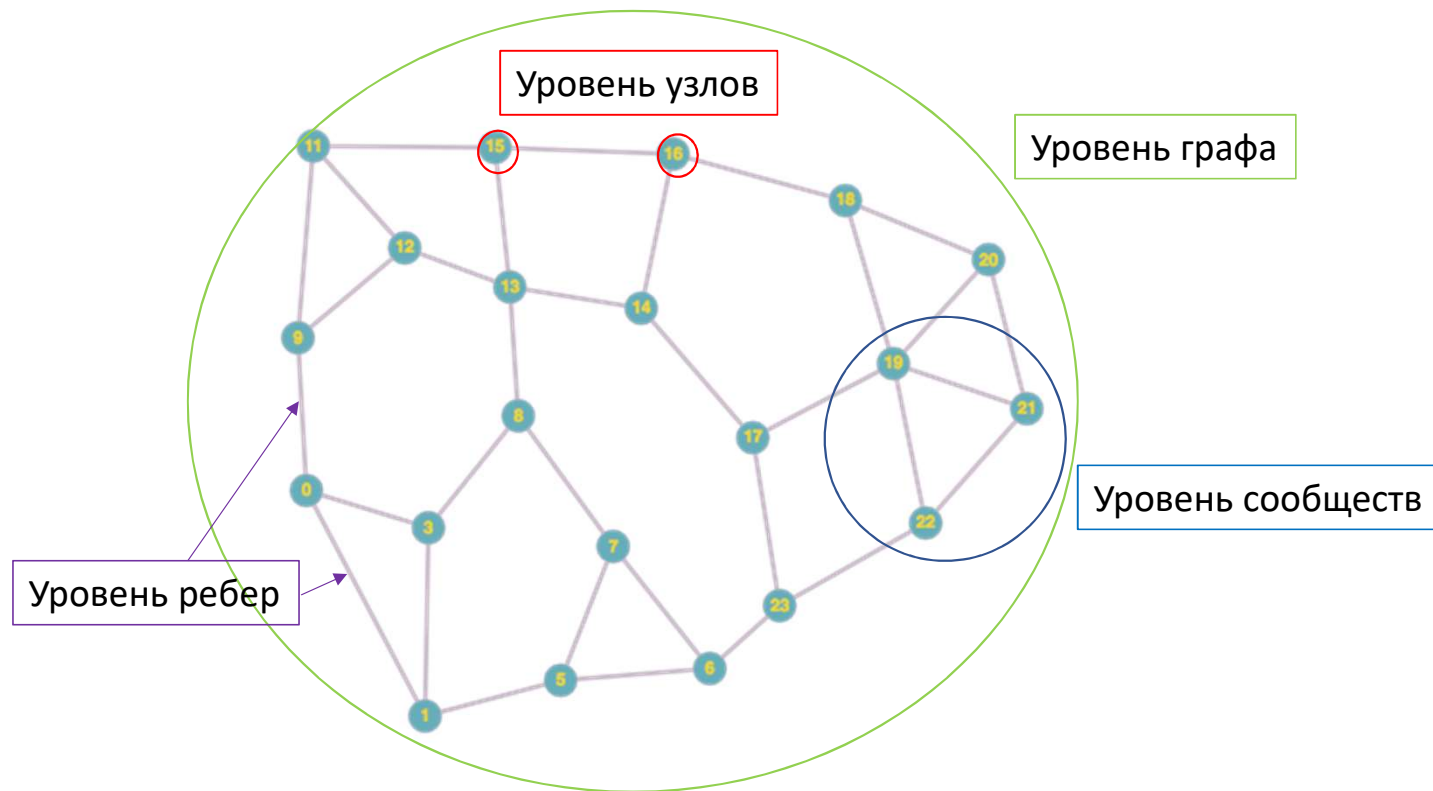
Пример: Обнаружение круга общения

Другие задачи:

