



ОНЛАЙН-ОБРАЗОВАНИЕ

# Сети для работы с графами

Сразу после того, как сообщение отправлено, в голову приходят умные мысли.

Артур Кадулин  
Преподаватель

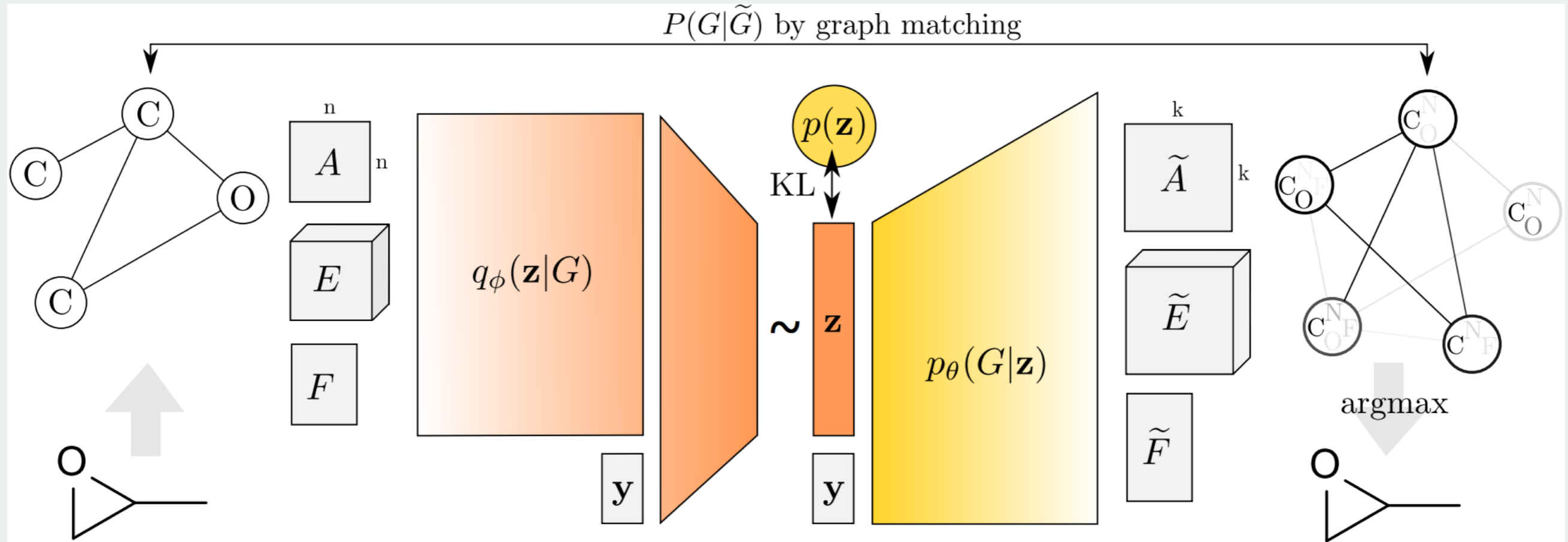


# План на сегодня

1. **Message passing**
2. Рекуррентные сети для графов
3. Нейронный компьютер



# Graph VAE

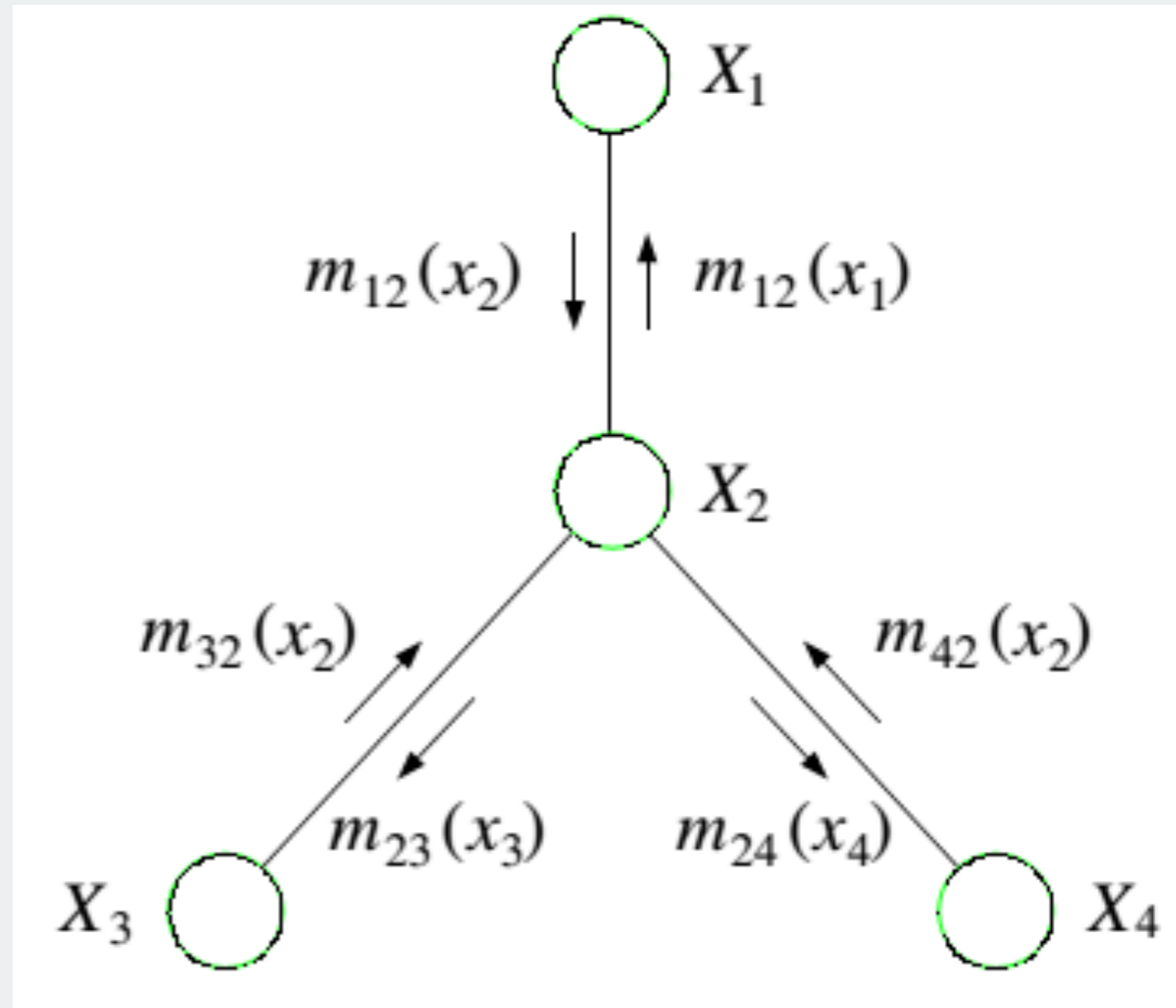


Граф можно представить в виде матрицы смежности, матрицы признаковов вершин и тензора с признаками ребер.



