



Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων

Ιωάννης Μαδεμλής

Δεδομένα γράφων

- Οι περισσότερες μέθοδοι εξόρυξης γνώσης απαιτούν τα πρότυπα εισόδου να είναι διανύσματα γνωστής/σταθερής διάστασης.

- Τι συμβαίνει όμως όταν τα δεδομένα μας είναι γράφοι;

- Κοινωνικά δίκτυα.



- Μοριακή δομή.



- Κινούμενος ανθρώπινος σκελετός σε βίντεο.



- Συγκοινωνιακά δίκτυα.



- Συστήματα συστάσεων.



- ...

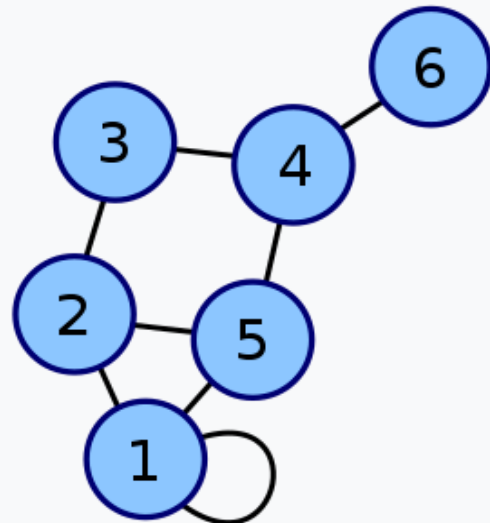
Γράφοι

Δεδομένα γράφων

- Έστω γράφος N κόμβων και M ακμών.
- Πώς αναπαρίσταται;
 - Πίνακας γειτνίασης (adjacency).
- Απλός πίνακας γειτνίασης \mathbf{A} (διάστασης $N \times N$).
- Βεβαρυμμένος πίνακας γειτνίασης \mathbf{P} (διάστασης $N \times N$).
 - Αν ο i -οστός και ο j -οστός κόμβος συνδέονται με ακμή, τότε γειτνιάζουν.
 - Αν γειτνιάζουν, το στοιχείο $p_{ij} = p_{ji}$ ισούται με το βάρος της μεταξύ τους ακμής.
 - $a_{ij} = a_{ji} = 1$, σε απλό πίνακα \mathbf{A} .
 - Αν δεν γειτνιάζουν, τότε $p_{ij} = p_{ji} = 0$ ή $a_{ij} = a_{ji} = 0$.

Δεδομένα γράφων

- Απλός πίνακας γειτνίασης.
 - Κάθε βάρος ακμών ισούται με 1.
 - Δύο κόμβοι οι οποίοι συνδέονται άμεσα μέσω ακμής λέγονται *άμεσοι γείτονες*, ή *γείτονες ενός άλματος*.
 - Παρομοίως ορίζονται γείτονες δύο αλμάτων, τριών αλμάτων, κοκ.



$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Πηγή: *Wikipedia*.

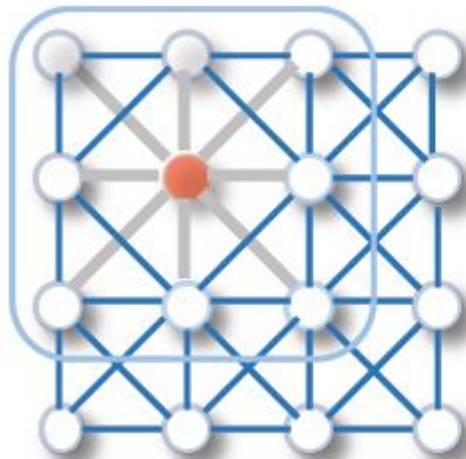
Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων

