

PaSca:可扩展的图神经 结构搜索系统

张文涛

北京大学博士

个人主页: <https://zwt233.github.io/>



目录 CONTENT

01 问题

03 方法

02 实验

04 总结

01

问题

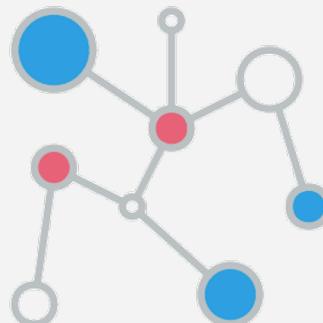


图数据

许多数据都是以图的形式存在：



社交网络



知识图谱



药物和新材料

图神经网络被广泛应用于多个场景：

- 推荐系统
- 药物发现
- 异常检测
- 蛋白质结构预测

图神经网络

图卷积神经网络(GCN)的表达形式：

第 $l+1$ 层的节点表示

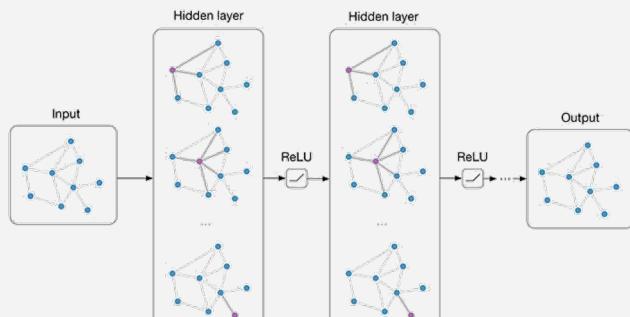
度矩阵

第 l 层的节点表示

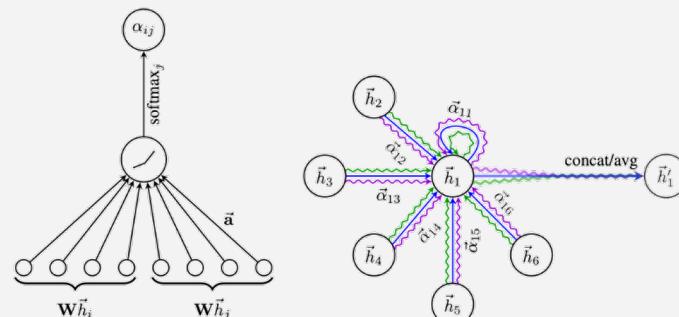
$$\mathbf{X}^{(l+1)} = \delta \left(\tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X}^{(l)} \mathbf{W}^{(l)} \right)$$

含自环的邻接矩阵

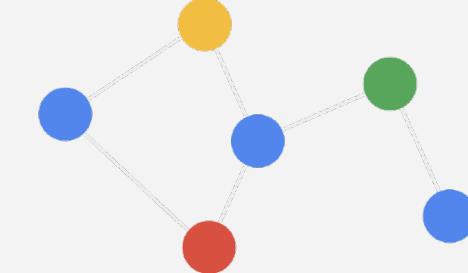
第 l 层的模型参数



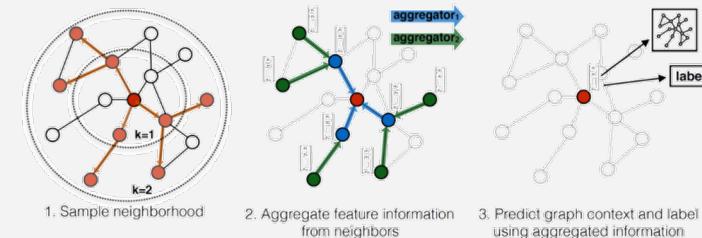
GCN



GAT



- 通过消息传播机制聚合高阶邻居的信息
- 提升自身的表达能力



GraphSAGE

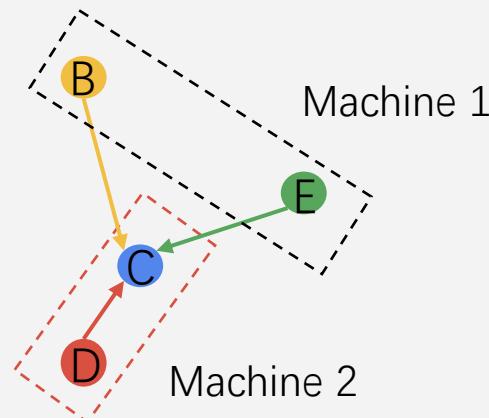
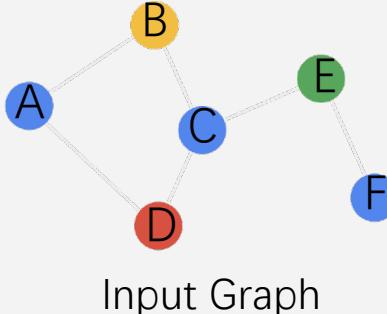
[1] Kipf T N, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. ICLR, 2017.

[2] Veličković P, Cucurull G, Casanova A, et al. Graph Attention Networks. ICLR. 2018.

[3] Hamilton W, Ying Z, Leskovec J. Inductive representation learning on large graphs. NeurIPS, 2017.

Neural Message Passing (消息传递机制)

- 传统的GNN (如GCN[1], GAT[2]) 都遵循 neural message passing (NMP , 消息传递机制) paradigm:
 - Aggregate the neighborhood information (**通信**)
$$\mathbf{m}_v^t \leftarrow \text{aggregate} \left(\{\mathbf{h}_u^{t-1} | u \in \mathcal{N}_v\} \right)$$
 - Update the message via neural networks (**计算**)
$$\mathbf{h}_v^t \leftarrow \text{update}(\mathbf{m}_v^t)$$
- 缺点: **频繁地** 从其他机器上拉取信息 → 大规模图数据上每个epoch都有的**高通信开销**



GIF from https://blog.csdn.net/DreamHome_S/article/details/105619194

[1] Thomas N Kipf and Max Welling. 2017. Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks. In ICLR.

[2] Petar Veličković, Guillem Cucurull, Arantxa Casanova, Adriana Romero, Pietro Liò, and Yoshua Bengio. 2018. Graph Attention Networks. In ICLR.

GNN 系统

大多数GNN系统使用消息传播机制

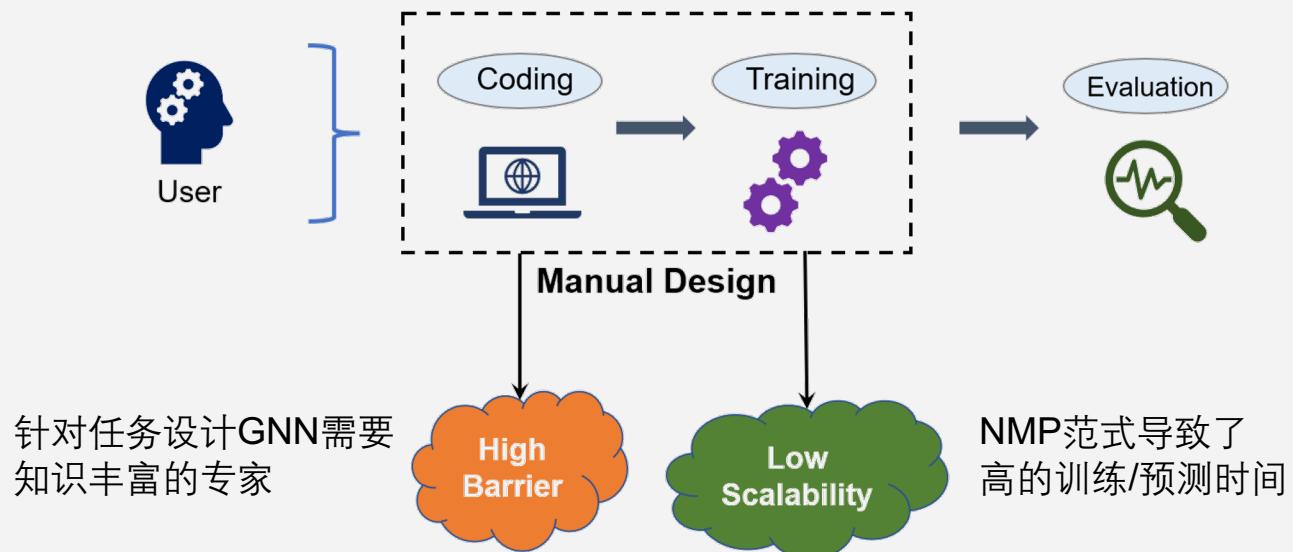


DGL[1]



