

СОЧЕТАНИЕ СТРУКТУРНОЙ И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ИНФОРМАЦИИ В ГРАФОВЫХ ТРАНСФОРМЕРАХ

Додонов Владислав Олегович

Студент

Факультет ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: golafotino@gmail.com

Научный руководитель — Китов Виктор Владимирович

В последние годы графовые нейронные сети (GNN) стали ключевым инструментом анализа данных с графовой структурой и применяются в задачах от биоинформатики до анализа социальных сетей и кибербезопасности. Традиционные GNN реализуют локальный обмен сообщениями, обновляя состояние узла на основе соседей [1, 3]. Однако с ростом числа слоев они сталкиваются со «сглаживанием» информации и плохо учитывают глобальную структуру графа.

Альтернативой являются графовые трансформеры — модели на основе механизма внимания, ранее успешно примененного в задачах обработки текста и речи. В графах они учитывают взаимодействие любых пар узлов [4]. Однако, в отличие от текста, вершины графа не имеют естественного порядка, что усложняет позиционное кодирование.

В работе предлагается архитектурное решение, адаптирующее поворотное позиционное кодирование (RoPE) для учета расстояний, и алгоритм PageRank для обогащения признаков узлов.

Вместо аддитивного смещения используется поворотное кодирование, при котором векторы запросов и ключей поворачиваются на угол, зависящий от расстояния между узлами [2]. Преимущество предложенного подхода состоит в том, что оценка схожести вершин больше не задается отдельно от признаков, а естественным образом формируется в процессе их взаимодействия.

Для улучшения глобального представления в модель введена виртуальная вершина. Позиционное кодирование адаптировано для различных режимов ее использования — симметричных и асимметричных.

Глобальная значимость узлов учитывается с помощью PageRank: начальное представление формируется суммированием исходных признаков с обучаемым вектором, зависящим от позиции узла в ранжировании. Это позволяет выделять ключевые узлы для информационного потока.

Апробация проведена на открытых наборах данных (BBVP,

Lipophilicity, ESOL) для задач регрессии и классификации свойств молекул. Получено статистически значимое улучшение метрик R^2 и ROC-AUC по сравнению с существующими подходами. Установлено, что прирост качества более выражен на графах с большей средней длиной кратчайшего пути, что подтверждает эффективность учета пространственной и структурной информации.

Литература

1. Duvenaud D.K., Maclaurin D., Aguilera-Iparraguirre J., Gómez-Bombarelli R., Hirzel T., Aspuru-Guzik A., Adams R.P. Convolutional networks on graphs for learning molecular fingerprints // NeurIPS. 2015.
2. Su J., Lu Y., Pan S., Wen B., Liu Y. RoFormer: Enhanced transformer with rotary position embedding // Neurocomputing. 2024.
3. Xu K., Hu W., Leskovec J., Jegelka S. How powerful are graph neural networks? // arXiv:1810.00826. 2018.
4. Ying C., Cai T., Luo S., Zheng S., Ke G., He D., Shen Y., Liu T.-Y. Do transformers really perform badly for graph representation? // NeurIPS. 2021.