

Definición, tipologías y casos de uso de Graph Neural Networks para el aprendizaje basado en relaciones

Presentación trabajo de fin de grado
Alfonso Moure Ortega

Presentación rápida del proyecto

El proyecto se centra en el **repasso de las redes neuronales gráficas o *graph neural networks*** (GNN) desde un punto de vista divulgativo.

Se define la **motivación de su uso para el trabajo sobre estructuras de datos en forma de grafo** y se describen diferentes casos de uso, así como tipologías de problemas y de aproximaciones matemáticas.

Además, se lleva a cabo la **implementación de los problemas principales** mediante redes neuronales gráficas convolucionales, se recogen métricas de precisión y se comparan para extraer conclusiones.

Motivación para el uso de GNNs

Casos de uso y tipos de problemas destacados

Clasificación de modelos por aproximaciones

Implementación de ejemplos

Análisis de resultados y conclusiones

Metodología seguida: estructura

El contenido del proyecto se divide en cuatro bloques diferenciados:

Introducción y teoría

- Introducción a las redes neuronales tradicionales y gráficas.
- Justificación de la necesidad del uso de redes gráficas.
- Tipos de casos y problemas resolubles.

Implementación

- Uso de redes neuronales gráficas.
- Aproximación espacial y mediante paso de mensajes.
- Contraste frente a una red que no tiene en cuenta la estructura.

Resultados

- Comparativa de resultados de precisión y error sobre los modelos implementados.
- Consideraciones sobre los datos obtenidos.

Conclusiones

- Conclusiones finales sobre los resultados.
- Conclusiones sobre el proyecto.

Metodología seguida: referencias

Publicaciones generalistas y
surveys

Publicaciones para casos de uso
particulares

Artículos sobre algoritmos y bases
matemáticas

Comparativas de resultados

Dado que nos encontramos ante una temática relativamente nueva, se ha optado por hacer uso de **publicaciones a distintos niveles**:

- **Generalistas**, con el fin de obtener un punto de vista global.
- Centradas en **casos de uso** particulares.
- Enfocadas sobre **problemas computacionales** y aspectos matemáticos.
- **Estudios comparativos**.

Todas las fuentes han sido referenciadas desde la memoria de proyecto dentro del contexto de los contenidos creados.

Metodología: entregables

Se entrega la memoria de proyecto junto con un *notebook* principal y un repositorio completo con el código realizado para los distintos experimentos.



Introducción: conceptos sobre redes neuronales

Se lleva a cabo una introducción para dotar a la persona que lee el trabajo del contexto necesario que motiva el uso de estas estructuras y prepararla para el contexto de redes gráficas.

Historia y evolución

Inspiración biológica

Base matemática rudimentaria

Conceptos y terminología básica

Casos de uso generales

Introducción: redes neuronales gráficas (GNNs)

Datos dotados de estructuras
relacionales

Conjuntos con orden, jerarquías o
reglas de pertenencia

Tipologías de relaciones

Contexto para la toma de
decisiones

Se expande la explicación sobre redes neuronales para justificar la necesidad de las redes gráficas, donde el dominio puede tener una estructura y presentar entidades no independientes.

Introducción: clasificación por tipo de problema

Se lleva a cabo una clasificación de los distintos tipos de problemas que pueden abordarse mediante el uso de GNNs: clasificación, predicción y generación.

Clasificación

Nodos: clasificar según su contexto

Enlaces: asignar una o varias clases según sus vértices

Grafos: clasificación de estructuras completas

Predicción

Nodos: probabilidad de existir tras un enlace

Enlaces: probabilidad de existir un enlace entre dos nodos

Generación

Generación de grafos completos

Introducción: clasificación por arquitectura de red

RecGNN: redes recursivas

STGNN: redes espacio-temporales

GAE: autoencoders de grafos

ConvGNN: redes convolucionales



También se clasifican los distintos tipos de redes neuronales según la arquitectura utilizada.

Se hace, además, un especial hincapié sobre las redes gráficas convolucionales por su importancia en las últimas publicaciones dentro de este área de estudio.