PyG[2]

大规模图数据带来的挑战



[1] <https://github.com/dmlc/dgl>

[2] https://github.com/pyg-team/pytorch_geometric

瓶颈

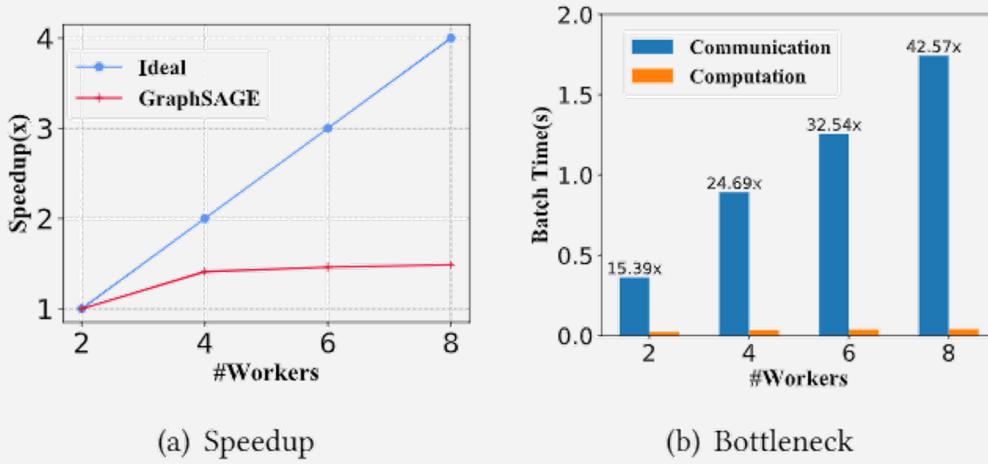


Figure 2: The speedup and bottleneck of a two-layer GraphSAGE along with the increased workers on Reddit dataset.

可扩展性：受制于单机的存储开销和分布式通讯开销，现有的消息传递机制不能很好地扩展到大图上。

- 增加更多机器时候，加速比增长不明显
- 通信开销占比过大

目标：如何兼顾GNN的**可扩展性**，设计**使用门槛低**的图神经网络系统？

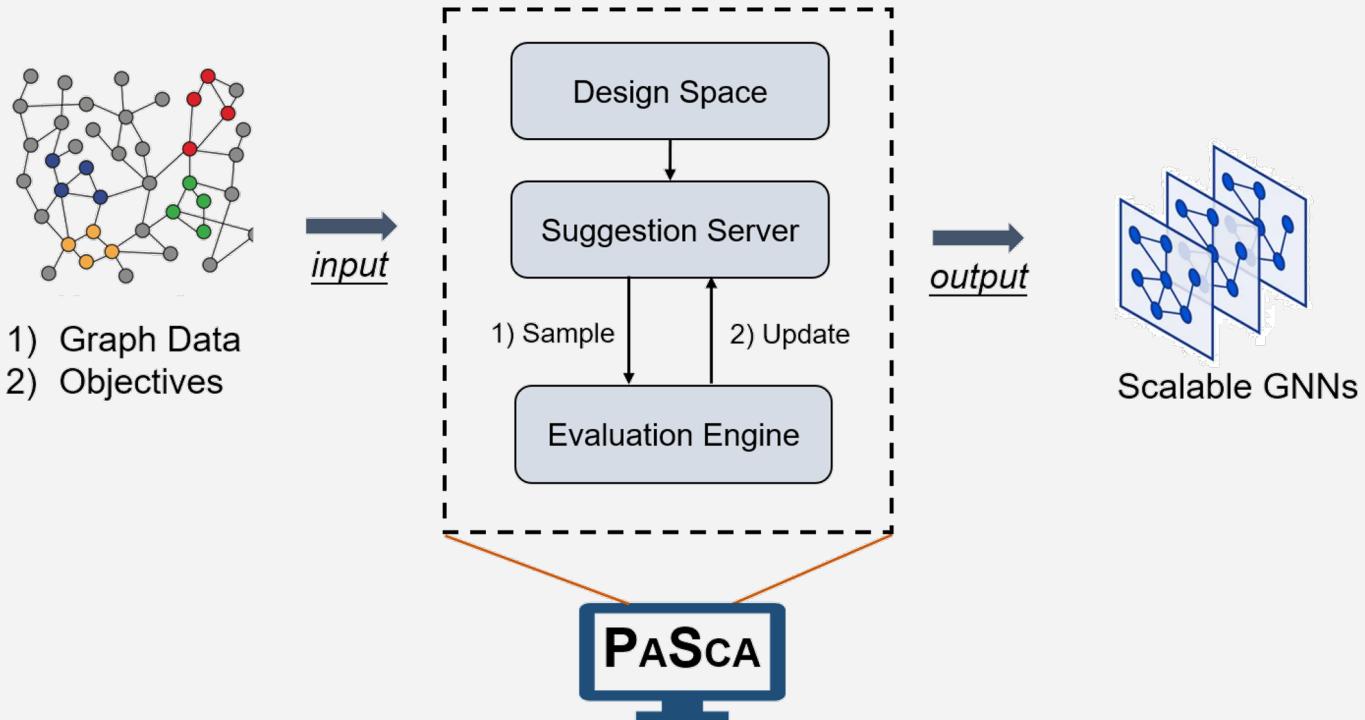
02

方法



系统目标

- 输入: 图数据 + 优化目标
- 输出: 能兼顾多个优化目标的**Scalable GNN**



端到端系统，无需人为定义网络结构和训练流程

消息传递 (Message Passing) 范式

$$\mathbf{x}_i^{(k)} = \gamma^{(k)} \left(\mathbf{x}_i^{(k-1)}, \bigcup_{j \in \mathcal{N}(i)} \phi^{(k)} \left(\mathbf{x}_i^{(k-1)}, \mathbf{x}_j^{(k-1)}, \mathbf{e}_{j,i} \right) \right)$$