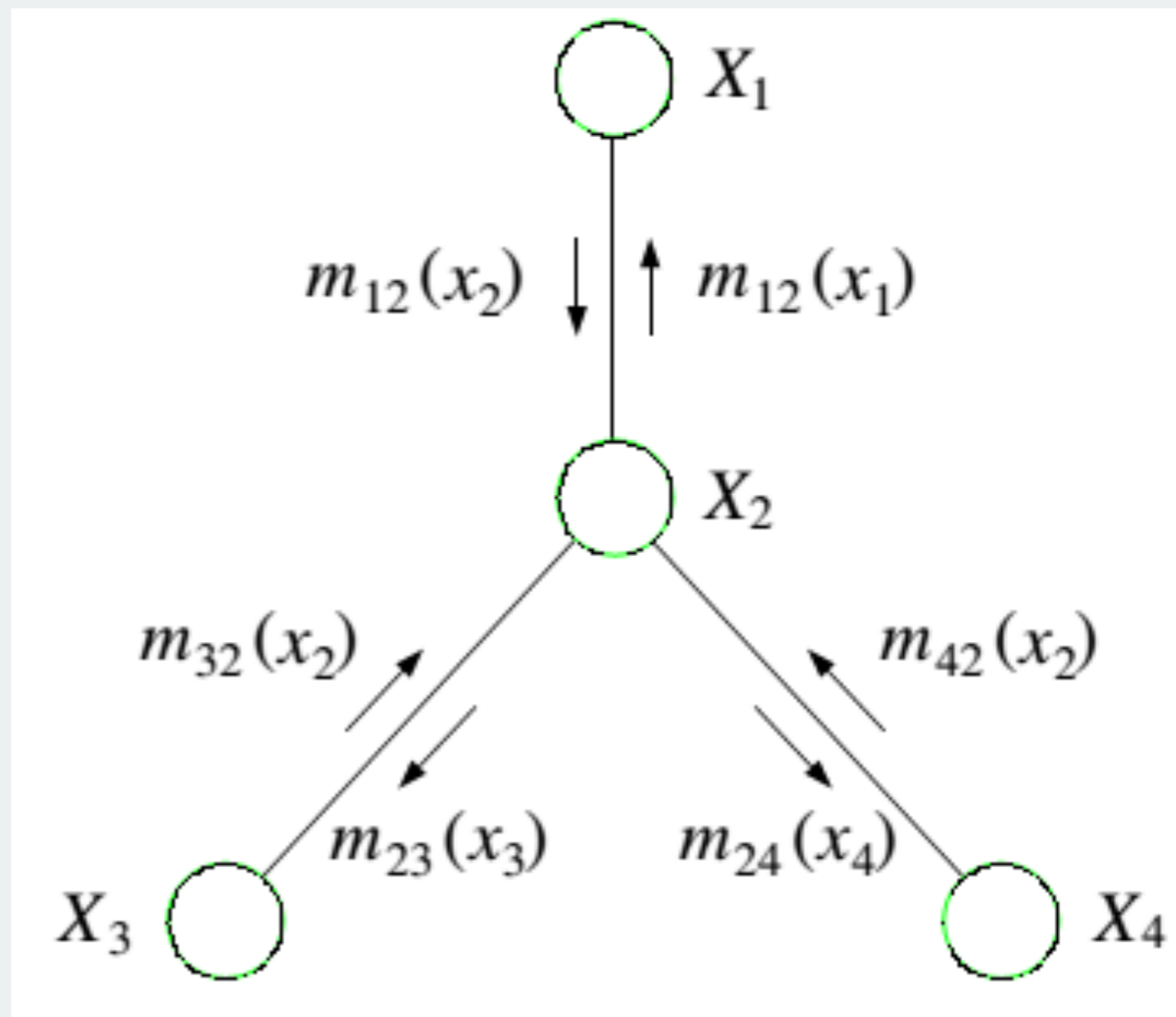
# Передача сообщений

Каждый шаг все вершины отправляют сообщения своим соседям, после чего обновляют свое состояние в соответствии с полученными новыми сообщениями.

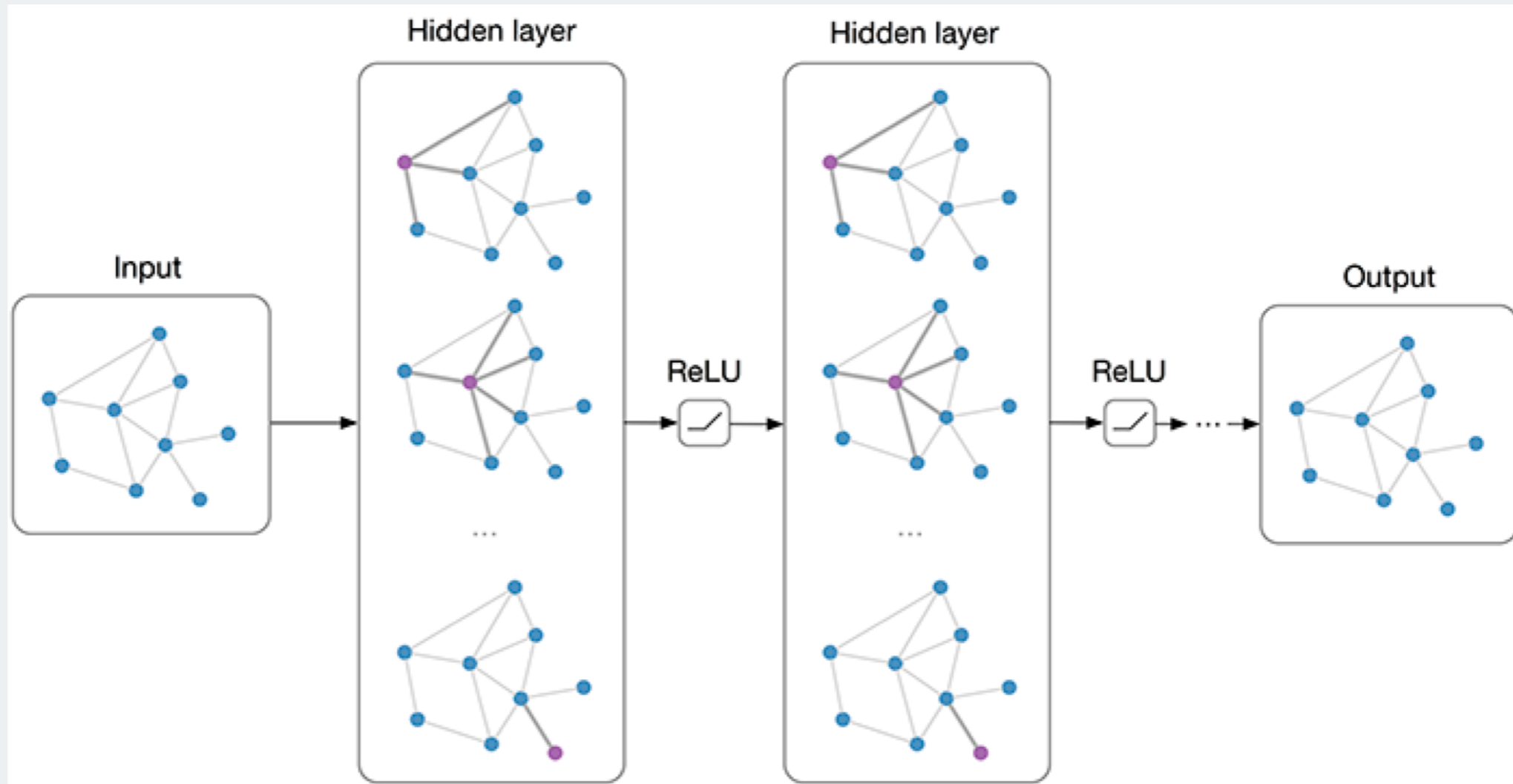


# Передача сообщений

По сути, сообщение — это состояние вершины и свойства ребра по которому сообщение передается. А состояния обновляются с помощью нейронной сети принимающей на вход сообщения и текущее состояние вершины.