- Τα **Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων** (Graph Neural Networks, GNNs) είναι μία οικογένεια νευρωνικών αρχιτεκτονικών οι οποίες δέχονται ως είσοδο γράφους, αντί για απλά διανύσματα.
- Στους εν λόγω γράφους, κάθε κόμβος συνοδεύεται από ένα πολυδιάστατο διάνυσμα χαρακτηριστικών.
- Τετριμμένο παράδειγμα: μία έγχρωμη εικόνα είναι ένας γράφος με τόσους κόμβους όσα τα pixel και ένα 3-διάστατο διάνυσμα χαρακτηριστικών (τιμές R, G, B) σε κάθε κόμβο.
 - Η συνδεσιμότητα ενός τέτοιου γράφου είναι αυτή ενός πυκνού πλέγματος, αφού κάθε pixel συνδέεται μέσω ακμής με καθέναν από τους 8 χωρικούς γείτονές του (γειτονικά pixel).
- Ένα GNN μπορεί να χειριστεί τέτοιους γράφους, αλλά και πολύ γενικότερους.
 - Η συνδεσιμότητα μπορεί να είναι πολύ πιο αυθαίρετη, με διαφορετικό πλήθος γειτόνων ανά κόμβο και όχι συγκεκριμένη χωρική διάταξη κόμβων.

Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων

Δεδομένα γράφων

- Η εικόνα (αριστερά) είναι πολύ ειδική περίπτωση γράφου σε μορφή πυκνού πλέγματος.
- Ένας αυθαίρετος γράφος (δεξιά) δεν έχει συγκεκριμένη διάταξη στους κόμβους του και κάθε κόμβος έχει διαφορετικό πλήθος άμεσων γειτόνων/ακμών.



Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων

Πηγή: Wu et al., "A comprehensive survey on Graph Neural Networks", *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2020.

Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων

- Ένα εκπαιδευμένο GNN απεικονίζει τα διανύσματα των κόμβων εισόδου σε νέα διανύσματα.
 - Εξάγει νέες αναπαραστάσεις, ενδεχομένως διαφορετικής διάστασης.
 - Για τον υπολογισμό της νέας αναπαράστασης του διανύσματος ενός κόμβου, λαμβάνονται υπόψη και οι γείτονές του στον γράφο.
 - Άρα οι ιδιαιτερότητες της συνδεσιμότητας του συγκεκριμένου γράφου παίζουν σημαντικό ρόλο στον υπολογισμό των αναπαραστάσεων εξόδου.
- Οι νέες αναπαραστάσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για ποικίλα προβλήματα. Π.χ.,:
 - Ταξινόμηση κόμβων.
 - Πρόβλεψη ακμών.
 - Ταξινόμηση ολικού γράφου.
- Το συγκεκριμένο ζητούμενο πρόβλημα επιλύεται από μία νευρωνική «κεφαλή» (π.χ., ένα MLP για ταξινόμηση) το οποίο ακολουθεί το GNN και λαμβάνει ως είσοδο τις νέες αναπαραστάσεις.
 - Το GNN και η κεφαλή εκπαιδεύονται και λειτουργούν ως ενιαίο, βαθύ δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης.

Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

- Ο συνηθέστερος τύπος GNN είναι τα **Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων** (Graph Convolution Network, GCN).
- Ένα GCN λαμβάνει ως είσοδο έναν γράφο κωδικοποιημένο σε δύο πίνακες:
 - Έναν πίνακα χαρακτηριστικών εισόδου $\mathbf{H}_0 \in \mathbb{R}^{N \times F_0}$, όπου N το πλήθος των κόμβων και F_0 η διάσταση του διανύσματος χαρακτηριστικών εισόδου κάθε κόμβου.
 - Έναν πίνακα γειτνίασης $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$.
- Κατά το ευθύ πέρασμα, το i -οστό κρυμμένο επίπεδο του GCN εκτελεί τον εξής υπολογισμό:
 - $\mathbf{H}_{(i+1)} = \sigma(\mathbf{A}\mathbf{H}_i\mathbf{W}_i)$, όπου σ είναι μία μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης, \mathbf{H}_i είναι η έξοδος του προηγούμενου επιπέδου και $\mathbf{W}_i \in \mathbb{R}^{F_i \times F^{(i+1)}}$ είναι ο πίνακας παραμέτρων του i -οστού επιπέδου.