Aggregate Function

Update Function Message Function

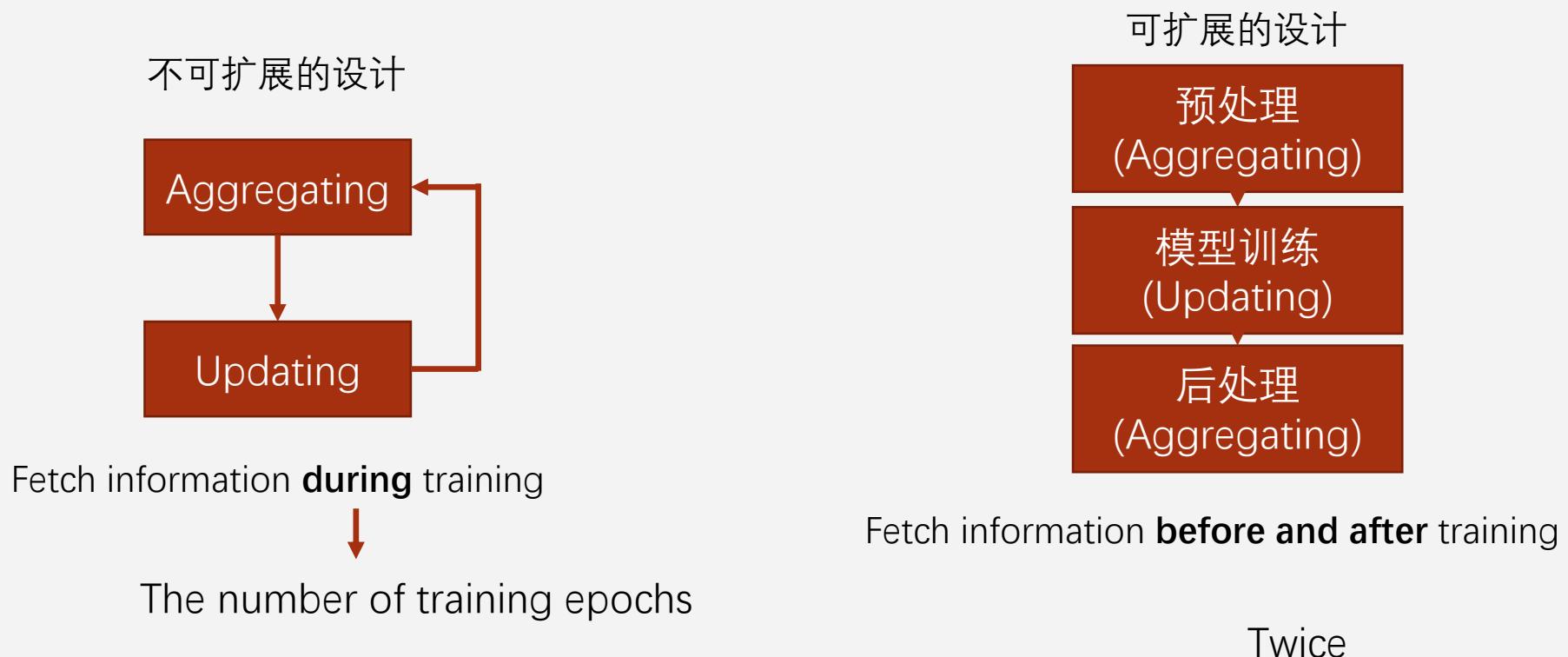
不断迭代的“聚合-更新”流程。

消息传递范式从**节点**层次来刻画数据的流动，主要由三个操作构成：

- 1. Message Function**：定义了从**生成信息**的方式；
- 2. Aggregate Function**：定义了**聚合信息**的方式；
- 3. Update Function**：定义了**更新中心节点特征**的方式。

方法概览

- Scalable Graph Neural Architecture Paradigm (SGAP建模范式)
 - 定义可扩展训练流程的抽象
- 自动搜索系统 (PaSca)



$$\mathbf{M} = \text{graph_propagate}(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \quad (1)$$

$$\mathbf{X}' = \text{message_aggregate}(\mathbf{M}) \quad (2)$$

$$\mathbf{Y} = \text{model_train}(\mathbf{X}') \quad (3)$$

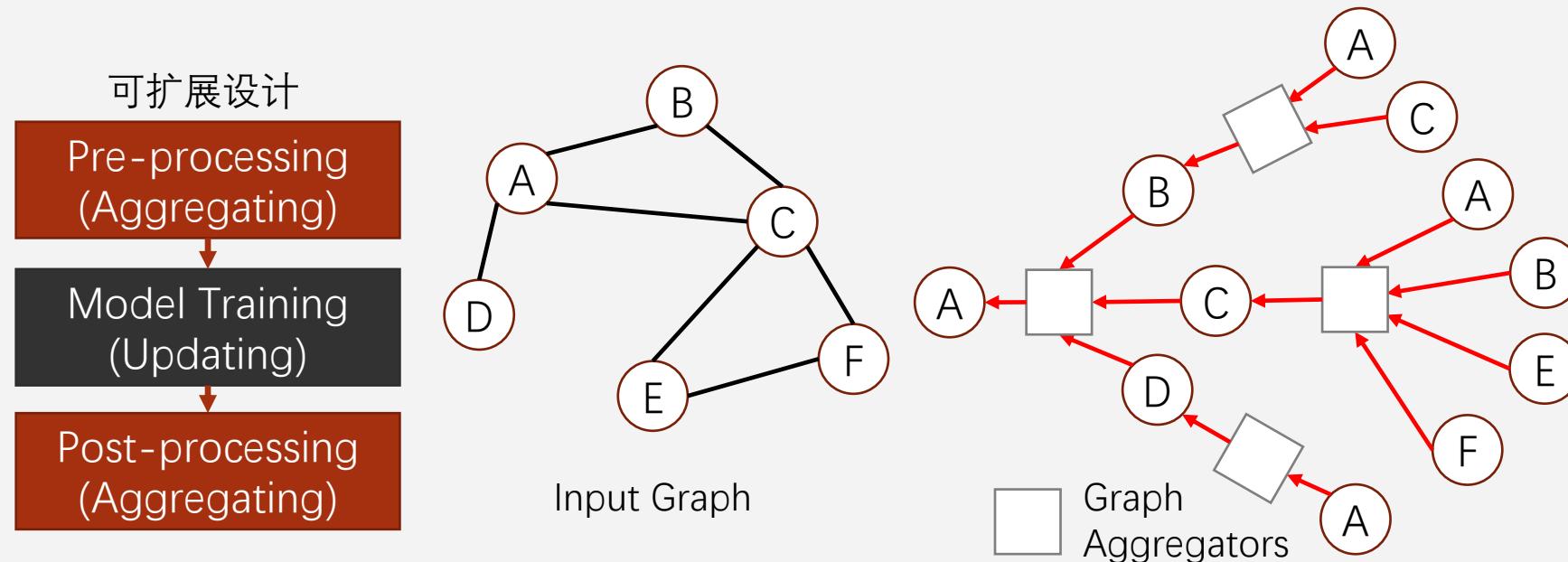
SGAP从图的层次刻画数据的流动，主要由三个操作构成：

- (1) : 在图的层级传播信息，得到不同传播层数的消息， \mathbf{M} ；
- (2) : 聚合不同传播层数的消息，得到新的特征， \mathbf{X}' ；
- (3) : 将 \mathbf{X}' 送入一个机器学习模型（如MLP）进行训练，得到最终输出， \mathbf{Y} 。

SGAP抽象

- 预处理
 - 从邻居节点聚合消息（**特征**）
- 后处理
 - 从邻居节点聚合消息（**软标签**）

$$\mathbf{m}_v^t \leftarrow \text{graph_aggregator} \left(\{\mathbf{m}_u^{t-1} | u \in \mathcal{N}_v\} \right)$$



Graph Aggregator (图聚合器)

- 抽象 $\mathbf{m}_v^t \leftarrow \text{graph_aggregator} \left(\{\mathbf{m}_u^{t-1} | u \in \mathcal{N}_v\} \right)$
- Augmented normalized adjacency (used in GCN[1])

$$\mathbf{m}_v^t = \sum_{u \in \mathcal{N}_v} \frac{1}{\tilde{d}_u} \mathbf{m}_u^{t-1}$$