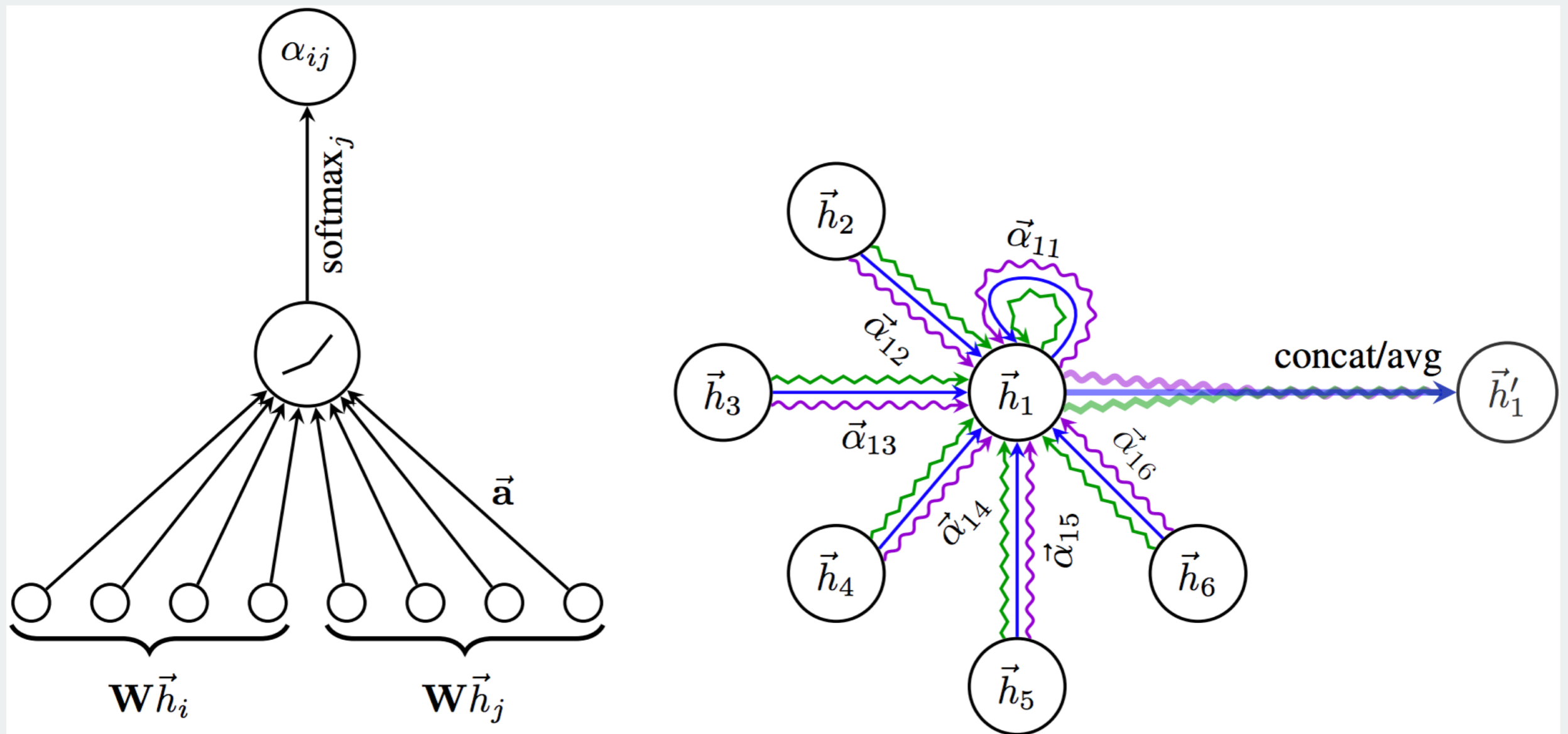
# Свертка на графах



$$H^{(l+1)} = f(H^{(l)}, A) = \sigma(AH^{(l)}W)$$



# Graph Attention Networks (GATs)



# План на сегодня

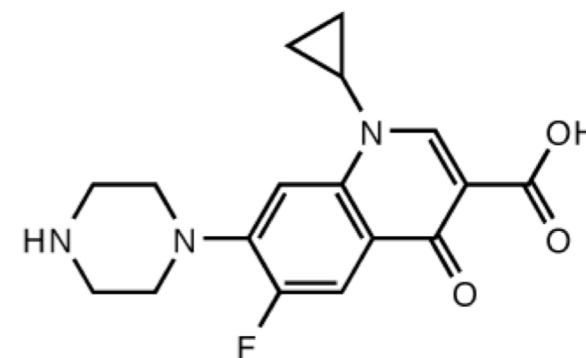
1. Message passing
- 2. Рекуррентные сети для графов**
3. Нейронный компьютер



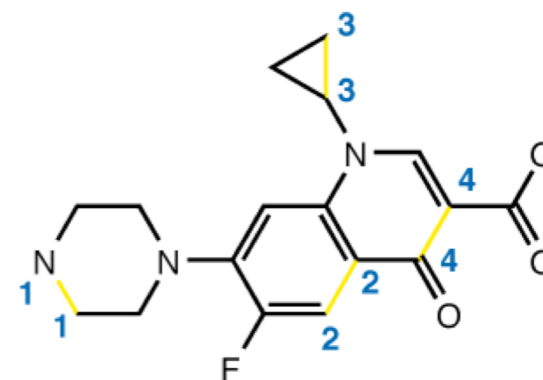
# SMILES

Любой граф можно рекурсивно обойти и записать в строку. Самой большой проблемой являются циклы, из-за них приходится делать разрезы и помечать ребра идентификаторами.

