

ПРИМЕНЕНИЕ УСТОЙЧИВЫХ ГОМОЛОГИЙ ДЛЯ ЗАДАЧИ РАСПОЗНАВАНИЯ ОРИЕНТИРОВАННЫХ ГРАФОВ

Качура Александр Сергеевич, Левченко Егор Сергеевич

Студент, стажёр-исследователь

факультет ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, факультет ФКН НИУ ВШЭ,

Москва, Россия

E-mail: kachuraalexandr@mail.ru, levchenkoegors@gmail.com

Научный руководитель — *Чернышев Всеволод Леонидович,
Гуров Сергей Исаевич*

Ориентированные графы являются широко распространённой математической моделью для описания отношений между объектами, например в физике (атомные структуры), химии (молекулярные структуры), биологии (структурные и функциональные сети мозга, генные сети), библиометрии (графы цитирования публикаций), кибербезопасности и информационном поиске (веб-графы), рекомендательных системах (графы подписок в социальных сетях). В данных предметных областях возникают задачи классификации графов и их вершин. Классификацию орграфов можно проводить, используя некоторые топологические конструкции. Задачу классификации вершин возможно свести к задаче классификации орграфов с помощью анализа окрестностей вершин. Одним из наиболее популярных подходов в топологическом анализе данных является метод устойчивых гомологий, суть которого состоит в вычислении алгебраических инвариантов, называемых (ко)гомологиями, для фильтрации, которая в случае графов является неубывающей по включению последовательностью вложенных друг в друга подграфов. Такой подход даёт возможность описать граф при помощи характеристик, отличных от стандартных характеристик графа. Кроме того, полученные инварианты являются интерпретируемыми в отличие от скрытого представления, получаемого при помощи нейронных сетей. Анализ последовательностей подграфов, а не только исходных графов, позволяет обогатить признаковое описание и повысить устойчивость к шуму в том случае, когда структура графа не задана изначально, а оценивается по данным.

Существует несколько теорий (ко)гомогий орграфов, среди которых можно выделить (ко)гомологии ориентированного флагового комплекса, комплекса путей, Доукера и Хохшильда. Одним из недостатков (ко)гомогий Хохшильда является невозможность их вы-

числения на практике для графов с ориентированными циклами [2]. От данного ограничения можно избавиться при помощи вычисления конденсации графа [1], но в таком случае нарушается важное свойство функториальности, благодаря которому существует возможность отслеживать структуры в графе, сохраняющиеся при переходе от предыдущего элемента фильтрации к следующему.

В работе предложены модификации алгоритма вычисления когомологий Хохшильда на основе метода удаления дуг, приводящих к образованию ориентированных циклов, и перехода к градуировке когомологий по длине пути [3]. Данные модификации позволяют сохранить свойство функториальности когомологий, а также уменьшить временную сложность алгоритма построения признакового описания на основе устойчивых когомологий Хохшильда для плотных графов.

Проведено экспериментальное сравнение существующих алгоритмов классификации ориентированных графов и их вершин с методами, основанными на использовании устойчивых (ко)гомологий. Классификаторы орграфов были протестированы на наборе изображений головного мозга, полученных при помощи функциональной магнитно-резонансной томографии, и на синтетическом наборе случайных взвешенных орграфов, а алгоритмы классификации вершин орграфа — на графах цитирования научных публикаций.

В результате экспериментов установлено преимущество методов на основе устойчивых гомологий перед графовыми нейронными сетями в задаче классификации орграфов и выявлена информативность гомологических инвариантов окрестностей вершин при использовании графовой свёрточной сети для классификации вершин орграфа.

Литература

1. Caputi L., Riihimäki H. Hochschild homology, and a persistent approach via connectivity digraphs // *Journal of Applied and Computational Topology*. 2023. P. 1–50.
2. Happel D. Hochschild cohomology of finite-dimensional algebras // *Séminaire d'Algèbre Paul Dubreil et Marie-Paul Malliavin*. 1989. P. 108–126.
3. Li F., Tan D. Graded Hochschild Cohomology of a Path Algebra with Oriented Cycles // *Acta Mathematica Sinica. English Series*. 2014. T. 30, № 9. P. 1495–1512.