- Personalized PageRank (used in APPNP[2])

$$\mathbf{m}_v^t = \alpha \mathbf{m}_v^0 + (1 - \alpha) \sum_{u \in \mathcal{N}_v} \frac{1}{\sqrt{\tilde{d}_v \tilde{d}_u}} \mathbf{m}_u^{t-1}$$

- Triangle-induced adjacency (used MotifNet[3])

$$\mathbf{m}_v^t = \sum_{u \in \mathcal{N}_v} \frac{1}{d_v^{tri}} \mathbf{m}_u^{t-1}$$

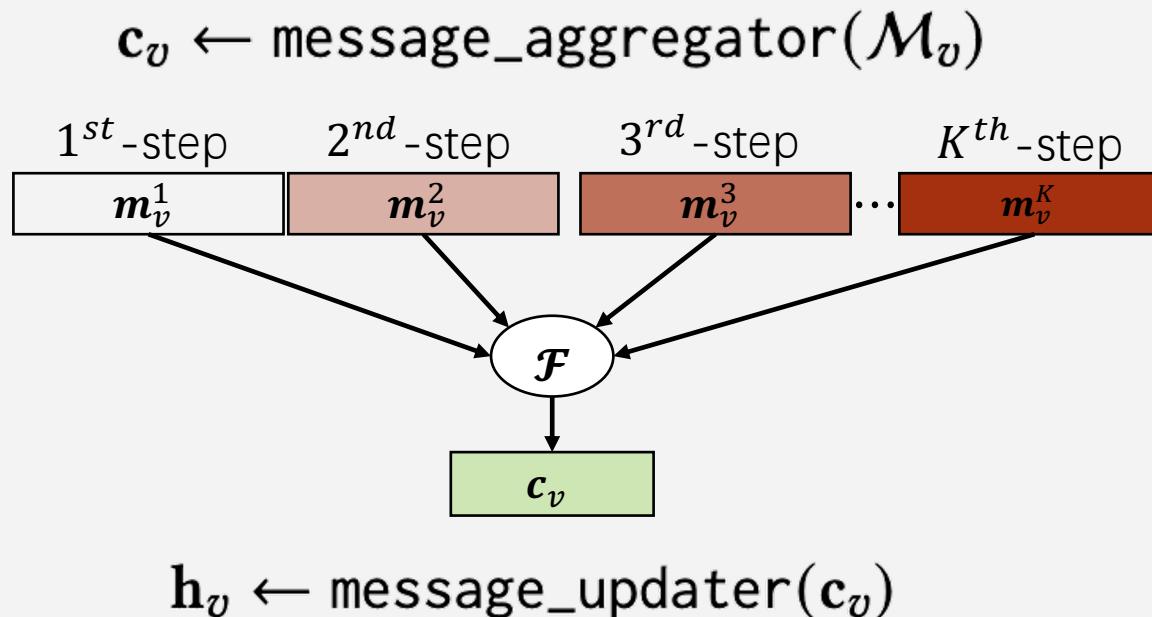
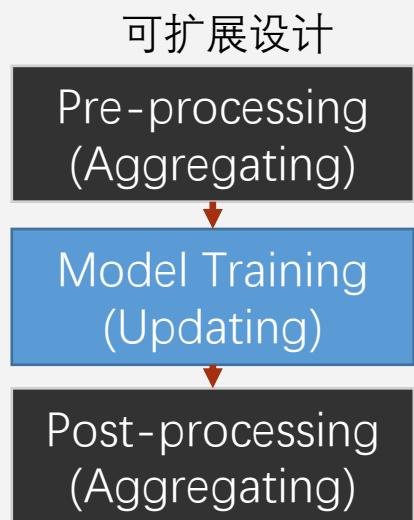
[1] Thomas N Kipf and Max Welling. 2017. Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks. In ICLR.

[2] Johannes Klicpera, Aleksandar Bojchevski, and Stephan Günnemann. 2019. Predict then Propagate: Graph Neural Networks meet Personalized PageRank. In ICLR.

[3] Federico Monti, Karl Otness, and Michael M Bronstein. 2018. Motifnet: a motif-based graph convolutional network for directed graphs. In 2018 IEEE Data Science Workshop (DSW). IEEE, 225–228.

- 训练

- 聚合来自预处理阶段的消息
- 更新聚合后的消息



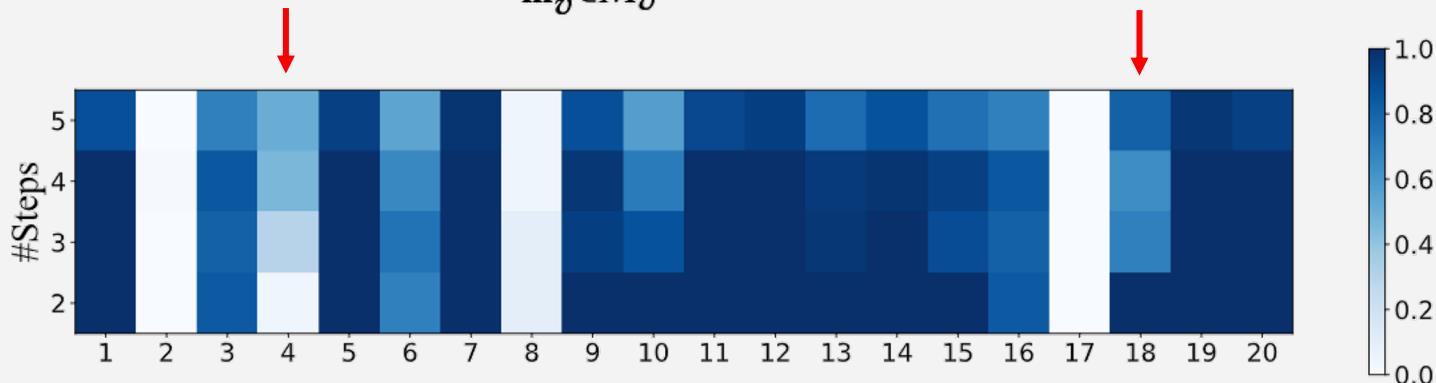
Message Aggregator (消息聚合器)

- 抽象 $c_v \leftarrow \text{message_aggregator}(\mathcal{M}_v)$
- 非自适应聚合器 (mean, max)

$$c_{msg} \leftarrow \oplus_{\mathbf{m}_v^i \in M_v} w_i f(\mathbf{m}_v^i)$$

- 自适应聚合器 (gate with trainable parameters)

$$c_{msg} \leftarrow \sum_{\mathbf{m}_v^i \in M_v} w_i \mathbf{m}_v^i, w_i = \sigma(\mathbf{s}\mathbf{m}_v^i)$$



应该给不同节点的不同层表示消息不同的权重!

SGAP范式

Algorithm 1: An example of scalable graph neural architectures following SGAP.

Input: Graph $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, aggregation depth K_{pre}, K_{post} , features \mathbf{x}_v for each node $v \in \mathcal{V}$.

Output: Prediction message $\mathbf{m}_v^{K_{post}}$ for each node $v \in \mathcal{V}$.