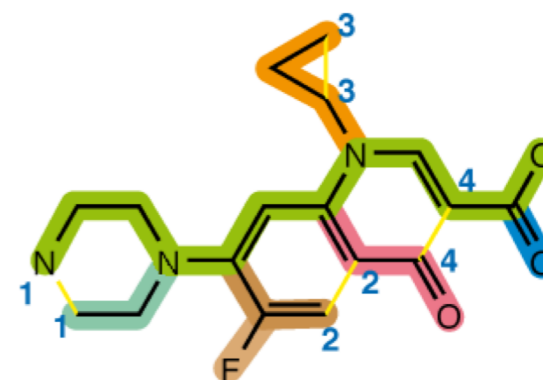
A



B



C

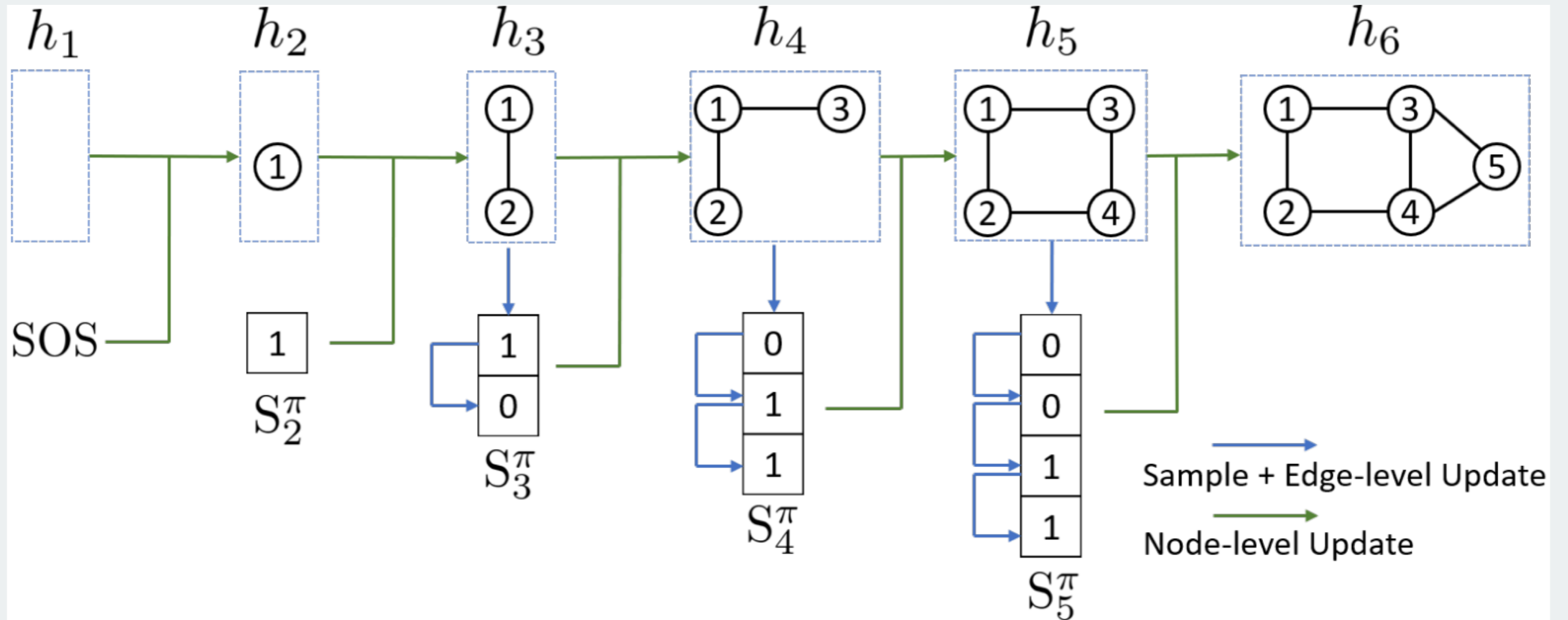


D

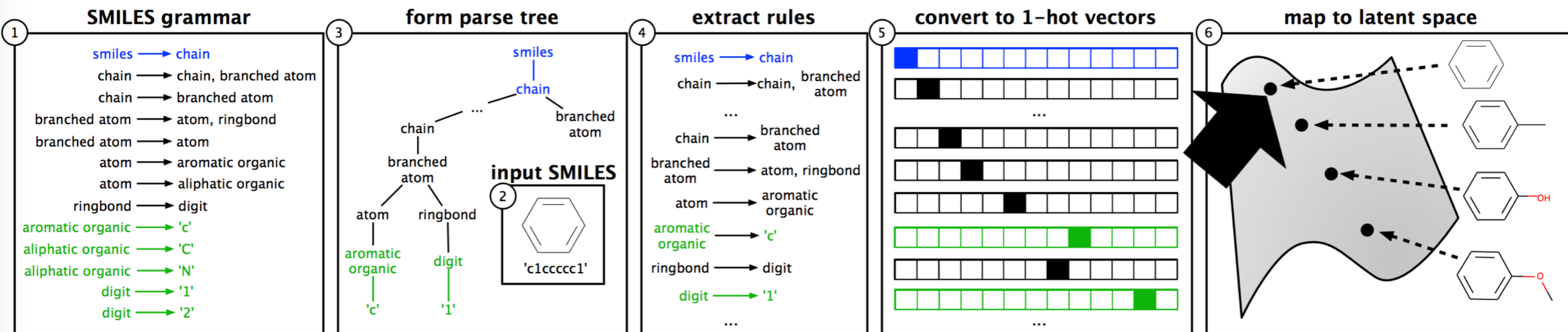
N1CCN(CC1)C(C(F)=C2)=CC(=C2C4=O)N(C3CC3)C=C4C(=O)O