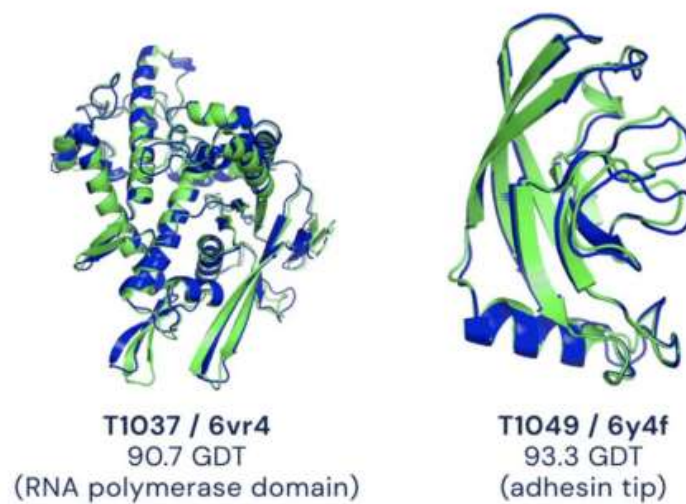
Создание графа: открытие лекарств

Эволюция графа: физическое моделирование

Уровни задач



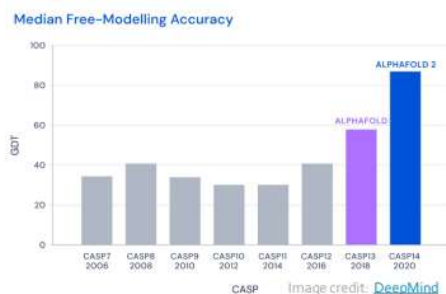
Пример: фолдинг молекул



● Experimental result
● Computational prediction

Image credit: [DeepMind](#)

Влияние



AlphaFold's AI could change the world of biological science as we know it

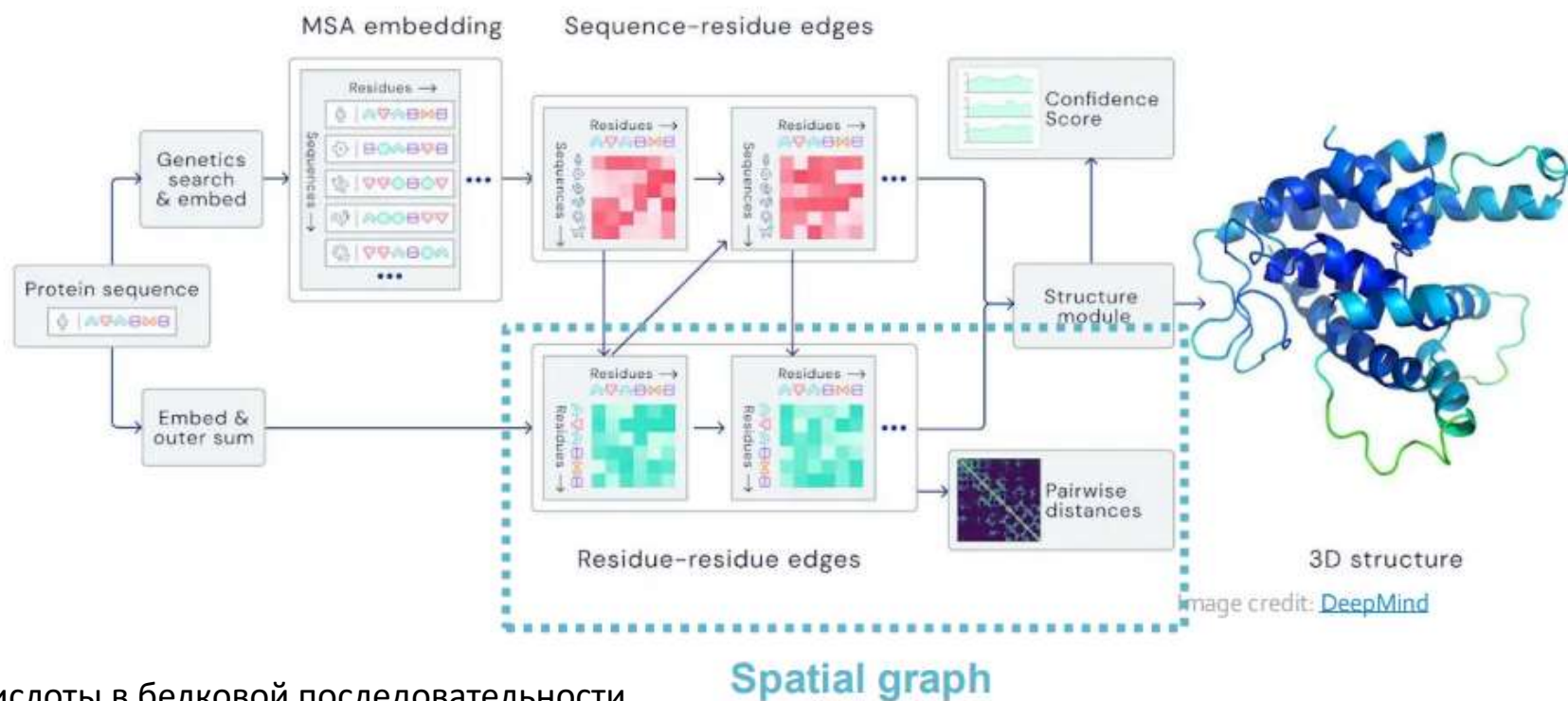
DeepMind's latest AI breakthrough can accurately predict the way proteins fold