- GCN: Graph Convolutional Network.
- MPNN: Message-passing Neural Networks.
- GAT: Graph Attention Convolutional Networks.
- RGCN: Relational Graph Neural Networks.

Introducción: profundización en redes gráficas convolucionales

Dentro de las redes neuronales gráficas convolucionales o *convolutional graph neural networks* (ConvGNN), se han estudiado dos aproximaciones en cuanto a implementación.

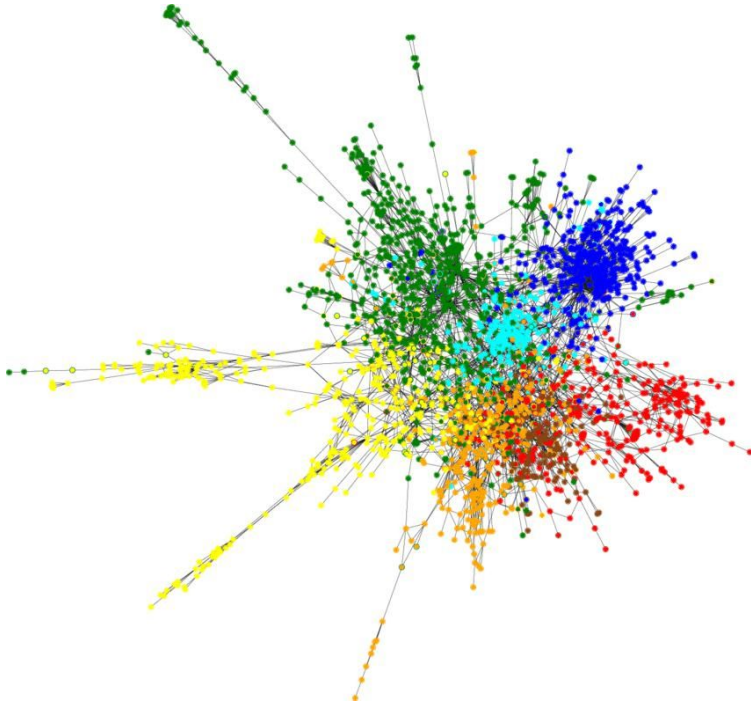
ConvGNN espectrales

- Se fundamental en la teoría espectral de grafos para describir la estructura.
- No tienen en cuenta la tipología de las relaciones.
- Uso limitado de los atributos de los nodos.

ConvGNN espaciales

- Tienen en cuenta la distribución espacial de los nodos del grafo, lo que permite diferenciar isomorfismos.
- Uso de atributos en vértices y aristas, lo que permite tipologías y distintos niveles de importancia.
- Estudiamos a fondo el caso de las MPNN (*message-passing*).

Implementación: conjunto de datos



Se hace uso de un conjunto de datos compuesto por publicaciones de aprendizaje computacional y las citas que existen entre ellos.

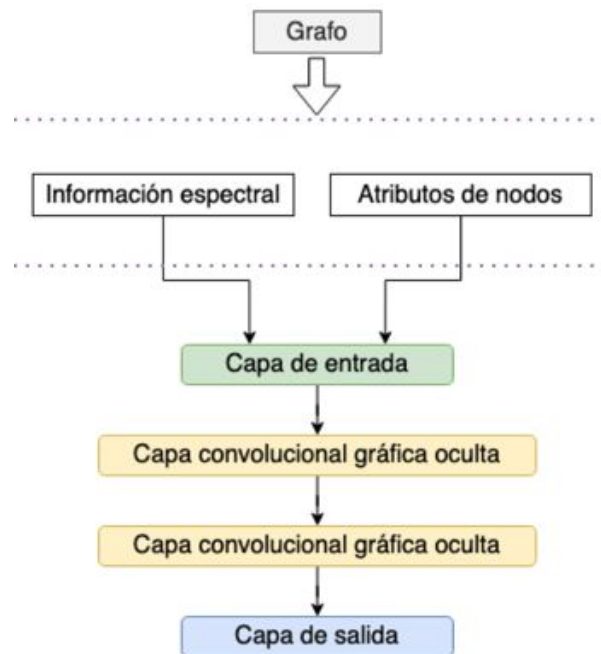
- 2.708 vértices, cada uno representa un documento.
- 5.429 aristas, una por cada cita entre dos documentos.
- 1.433 atributos por vértice.
- 7 clasificaciones temáticas diferentes para cada nodo.