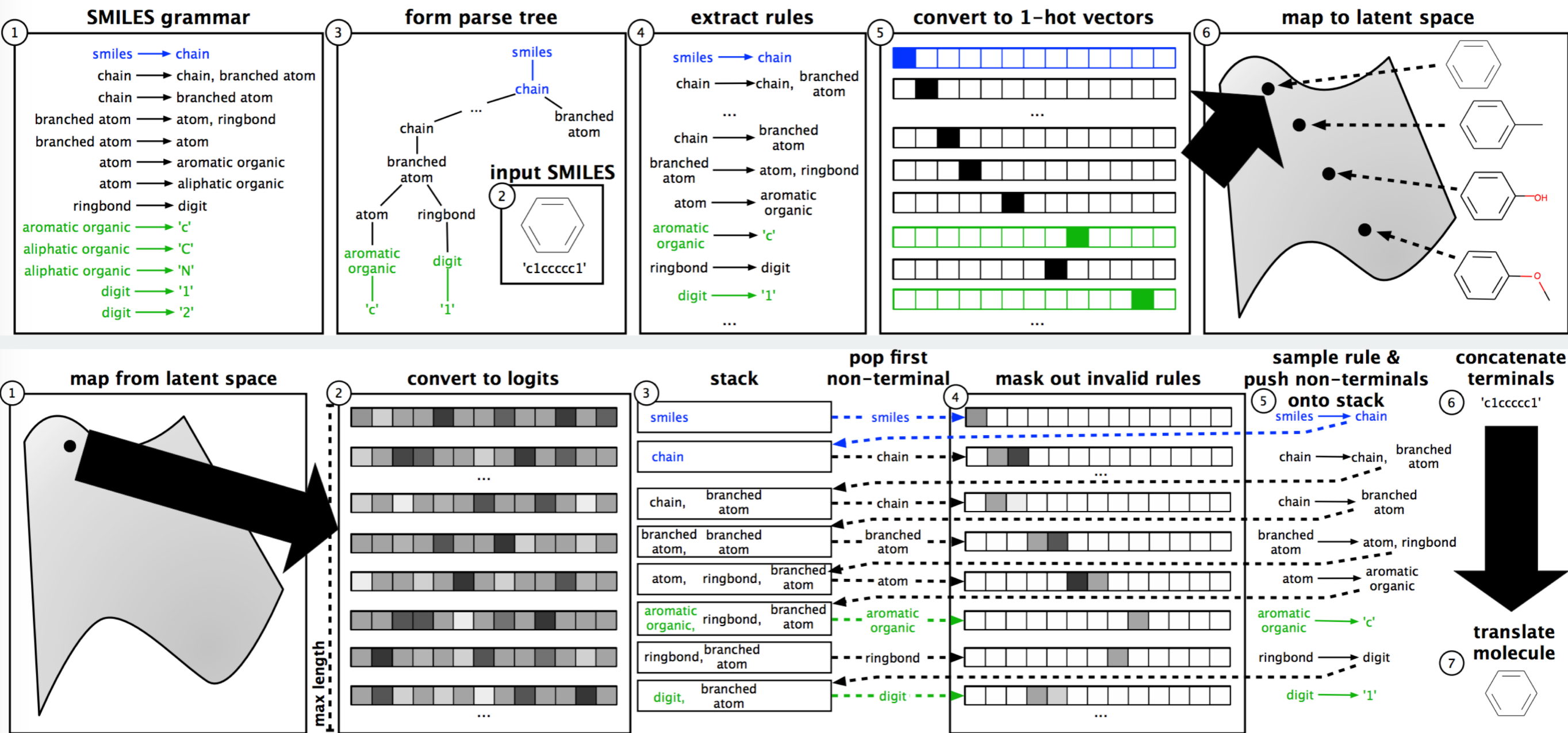
# GraphRNN



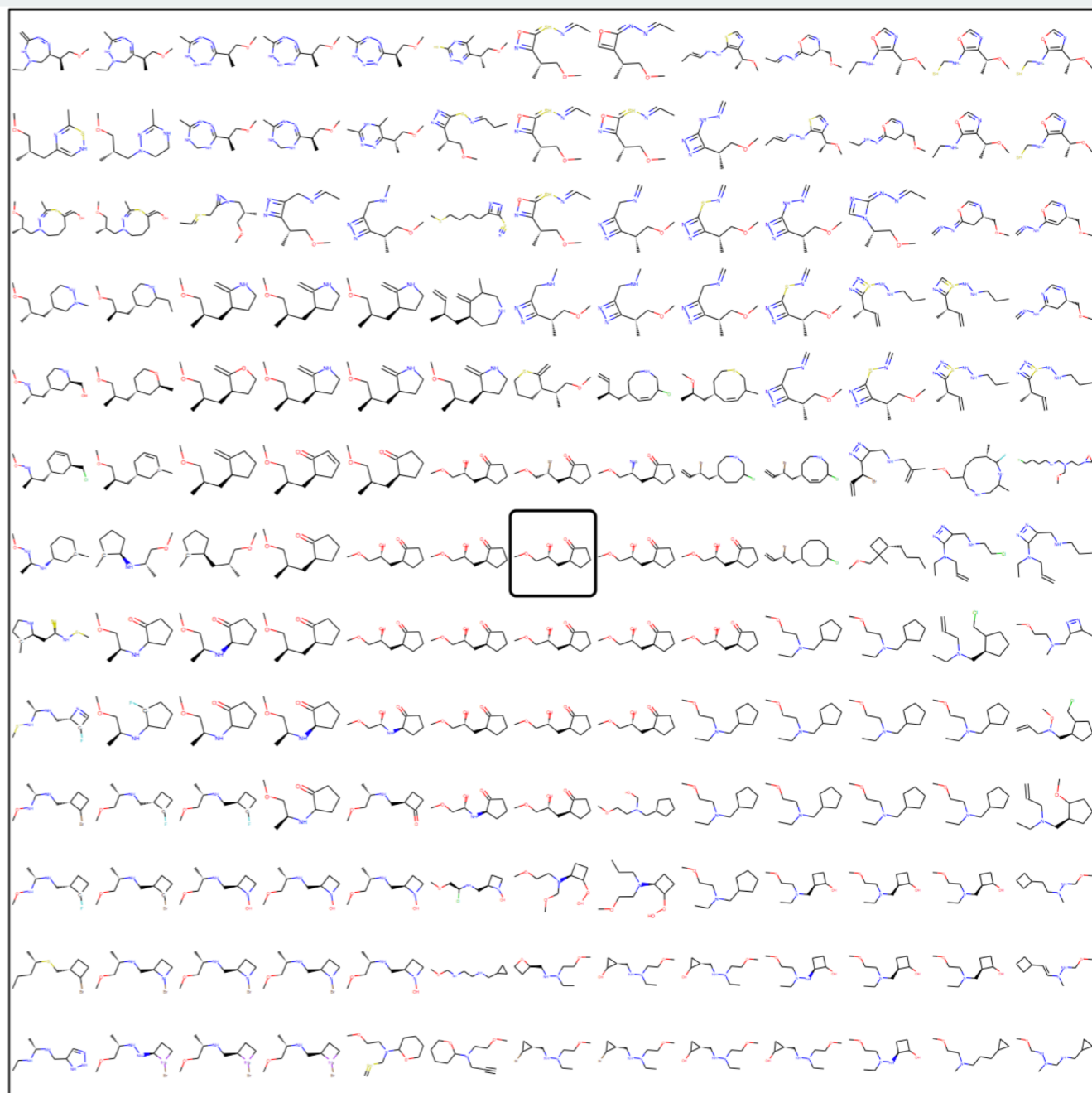
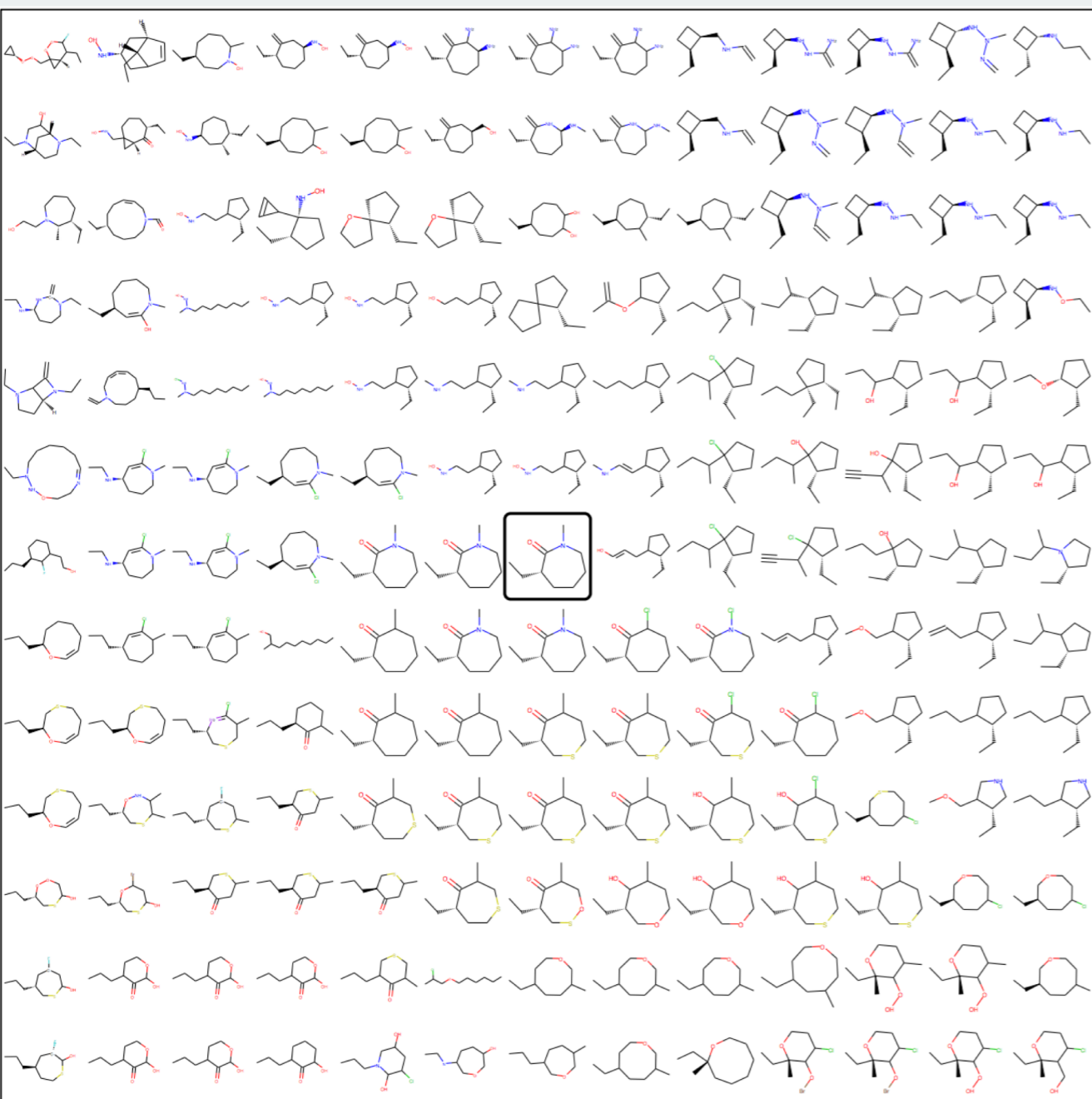
# Grammar VAE