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

- Άρα το i -οστό κρυμμένο επίπεδο λαμβάνει ως είσοδο έναν πίνακα \mathbf{H}_i , ο οποίος περιέχει F_i -διάστατες αναπαραστάσεις των διανυσμάτων των κόμβων του γράφου...
- ...και τις μετασχηματίζει σε νέες διανυσματικές αναπαραστάσεις διάστασης F_{i+1} , στον πίνακα εξόδου \mathbf{H}_{i+1} .
 - Αυτές τροφοδοτούνται ως είσοδος στο επόμενο επίπεδο.
- Ο μετασχηματισμός εκτελείται με βάση τις παραμέτρους του επιπέδου, οι οποίες περιέχονται στον πίνακα \mathbf{W}_i .
- Όμως ο πίνακας γειτνίασης τι σκοπό εξυπηρετεί στον υπολογισμό;
 - Το μετασχηματισμένο διάνυσμα χαρακτηριστικών, το οποίο αναπαριστά πλέον τον j -οστό κόμβο στον \mathbf{H}_{i+1} , έχει προκύψει από μία άθροιση των διανυσμάτων χαρακτηριστικών του j -οστού κόμβου και των άμεσων γειτόνων του!
 - Η συνάθροιση αυτή συμβαίνει πριν από τον μετασχηματισμό μέσω του \mathbf{W}_i .

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

- Με βεβαρυμμένο πίνακα γειτνίασης \mathbf{P} αντί για απλό \mathbf{A} , η συνάθροιση αυτή είναι επίσης βεβαρυμμένη.
- Η αναπαράσταση (διάνυσμα χαρακτηριστικών) του j -οστού κόμβου στον πίνακα \mathbf{H}_1 εμπεριέχει ενσωματωμένη πληροφορία από τους άμεσους γείτονές του (ενός άλματος).
- Η επανάληψη της διαδικασίας αυτής στο επόμενο επίπεδο, συνεπάγεται πως η αναπαράσταση του j -οστού κόμβου στον πίνακα \mathbf{H}_2 εμμέσως εμπεριέχει ενσωματωμένη πληροφορία από τους γείτονές του έως δύο άλματα μακριά.
- Στον πίνακα \mathbf{H}_3 , έως τρία άλματα μακριά, κοκ.
- Άρα, βαθύτερο δίκτυο (περισσότερα κρυμμένα επίπεδα) συνεπάγεται μεγαλύτερη **διάχυση πληροφορίας** στον γράφο κατά το ευθύ πέρασμα.

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

- Πρέπει στον αρχικό πίνακα γειτνίασης να προστεθεί και ο ταυτοτικός πίνακας I , πριν από το ευθύ πέρασμα, προκειμένου ο υπολογισμός της νέας αναπαράστασης του j -οστού κόμβου να λαμβάνει υπόψη και την αρχική αναπαράσταση του ίδιου του j -οστού κόμβου.
- Σε ορισμένες περιπτώσεις είναι γνωστή και κάποια καθολική πληροφορία για ολόκληρο τον γράφο, η οποία θέλουμε να ληφθεί υπόψη κατά τον υπολογισμό των αναπαραστάσεων του κάθε κόμβου.
 - Προσθέτουμε στον γράφο έναν νέο βοηθητικό **κόμβο συμφραζομένων**, στον οποίον αναθέτουμε την καθολική πληροφορία ως διάνυσμα χαρακτηριστικών.
 - Τροποποιούμε τον πίνακα γειτνίασης ώστε κάθε κόμβος να συνδέεται άμεσα, μέσω ξεχωριστής ακμής, με τον κόμβο συμφραζομένων (context node).

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

- Όλες οι πράξεις του ευθέως περάσματος είναι παραγωγίσιμες.
- Το ολικό ενιαίο δίκτυο (GCN + κεφαλή) εκπαιδεύεται με οπισθοδιάδοση σφάλματος + στοχαστική κάθοδο κλίσης, σε κάποιο σύνολο εκπαίδευσης με δεδομένα γράφων.
- Μετά τη λήξη της εκπαίδευσης, οι παράμετροι παγώνουν και το δίκτυο μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε νέους γράφους ελέγχου.
- Στα GCN, το βάθος του δικτύου συνήθως δεν είναι μεγάλο.
 - Η πολύ υψηλή διάχυση πληροφορίας επί του γράφου ενδέχεται να οδηγήσει σε πανομοιότυπες αναπαραστάσεις των διαφορετικών κόμβων.
 - Το τελευταίο κρυμμένο επίπεδο δίνει ως έξοδο περίπου το ίδιο διάνυσμα χαρακτηριστικών για σχεδόν όλους τους κόμβους του γράφου.

Συνελικτικά Δίκτυα Γράφων

Thank you for your attention!

Q & A

Contact: imademlis@aueb.gr