1 Initialize message set $\mathcal{M}_v = \{\mathbf{x}_v\}$ for each node $v \in \mathcal{V}$;

2 **Stage 1: Pre-processing**

3 Initialize feature message $\mathbf{m}_v^0 = \mathbf{x}_v$ for each node $v \in \mathcal{V}$;

4 **for** $1 \leq t \leq K_{pre}$ **do**

5 **for** $v \in \mathcal{V}$ **do**

6 $\mathbf{m}_v^t \leftarrow \text{graph_aggregator}(\mathbf{m}_{N_v}^{t-1})$;

7 $\mathcal{M}_v = \mathcal{M}_v \cup \{\mathbf{m}_v^t\}$;

8 $\mathbf{c}_v \leftarrow \text{message_aggregator}(\mathcal{M}_v)$;

9 **Stage 2: Model-training**

10 **for** $v \in \mathcal{V}$ **do**

11 $\mathbf{h}_v \leftarrow \text{message_updater}(\mathbf{c}_v)$;

12 **Stage 3: Post-processing**

13 Initialize feature message $\mathbf{m}_v^0 = \mathbf{h}_v$ for each node $v \in \mathcal{V}$;

14 **for** $1 \leq t \leq K_{post}$ **do**

15 **for** $v \in \mathcal{V}$ **do**

16 $\mathbf{m}_v^t \leftarrow \text{graph_aggregator}(\mathbf{m}_{N_v}^{t-1})$;

基于**SGAP** 范式来设计GNN：

1. 前处理

对每个节点 v , 变换消息聚合次数 t 从 1 到 K_{pre} , 并使用 graph_aggregator 来聚合 K_{pre} 次邻居节点 N_v 的特征。

2. 训练

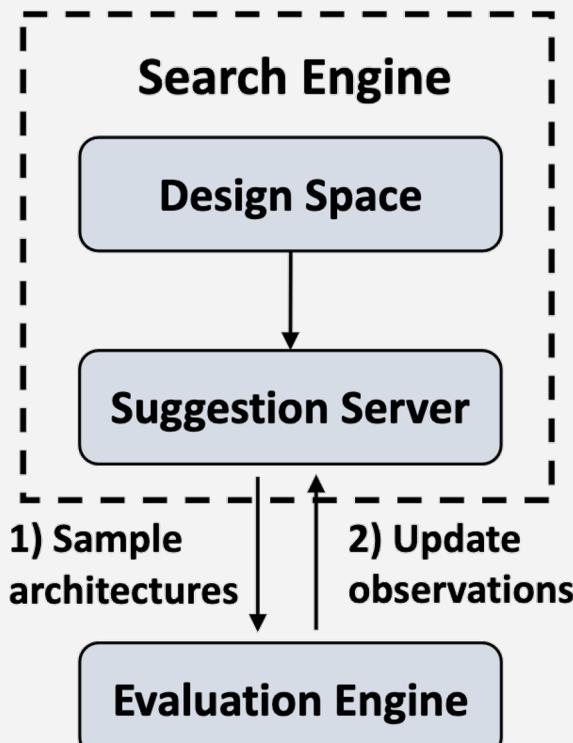
基于聚合后的特征, 利用 message_updater (如MLP) 来学习节点的软标签类别分布。

3. 后处理

讲软标签当做新的特征 , 并使用 graph_aggregator 来聚合邻居的标签信息 K_{post} 次 , 得到最终预测。

方法概览

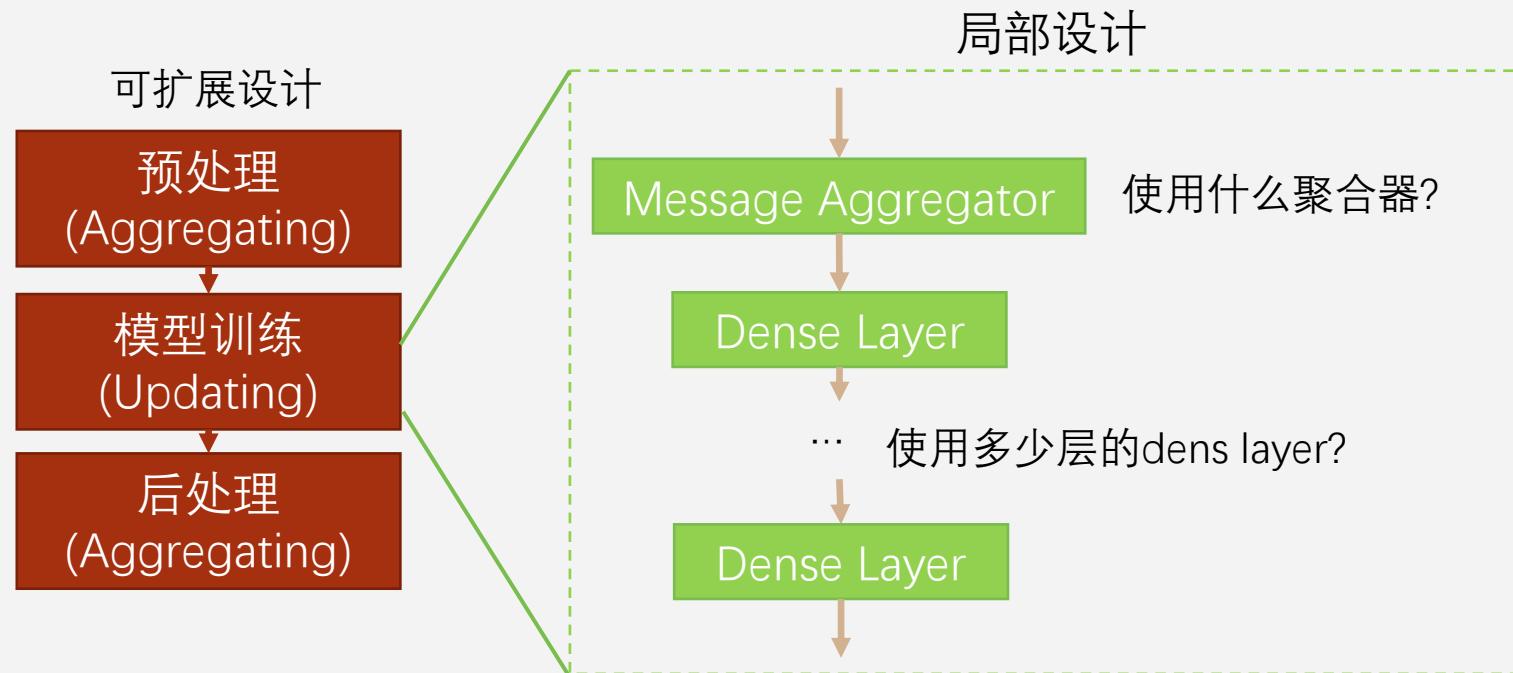
- 可扩展范式 (SGAP)
- 自动化搜索系统 (PaSca)
 - 两个模块
 - (自动化) 搜索引擎
 - (分布式) 评估引擎
 - 搜索引擎推荐一个 configuration instance.
 - 评估引擎 **评估 被推荐的** configuration instance.