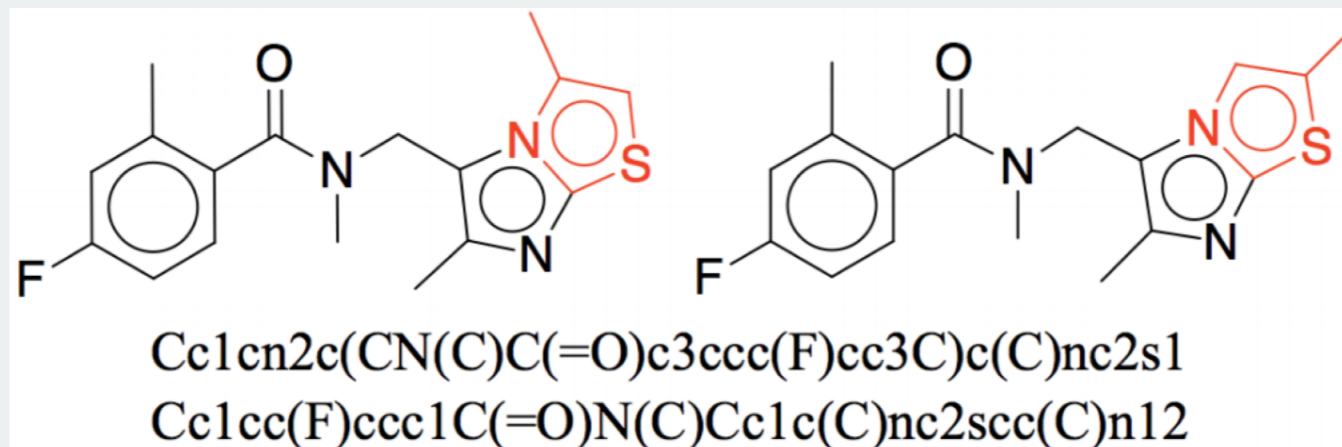
# Grammar VAE



# Grammar VAE



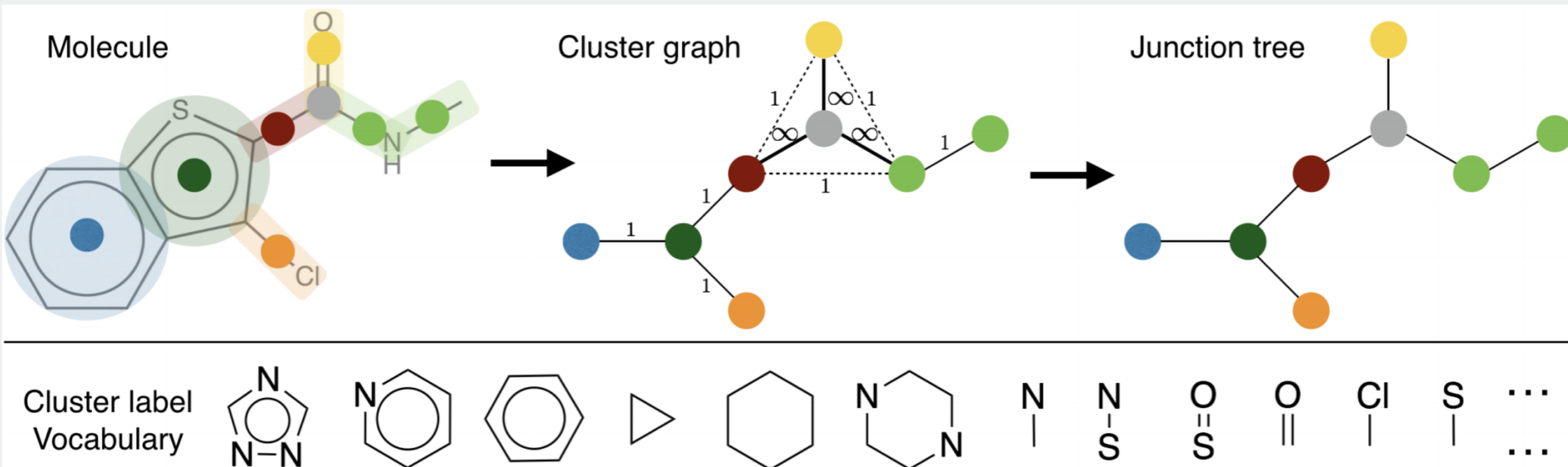
# SMILES: проблемы



Даже очень похожие друг на друга молекулы могут иметь совершенно разные канонические записи. При генерации это вызывает проблемы и приводит к нестабильности. В основном эти проблемы возникают из-за наличия циклов и сложной структуры «языка» SMILES. Давайте избавимся от циклов!



# Junction Tree VAE

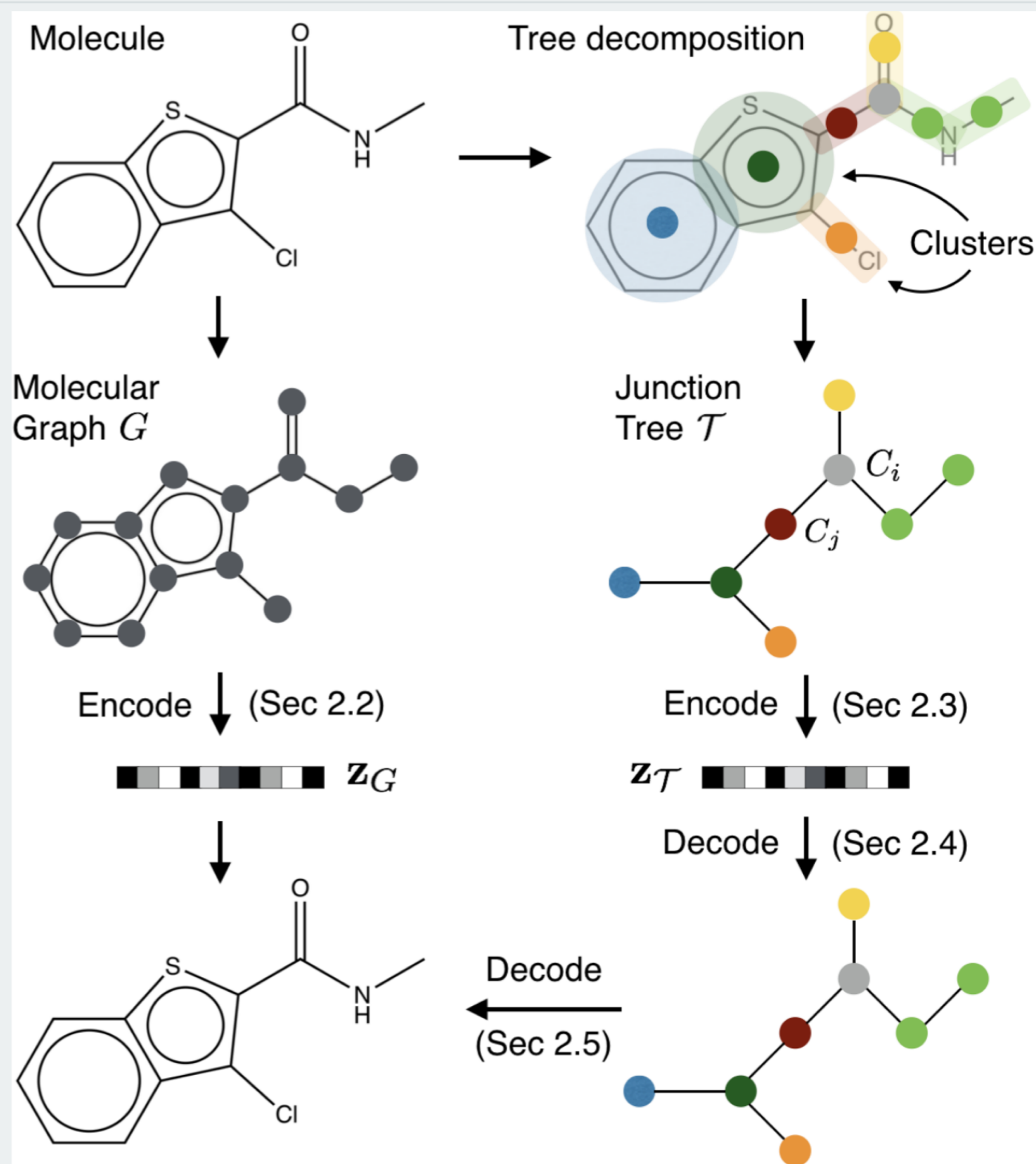


Теперь, когда мы добавили в словарь не только атомы, но и подструктуры или, в общем случае, подграфы, мы всегда можем представить молекулу в виде дерева.

