УДК 004.942

МАСШТАБИРУЕМАЯ ГЕНЕРАЦИЯ СЕТЕЙ ПО АТРИБУТАМ НА ОСНОВЕ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

Шиков Е.Н. (Университет ИТМО), Ваганов Д.А. (Университет ИТМО) Научный руководитель – к.т.н., Боченина К.О. (Университет ИТМО)

В данной работе рассматривается задача генерации сетей по атрибутам. Для ее решения предлагается использовать энкодер-декодерную архитектуру, основанную на графовых нейронных сетях. В докладе рассматриваются влияние различных архитектурных модификаций, операторов свертки, а также приводится обзор метрик для оценки качества генерации.

Моделирование и генерация графов имеет фундаментальное значение для изучения сетей в биологии, инженерии и социальных науках. Однако в большинстве предыдущих исследований по генерации графов на основе данных рассматривается задача генерации графов без учета их атрибутов, либо ограничиваясь небольшим набором дискретных меток (например модели, предназначенные для генерации молекул). В данной работе мы формулируем задачу следующим образом: имея неупорядоченное множество векторов атрибутов соединить их таким образом, чтобы итоговый граф был похож на графы, использованные на этапе тренировки. Также важным вопросом является вопрос масштабируемости, т. к. полученную модель предоплагается использовать в том числе для генерации эго-графов в социальных сетях.

Для решения данной задачи предлагается использовать нейронную сеть, состоящую из энкодера и декодера. В качестве энкодера рассматривались либо модель, в которой все наборы признаков обрабатываются независимо (например, многослойный персептрон), либо модели, в которых учитывается взаимное влияние входных векторов трансформер). При этом процесс генерации осуществляется авторегрессионно, учитывая уже построенный граф. Также в данной работе исследуется вопрос предпочтительного присоединения ребер, для этого были опробованы различные типы графовых сверток: усреднение, максимизация, а также суммирование с последующей подачей на многослойный персептрон. Для достижения масштабируемости модели при построении нейронной сети использовались только блоки с линейной зависимостью времени расчета от количества вершин; также для обучения нейронной сети выборка вершин и ребер осуществлялась с помощью поиска в ширину.

Для оценки качества модели был проведен обзор различных метрик генерации, а также эталонных наборов данных. Была проведена серия экспериментов на синтетических и реальных графах, которая продемонстрировали масштабируемость модели и качество генерации, сравнимое с базовыми моделями.

Ваганов Д.А. (автор)

Шиков Е.Н. (автор)

Боченина К.О. (научный руководитель)