Searching

Search Engine (搜索引擎)

- 处理不同优化目标之间的 tradeoff
- 设计空间: 在SGAP 3 个阶段的局部设计 (参数)



Design Space (设计空间)

- 6 个参数可供选择 + 每个阶段2个参数
- 超过 150k 种可能的 configuration instances

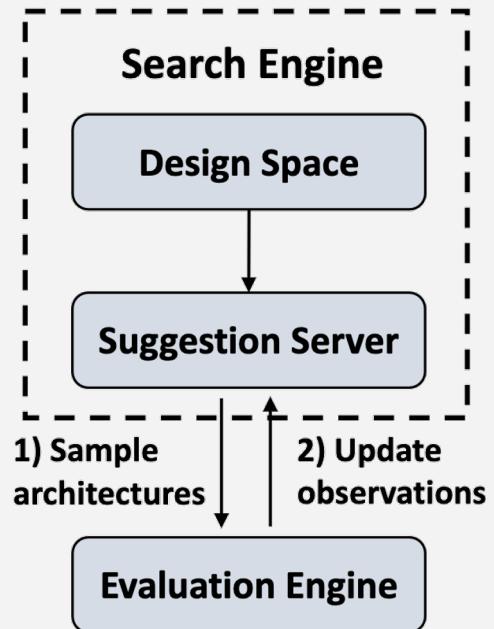
Stages	Name	Range/Choices	Type
Pre-processing	Aggregation steps (K_{pre})	[0, 10]	Integer
	Graph aggregators (GA_{pre})	{Aug.NA, PPR($\alpha = 0.1$), PPR($\alpha = 0.2$), PPR($\alpha = 0.3$), Triangle. IA}	Categorical
Model training	Message aggregators (MA)	{None, Mean, Max, Concatenate, Weighted, Adaptive}	Categorical
	Transformation steps (K_{trans})	[1, 10]	Integer
Post-processing	Aggregation steps (K_{post})	[0, 10]	Integer
	Graph aggregators (GA_{post})	{Aug.NA, PPR($\alpha = 0.1$), PPR($\alpha = 0.2$), PPR($\alpha = 0.3$), Triangle. IA}	Categorical

- 现有的Scalable GNN都存在于我们设定的空间中

Models	Pre-processing	Model training		Post-processing
	GA_{pre}	MA	K_{trans}	GA_{post}
SGC	Aug.NA	None	1	/
SIGN	Optional	Concatenate	1	/
S^2GC	PPR	Mean	1	/
GBP	Aug.NA	Weighted	≥ 2	/
PASCA-APPNP	/	/	≥ 2	PPR

Suggestion Server (推荐服务器)

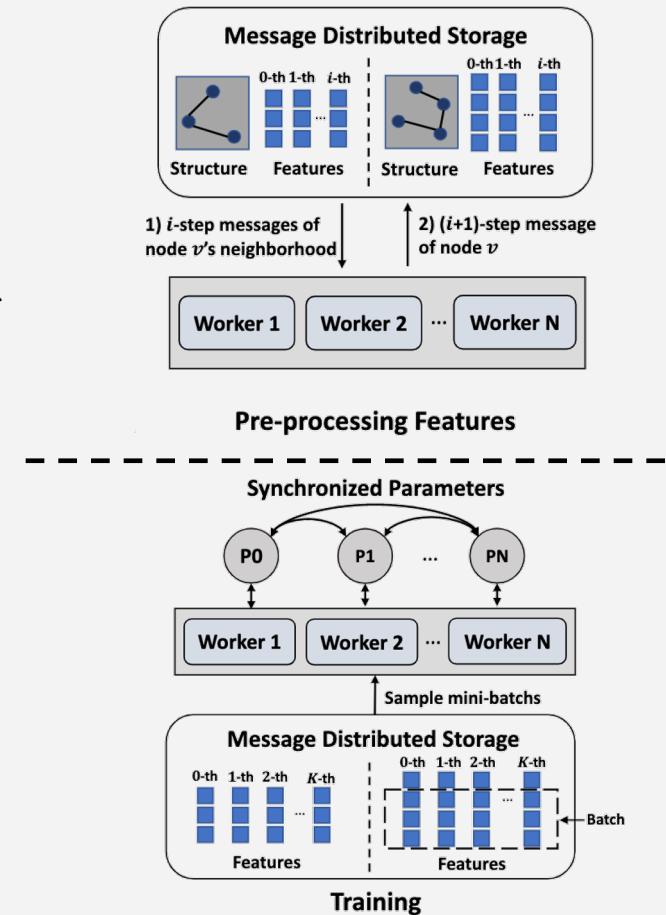
- 建模 配置 和 优化目标之间的关系
- 推荐 能兼顾多个优化目标的配置
- 更新 观测到的历史记录



Searching

Evaluation Engine (评估引擎)

- Graph data aggregator (图数据聚合器)
 - 切分大图
 - 基于已经计算好的第 (i) 步消息来 计算第(i+1) 步消息
- Neural architecture trainer (网络结构训练器)
 - Mini-batch 训练
 - 基于parameter server的异步网络更新



03

实验



实验设置

- **数据集**

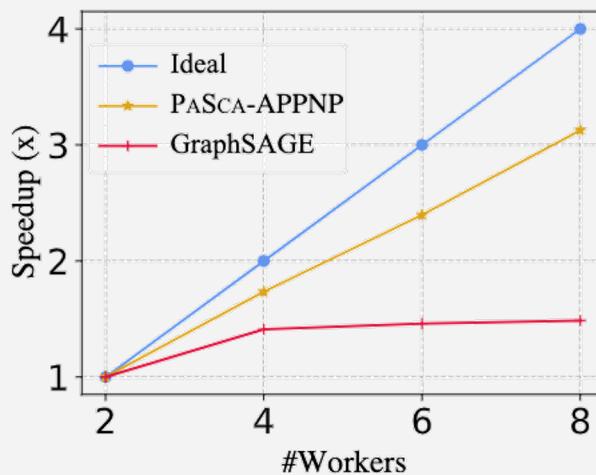
Dataset	#Nodes	#Features	#Edges	#Classes	#Train/Val/Test	Task type	Description
Cora	2,708	1,433	5,429	7	140/500/1000	Transductive	citation network
Citeseer	3,327	3,703	4,732	6	120/500/1000	Transductive	citation network
Pubmed	19,717	500	44,338	3	60/500/1000	Transductive	citation network
Amazon Computer	13,381	767	245,778	10	200/300/12881	Transductive	co-purchase graph
Amazon Photo	7,487	745	119,043	8	160/240/7,087	Transductive	co-purchase graph
ogbn-products	2,449,029	100	61,859,140	47	195922/489811/204126	Transductive	co-purchase network
Coauthor CS	18,333	6,805	81,894	15	300/450/17,583	Transductive	co-authorship graph
Coauthor Physics	34,493	8,415	247,962	5	100/150/34,243	Transductive	co-authorship graph
Flickr	89,250	500	899,756	7	44,625/22,312/22,312	Inductive	image network
Reddit	232,965	602	11,606,919	41	155,310/23,297/54,358	Inductive	social network
Industry	1,000,000	64	1,434,382	253	5,000/10,000/30,000	Transductive	user-video graph

- 验证目标

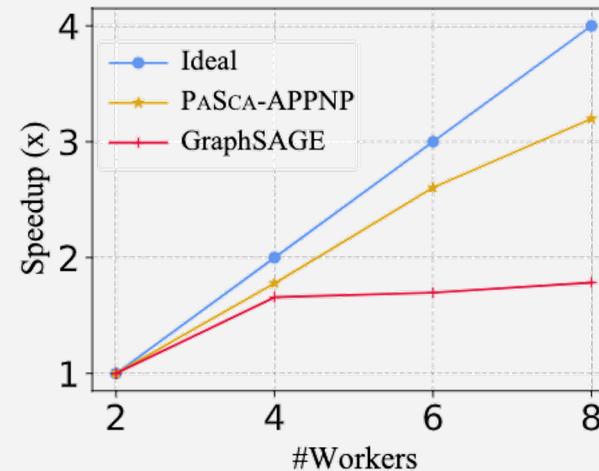
- SGAP 比基于NMP的消息传递机制 **更scalable**,
- PaSca搜索出来的结果能够很好地处理**不同搜索目标之间的tradeoff**。
- 搜索结构能够取得**更高的预测性能**。

Scalability Analysis (可扩展性分析)