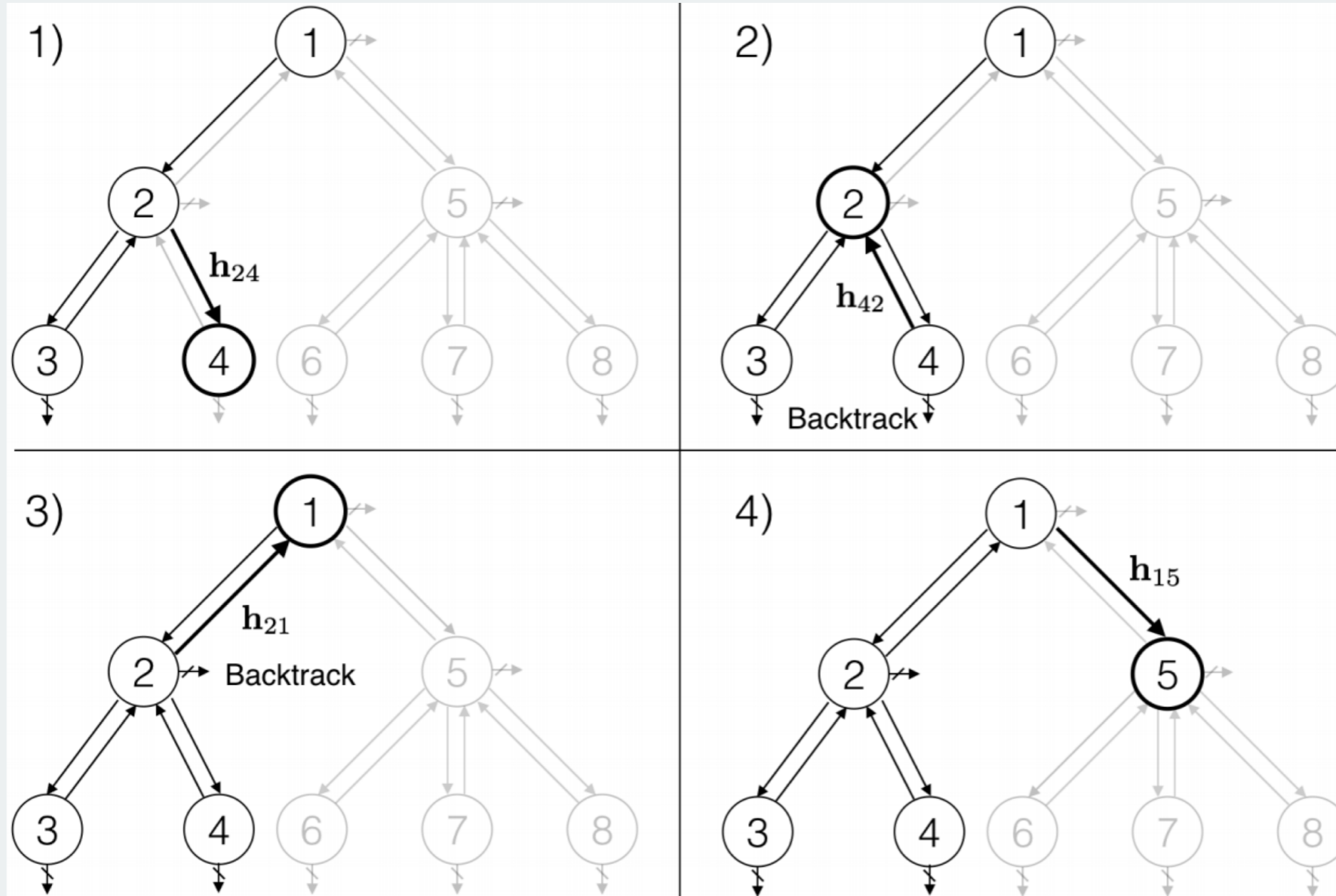


# Junction Tree VAE

Сверточный энкодер с помощью алгоритма message passing получает латентное представление графа  $z_G$ , в то же время граф преобразуется в ациклическое дерево за счет выделения подграфов и еще один энкодер выделяет признаки дерева  $z_T$



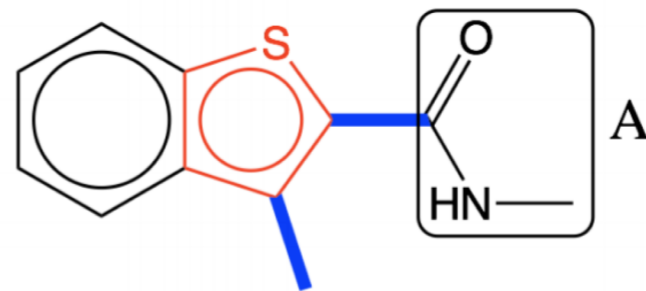
# Junction Tree VAE



# Junction Tree VAE

При декодировании дерева в граф, для каждой из вершин предсказывается тип подграфа и, в том же порядке, в котором породилось дерево, эти подграфы сэмпляются.

