

## Stage M2 : Grammatical Graph Neural Network



**Description du stage** Les réseaux de neurones sur graphe (GNN) sont un champs d'étude en plein essor ces dernières années. Les Message Passing Neural Network (MPNN) tels que Graph Convolutional Network (GCN) [4] et Graph Isomorphism Network (GIN) [7] sont les plus utilisés des GNNs du fait de leur complexité linéaire. Cependant, il a été démontré que l'expressivité de ces modèles était limitée [1]. En effet, en terme de séparabilité, ils sont moins expressifs que le test de Wesfeiler-Lemahn [5] et en terme de comptage de sous-structures, il ne peuvent pas compter les triangles dans un graphe [3, 2].

Durant ce stage, vous explorerez une nouvelle approche, décrite dans [6], basée sur les Context Free Grammar (CFG). Les CFG sont composées de règles que l'on peut sélectionner pour construire des couches de GNN. Un exemple de couche de GNN produite à partir d'une grammaire basée sur la séparabilité est visible sur la Figure 1. Ce stage s'inscrit dans une démarche de recherche de performance d'un GNN. Nous chercherons dans un premier temps à développer un code permettant de produire une couche de GNN à partir de règles dans une CFG que l'on pourra choisir. Ce code permettra à l'utilisateur de tester pour une tâche donnée la pertinence des règles de la CFG. Dans un second temps, le stagiaire pourra mesurer les performances de GNNs produits à partir de différents ensembles de règles sur des datasets usuels de la littérature.

### Objectifs

1. Se familiariser avec les GNNs.
2. Comprendre la notion de CFG et la génération du langage qui en découle.
3. Produire un code qui retourne une couche de GNN définie par un ensemble de règles de CFG.
4. Évaluer les GNNs produits par différents ensembles de règles sur des datasets usuels de la littérature.

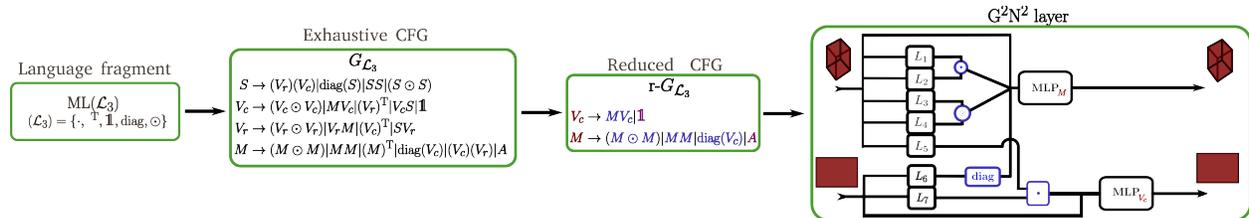


Figure 1: Schéma d'une couche d'architecture basée sur les règles de la grammaire réduite  $r-G(\mathcal{L}_3)$ .

**Encadrement** Le stagiaire effectuera son stage dans le groupe de Machine Learning du Litis sous la supervision de Sébastien Adam, Maxime Bélar et Jason Piquenot (Docteurant).

## Profil

- Étudiant en dernière année de Master ou d'école d'ingénieur, en mathématiques appliquées, science des données ou intelligence artificielle.
- Bonnes connaissances du Machine Learning
- Bonnes compétences en Python et Pytorch

## Compétences développées

- Développement en Pytorch
- Initiation à la recherche
- Benchmarking

**Lieu de stage** LITIS, Université de Rouen Normandie, Saint Étienne du Rouvray (Rouen, France).

**Durée de stage** 5 à 6 mois, à partir de mars 2024

**Rémunération** Gratification de stage usuelle ( $\approx$  640 euros).

**Contact** Les candidats sont invités à envoyer leur CV et leur relevé de notes aux adresses suivantes : jason.piquenot@etu.univ-rouen.fr, maxime.berar@univ-rouen.fr, sebastien.adam@univ-rouen.fr

## References

- [1] M. Balcilar, P. Héroux, B. Gauzere, P. Vasseur, S. Adam, and P. Honeine. Breaking the limits of message passing graph neural networks. In *International Conference on Machine Learning*, pages 599–608. PMLR, 2021.
- [2] M. Balcilar, G. Renton, P. Héroux, B. Gaüzère, S. Adam, and P. Honeine. Analyzing the expressive power of graph neural networks in a spectral perspective. In *International Conference on Learning Representations*, 2020.
- [3] F. Frasca, B. Bevilacqua, M. M. Bronstein, and H. Maron. Understanding and extending subgraph gnn by rethinking their symmetries. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2022.
- [4] T. N. Kipf and M. Welling. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. In *5th International Conference on Learning Representations*, 2017.
- [5] C. Morris, M. Ritzert, M. Fey, W. L. Hamilton, J. E. Lenssen, G. Rattan, and M. Grohe. Weisfeiler and leman go neural: Higher-order graph neural networks. In *Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence*, volume 33, pages 4602–4609, 2019.
- [6] J. Piquenot, A. Moscatelli, M. Bélar, P. Héroux, R. raveaux, J.-Y. Ramel, and S. Adam.  $G^2n^2$  : Graph neural networks go grammatical. In *International Conference on Learning Representations* (<https://openreview.net/forum?id=eZneJ55mRO>), 2024.
- [7] K. Xu, W. Hu, J. Leskovec, and S. Jegelka. How powerful are graph neural networks? In *International Conference on Learning Representations*, 2019.