

Gráfkonvolúciós neuráliahálózatok

Önálló projekt, 1. félév

Sándor Zsuzsanna

2021.

Tartalom

- ▶ Elméleti háttér
- ▶ A Tox21 adathalmaz
- ▶ Tervek

Elméleti háttér

- ▶ Deep learning

- ▶ $\{x_i, y_i : i = 1, \dots, k\} \longrightarrow \forall i : f_\theta(y_i) \approx x_i$

Definíció (Gráfkonvolúció [2])

A $G = (V, E, W)$ gráf csúcsain értelmezett $x, g : V \rightarrow \mathbb{R}$ függvények konvolúcióján a következő kifejezést értjük

$$(x * g) = \sum_{j=1}^n \hat{x}(\lambda_j) \hat{g}(\lambda_j) \phi_j(i).$$

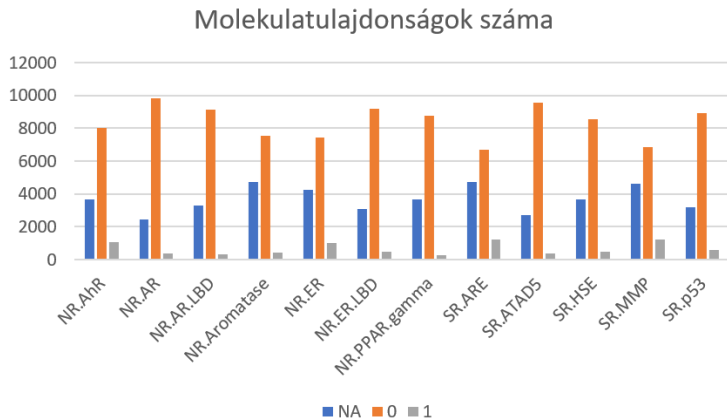
Definíció (Gráfkonvolúciós réteg [2])

Input: $x_1, \dots, x_q \in \mathbb{R}^{|V|}$, *output:* $\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{q'} \in \mathbb{R}^{|V|}$, $\xi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a csúcsonként alkalmazott aktivációs függvény. Ekkor konvolúciós rétegek nevezzük az alábbi hozzárendelést:

$$\hat{x}_j = \xi \left(\sum_{i=1}^q g_j(L_n) x_i \right) \quad j \in \{1, \dots, q'\}.$$

A Tox21 adathalmaz

- ▶ 12707 vegyület
- ▶ 12 tulajdonság



Tervek

- ▶ Pytorch Geometric
- ▶ torch_geometric TUDataset [1]

Hivatkozások



Christopher Morris, Nils M Kriege, Franka Bause, Kristian Kersting, Petra Mutzel, and Marion Neumann.

TUDataset: A collection of benchmark datasets for learning with graphs.

arXiv preprint arXiv:2007.08663, 2020.



David I Shuman, Sunil K Narang, Pascal Frossard, Antonio Ortega, and Pierre Vandergheynst.

The emerging field of signal processing on graphs: Extending high-dimensional data analysis to networks and other irregular domains.

IEEE signal processing magazine, 30(3):83–98, 2013.