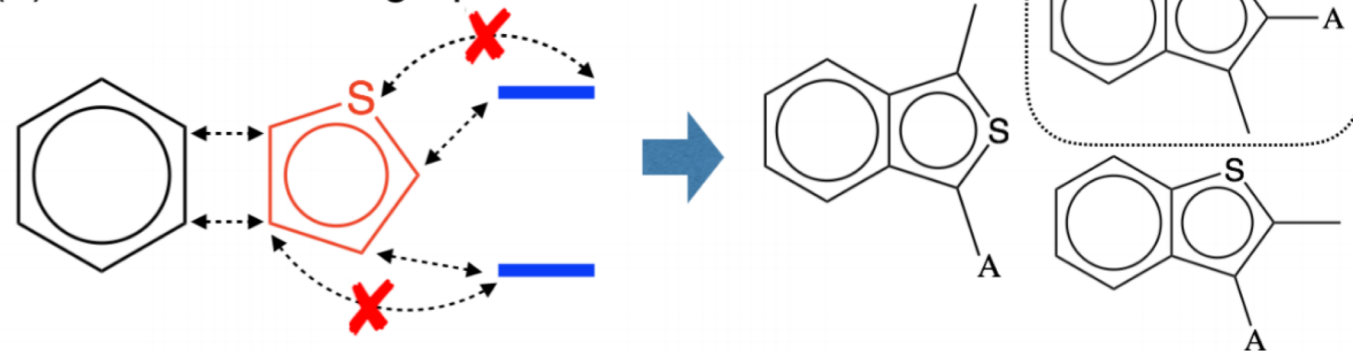
(1) Ground truth molecule



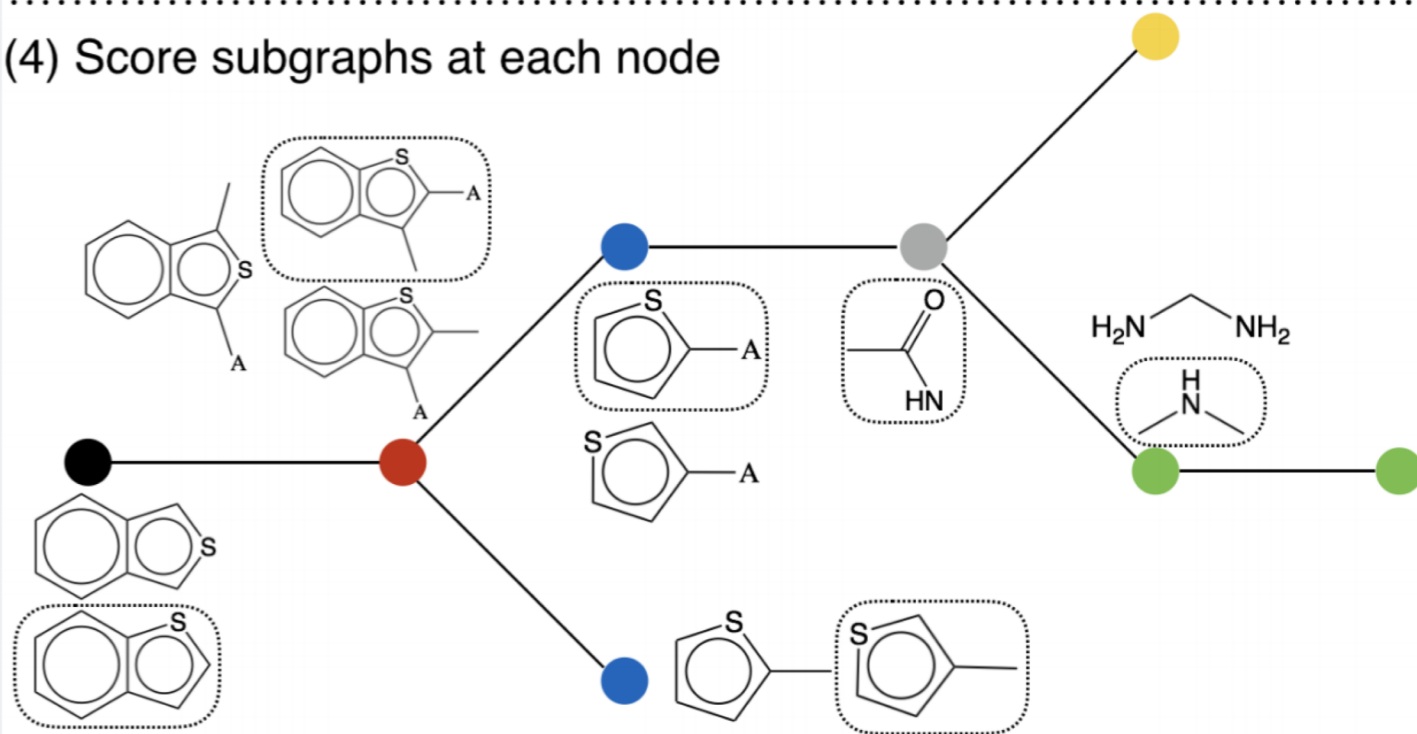
(2) Predicted Tree  $\hat{T}$



(3) Enumerate subgraphs



(4) Score subgraphs at each node

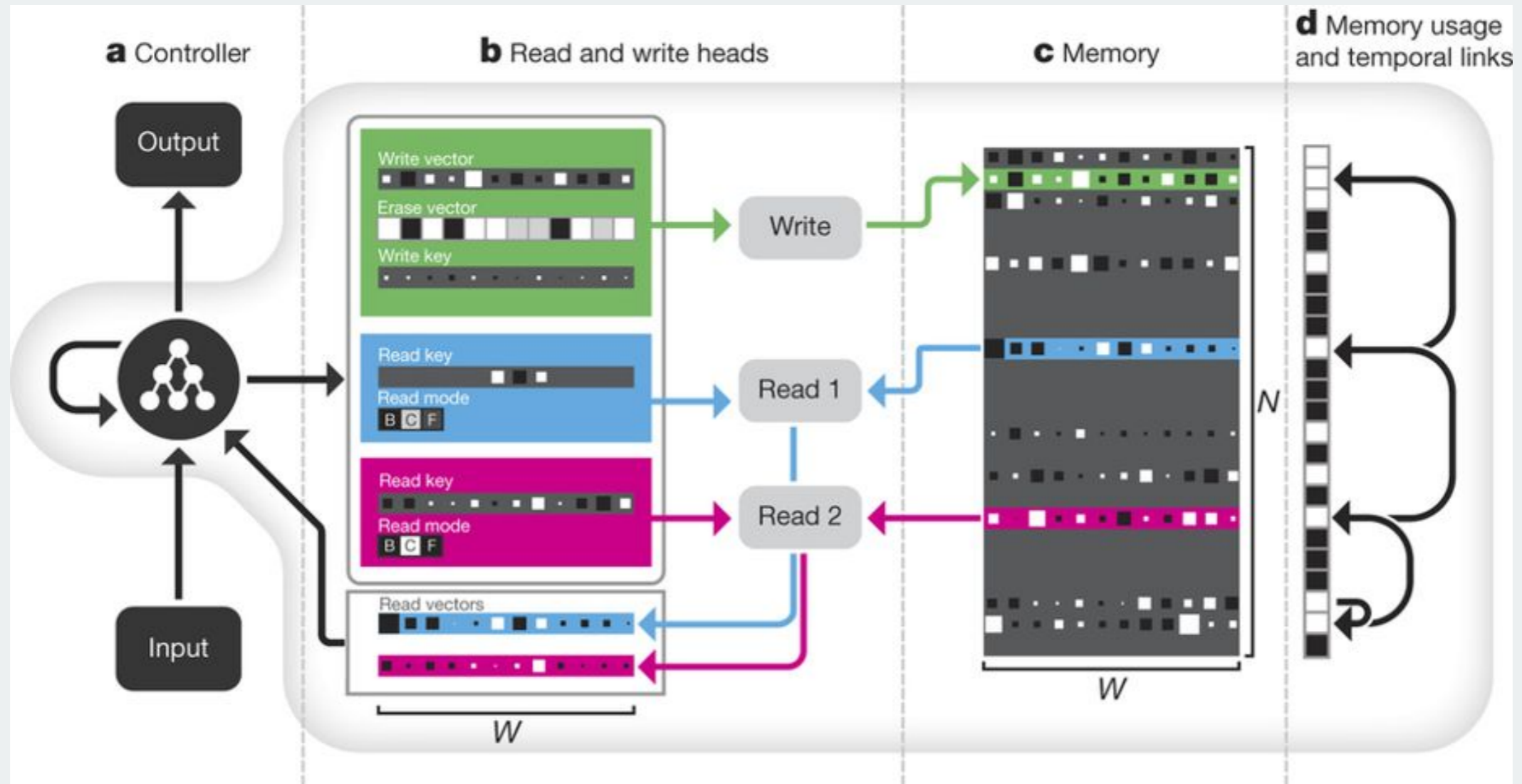


# План на сегодня

1. Message passing
2. Рекуррентные сети для графов
- 3. Нейронный компьютер**



# Differentiable Neural Computer



<https://www.youtube.com/watch?v=B9U8sI7TcMY>





Спасибо  
за внимание!