Fuente de la imagen: <https://arxiv.org/abs/1611.08402>

Implementación: clasificación de nodos mediante teoría espectral de grafos

Experimento 1

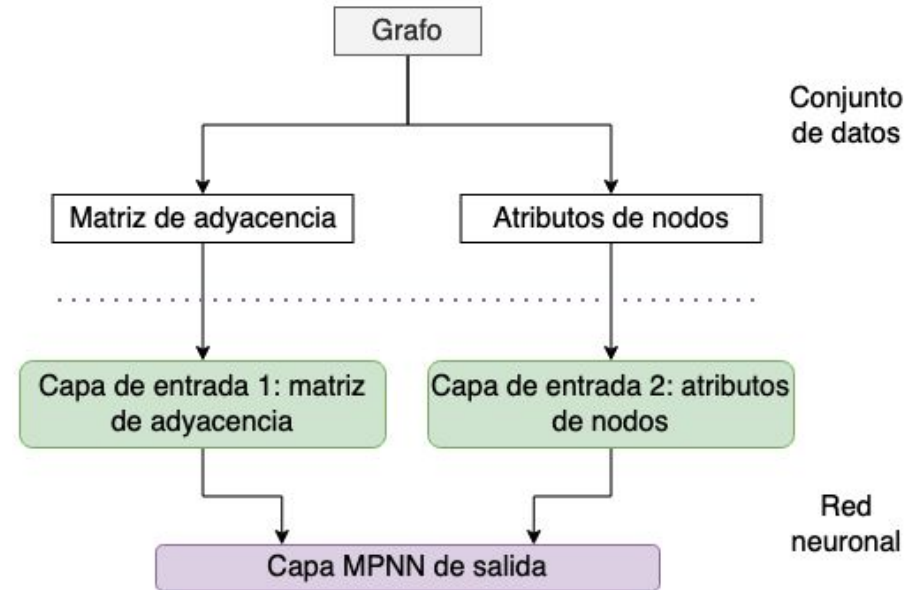
- Clasificación de nodos
- Modelo basado en una red convolucional.
- Se hace uso de teoría espectral de grafos.



Implementación: clasificación de nodos mediante paso de mensajes

Experimento 2

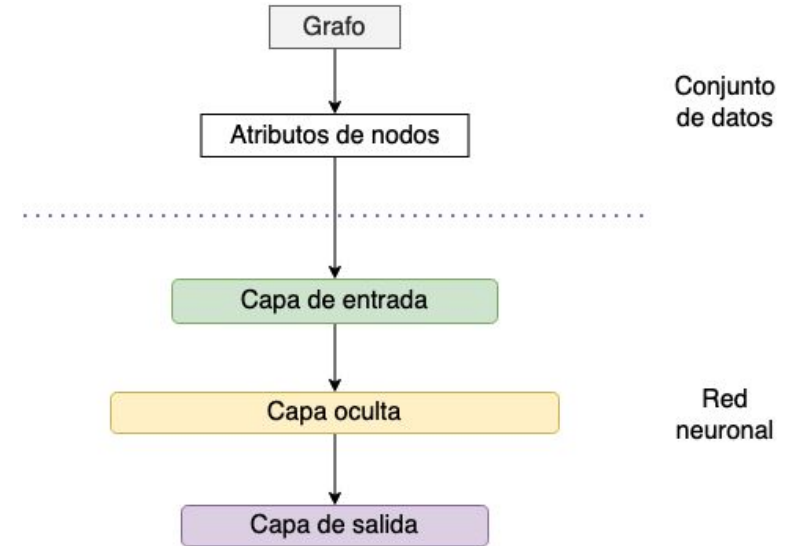
- Clasificación de nodos.
- Modelo basado en una red convolucional.
- Aproximación espacial al grafo.
- Basado en el paso de mensajes.
- Personalización de función de actualización para MPNN.