Has Artificial Intelligence 'Solved' Biology's Protein-Folding Problem?

12-14-20

DeepMind's latest AI breakthrough could turbocharge drug discovery

Основная идея



Узлы: аминокислоты в белковой последовательности

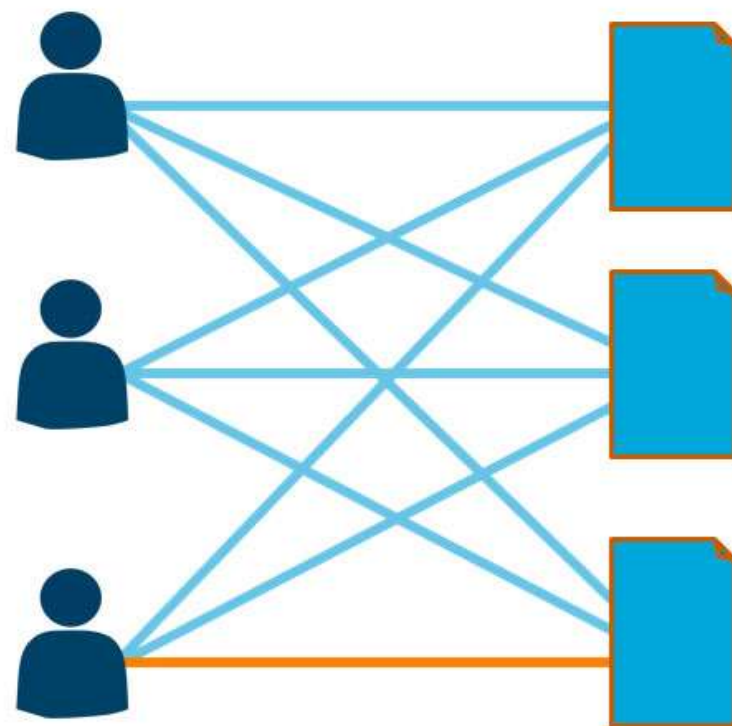
Ребра: близость между аминокислотами

Рекомендательные системы

Пользователи взаимодействуют с продуктами

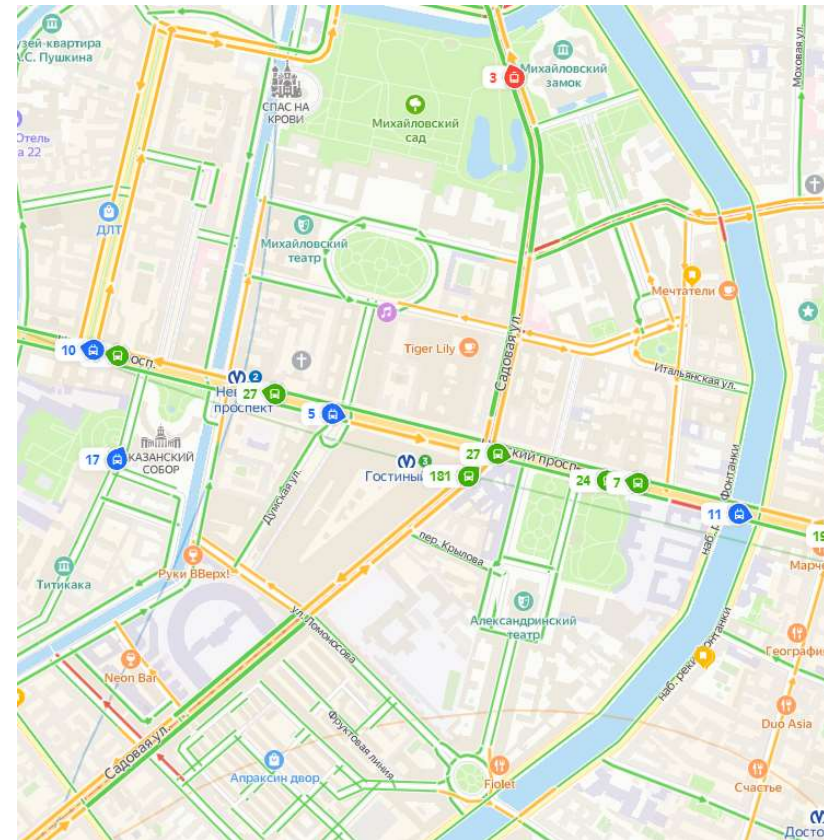
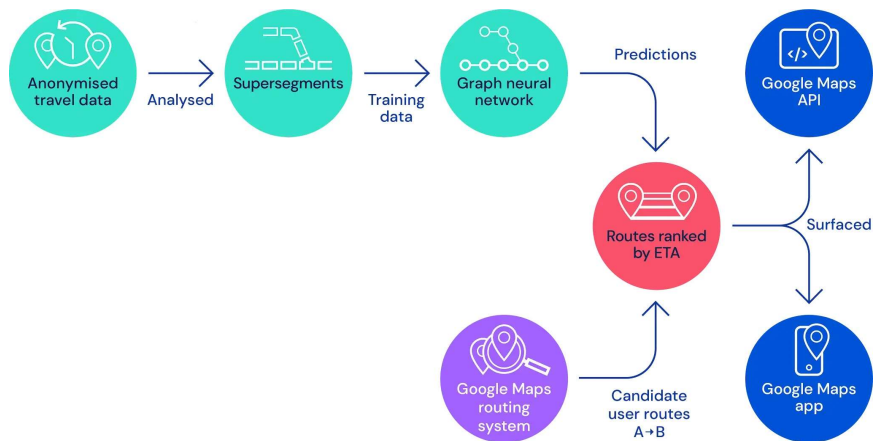
Узлы – пользователи и продукты

Ребра – взаимодействие



Предсказание трафика

- Узлы – сегменты дороги
- Ребра – перекрестки
- Или наоборот)



<https://www.deepmind.com/blog/traffic-prediction-with-advanced-graph-neural-networks>

Пайплайн



Классический пайплайн: инженерим фичи, задаем структуру графа, применяем модель

Новый пайплайн: применяем нейронную сеть на

Источники + доп.литература

- <https://neptune.ai/blog/graph-neural-network-and-some-of-gnn-applications>
- [CS224W \(stanford.edu\)](https://stanford.edu/cs224w/)
- <https://arxiv.org/pdf/1403.6652.pdf>
- <https://arxiv.org/pdf/1609.02907.pdf>
- <https://networkx.org/>
- <https://www.pyg.org/>