- 对比方法
 - 基于 SGAP的APPNP
 - 基于NMP的GraphSAGE
- 基于 SGAP 的GNN可以取得接近线性的加速比并且更加接近理想的加速比。



Reddit (>230K nodes)



ogbn-product (>2.4M nodes)

Search Representatives (搜索出来的代表性方法)

- 代表性方法 (在帕累托平面上的)
 - 从SGAP设计空间搜索出来的方法能兼顾多个搜索目标之间的tradeoff。
 - PaSca-V3 取得了最低的预测误差但带来了比PaSca-V2更长的预测时间。
- 我们搜索出来的结果GBP[1], 一个 SOTA 的可扩展网络结构

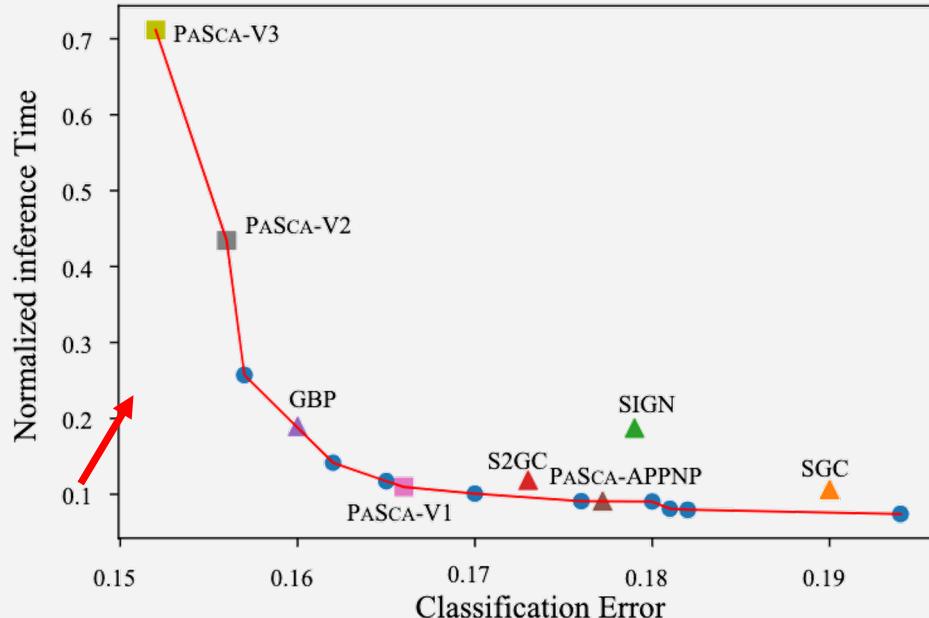


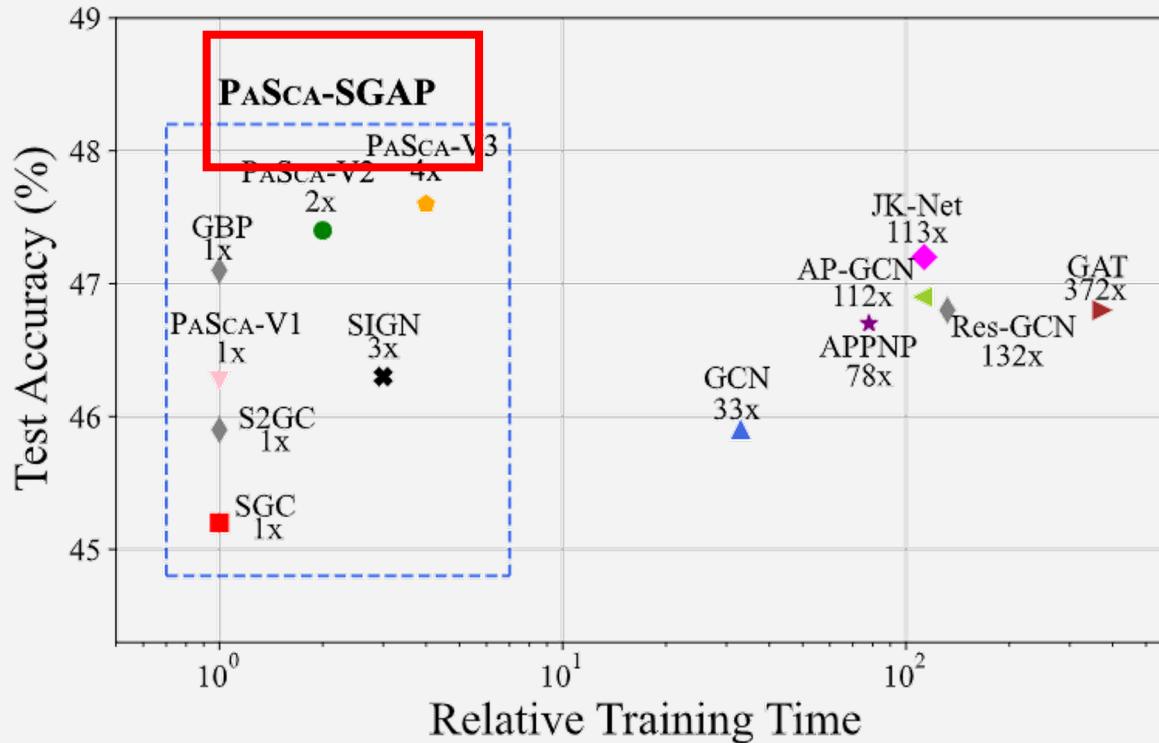
Table 3: Scalable GNNs found by PaSca.

Models	Pre-processing			Model training	Post-processing	
	GA _{pre}	MA	K _{pre}		GA _{post}	K _{post}
PASCA-V1	PPR($\alpha = 0.1$)	Weighted	3	2	/	/
PASCA-V2	Aug.NA	Adaptive	6	2	/	/
PASCA-V3	Aug.NA	Adaptive	6	3	PPR ($\alpha = 0.3$)	4

[1] Chen M, Wei Z, Ding B, et al. 2020. Scalable graph neural networks via bidirectional propagation[J]. In NeurIPS.

Search Representatives (搜索出来的代表性方法)

- 搜索出来的模型能很好兼顾训练时间与测试准确率。
- PaSca V2 和 V3 都获得了比 JK-Net 更好的准确率，但是只需要明显更少的训练时间。



[1] Xu K, Li C, Tian Y, et al. 2018. Representation learning on graphs with jumping knowledge networks. In ICML.