Implementación: clasificación de nodos mediante una red no gráfica

Experimento 3

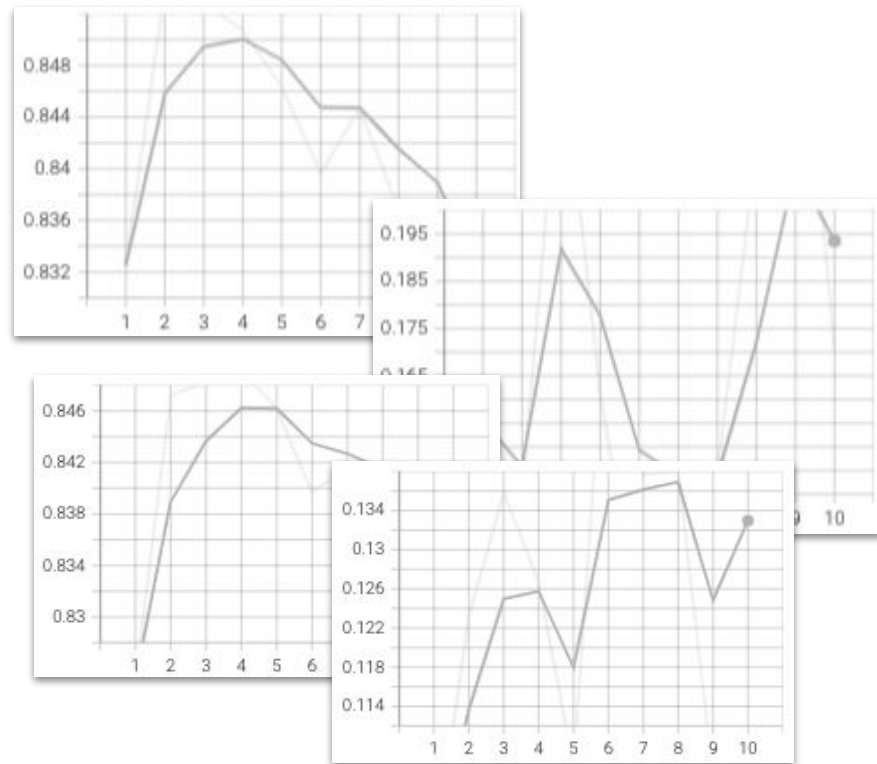
- Clasificación de nodos.
- Modelo basado en una red neuronal densa.
- No se hace uso de información relacional, solo los atributos de los nodos.
- Se lleva a cabo una reducción de dimensionalidad previa.



Implementación: predicción de enlaces mediante paso de mensajes

Experimento 4

- Predicción de enlaces.
- Modelo basado en una red convolucional.
- Basado en de paso de mensajes.
- Personalización de función de actualización de MPNN mediante algoritmo de *walk pooling*.



Resultados obtenidos

Experimento	Épocas	Entrenamiento		Validación		Pruebas	
		Precisión	Error	Precisión	Error	Precisión	Error
Clasificación de nodos mediante modelo espectral	255/40 mejor: 164	97,86%	0,5319	78,60%	1,05	80,9%	1
Clasificación de nodos mediante modelo espacial	68/400 mejor: 13	99%	0,48	75%	1,16	74,9%	0,83
Clasificación de nodos mediante modelo no gráfico (sobre reducción a 995 atributos)	24/30 mejor: 6	83,84%	50,79	64,11%	79,01	66,05%	58,59
Predicción de enlaces mediante paso de mensajes	10/10 mejor: 4	-	-	85,19%	0,23	84,74%	0,14

Análisis de evolución de aprendizaje para cada modelo

Registro de precisión y error sobre cada subconjunto de datos

Seguimiento en *notebook* mediante TensorBoard

Se aplica *early stopping* y se evalúan los modelos entrenados

Se aportan conclusiones sobre los resultados obtenidos

Conclusiones sobre el proyecto

Las redes gráficas, ante datos estructurados, tienden a una mayor precisión y capacidad para generalizar

El campo de las GNN abre la puerta a aplicaciones sobre escenarios donde los datos no son independientes

La información contextualizada dentro de su dominio permite la clasificación de elementos de manera eficaz...

...incluso sin hacer uso del contenido de las entidades