

УДК 004.8

ОБУЧЕНИЕ РЕПРЕЗЕНТАЦИИ ГРАФА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕХАНИЗМОВ ВНИМАНИЯ

Кузнецов И.С. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, Фильченков А.А.
(Университет ИТМО)

Настоящий доклад рассматривает подход обучения репрезентации графов для задачи классификации при помощи глубоких нейронных сетей. Предлагается использовать механизмы внимания для улучшения существующих результатов классификации и добавления интерпретируемости в существующие подходы.

В настоящее время активно развиваются дискриминативные и генеративные методы глубокого обучения на графовых структурах. Дискриминативные подходы решают задачи как предсказания характеристик отдельных элементов графа: свойств узлов, ребер, подграфов, так и задачи определения свойств цельного графа. Большинство методов, основанных на глубоком обучении, инкорпорируют данные узлов графа в векторы низкой размерности для дальнейшего обучения их репрезентации. В ходе этапа оптимизации к полученным векторам предъявляется требование по отражению неявных взаимосвязей структуры графа, что позволяет использовать их для заключения выводов о характеристиках рассматриваемых объектов. За последние годы наблюдается существенный прогресс в задаче предсказания свойств графов: существующие методы продолжают модифицироваться, появляются новые решения, применяющие новые подходы в области глубокого обучения. Механизмы внимания, впервые использованные в области глубокой обработки естественного языка, за последние годы получили большое распространение в ландшафте задач глубокого обучения. Их популярность обоснована решением проблемы ограниченности памяти в глубоких рекуррентных сетях, а также возможностью добавления интерпретируемости в нейросетевые модели. Механизмы внимания активно развиваются в задачах машинного обучения на графовых структурах. Предлагаемые методы находят применение в областях анализа социальных сетей, работы со сложными биологическими объектами, анализа навигационных маршрутов.

Предлагаемое решение использует механизмы внимания в комбинации с существующими методами получения графовой репрезентации, - рекуррентными или сверточными графовыми слоями. Механизмы внимания используются для извлечения эффективных графовых репрезентаций путем применения внимания к различным структурным элементам графа. Для обучения представлению используется алгоритм обучения эмбединга графовых узлов, алгоритм случайного прохождения по узлам для отображения свойств узлов в последовательность, multi-headed механизмы внимания. В докладе рассмотрены архитектурные особенности предложенного решения, алгоритм агрегации свойств узлов в последовательности, а также взаимосвязь предложенного решения со state-of-the-art подходами.

Предложенный метод репрезентации узлов графа имеет потенциал улучшить существующие методы обучения графовому представлению и внедрению интерпретируемости в модель глубокого обучения. Результаты продемонстрированы на выборках социальных связей. Будущие направления исследования включают применение механизмов внимания к изменяющимся графам, анализ иерархических графов, анализ гетерогенных графов.

Кузнецов И.С. (автор)

Фильченков А.А. (научный руководитель)