预测性能

- 和其他不scalable的建模范式相比，基于SGAP的网络结构 能取得有竞争力的模型性能。
- PaSca-V3 在不同数据集上都取得了最好的性能。

Type	Models	Cora	Citeseer	PubMed	Amazon Computer	Amazon Photo	Coauthor CS	Coauthor Physics	Industry
NMP	GCN	81.8±0.5	70.8±0.5	79.3±0.7	82.4±0.4	91.2±0.6	90.7±0.2	92.7±1.1	45.9±0.4
	GAT	83.0±0.7	72.5±0.7	79.0±0.3	80.1±0.6	90.8±1.0	87.4±0.2	90.2±1.4	46.8±0.7
	JK-Net	81.8±0.5	70.7±0.7	78.8±0.7	82.0±0.6	91.9±0.7	89.5±0.6	92.5±0.4	47.2±0.3
	ResGCN	82.2±0.6	70.8±0.7	78.3±0.6	81.1±0.7	91.3±0.9	87.9±0.6	92.2±1.5	46.8±0.5
DNMP	APPNP	83.3±0.5	71.8±0.5	80.1±0.2	81.7±0.3	91.4±0.3	92.1±0.4	92.8±0.9	46.7±0.6
	AP-GCN	83.4±0.3	71.3±0.5	79.7±0.3	83.7±0.6	92.1±0.3	91.6±0.7	93.1±0.9	46.9±0.7
SGAP	SGC	81.0±0.2	71.3±0.5	78.9±0.5	82.2±0.9	91.6±0.7	90.3±0.5	91.7±1.1	45.2±0.3
	SIGN	82.1±0.3	72.4±0.8	79.5±0.5	83.1±0.8	91.7±0.7	91.9±0.3	92.8±0.8	46.3±0.5
	S ² GC	82.7±0.3	73.0±0.2	79.9±0.3	83.1±0.7	91.6±0.6	91.6±0.6	93.1±0.8	45.9±0.4
	GBP	83.9±0.7	72.9±0.5	80.6±0.4	83.5±0.8	92.1±0.8	92.3±0.4	93.3±0.7	47.1±0.6
	PaSca-V1	83.4±0.5	72.2±0.5	80.5±0.4	83.7±0.7	92.1±0.7	91.9±0.3	93.2±0.6	46.3±0.4
	PaSca-V2	84.4±0.3	73.1±0.3	80.7±0.7	84.1±0.7	92.4±0.7	92.6±0.4	93.6±0.8	47.4±0.6
	PaSca-V3	84.6±0.6	73.4±0.5	80.8±0.6	84.8±0.7	92.7±0.8	92.8±0.5	93.8±0.9	47.6±0.3

04 总结



系统应用

- 实现了能自动化建模10亿节点的**超大规模图神经网络系统**，部署于腾讯太极机器学习平台，并广泛应用于**视频推荐和内容风控等场景**
- 系统部分功能已在Github开源：<https://github.com/PKU-DAIR/SGL>
- 系统论文获得**CCF A类数据挖掘旗舰会议WWW 2022 唯一“最佳学生论文奖”**（中国第2个）
- 系统相关工作刷新了国际图学习榜单**OGB的3项第一**

Best Student Paper Award

PaSca: a Graph Neural Architecture Search System under the Scalable Paradigm
Systems and Infrastructure Track



Rank	Method	Test Accuracy	Validation Accuracy	Contact	References	#Params	Hardware	Date
1	NARS-GAMLP+RLU	0.5590 ± 0.0027	0.5702 ± 0.0041	Wentao Zhang (PKU Tencent Joint Lab)	Paper, Code	6,734,882	Tesla V100 (32GB)	Aug 19, 2021

Leaderboard for ogbn-mag
The classification accuracy on the test and validation sets. The higher, the better.
Package: >=1.2.1

腾讯Angel Graph团队刷新GNN最强榜单OGB世界纪录！

腾讯大数据 2021-09-01 17:39

OGB

<https://www2022.thewebconf.org/awards/>

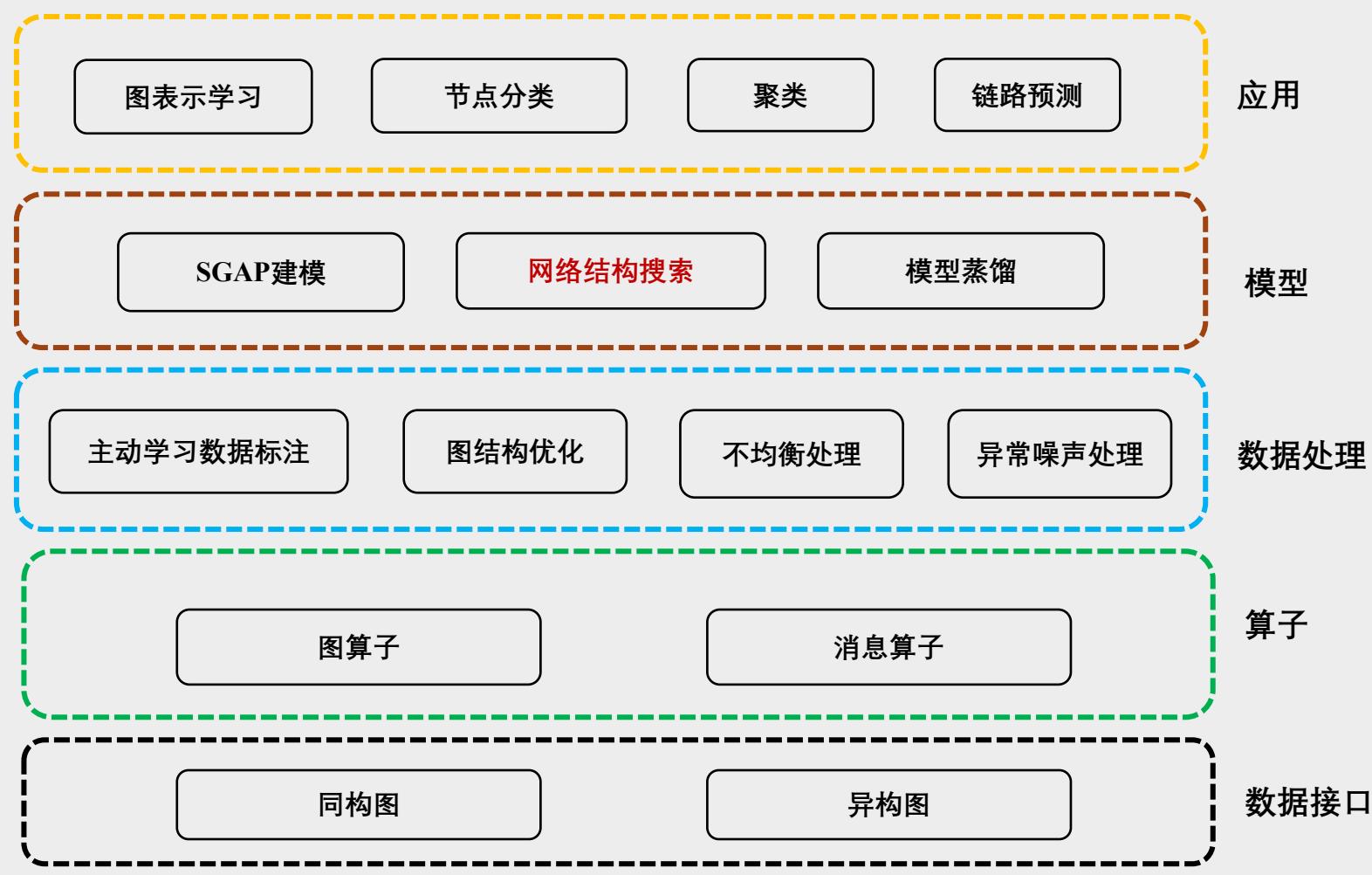
刷新国际图学习榜单
https://ogb.stanford.edu/docs/leader_nodeprop/

总结

- 我们设计了PaSca, 一个新颖的构建和探索可扩展 GNNs的网络结构搜索系统，而不是仅研究单个的网络结构设计。
- PaSca搜索出来的代表性模型能够在预测性能、效率以及可扩展性等多个方面超越现有的SOTA GNN 模型。
- PaSca能够帮助研究者来探索不同的Scalable GNN结构设计，并且理解不同设计的特点和功能。

系统开源

<https://github.com/PKU-DAIR/SGL>



SGL系统设计目标

1. 高可扩展性:

基于SGAP, SGL能处理超大规模图数据

2. 自动化:

根据指定的多个目标自动化搜索网络结构

3. 易用性:

针对多个任务定制的用户友好的接口

4. 针对数据的优化

多种数据处理操作

5. Bag of Tricks

内置多种有效的提点方法

非常感谢您的观看

