Solving Dynamic Graph Problems with Multi-Attention Deep Reinforcement Learning

Udesh Gunarathna
University of Melbourne
Melbourne
Australia
pgunarathna@student.unimelb.edu.au

Renata Borovica-Gajic
University of Melbourne
Melbourne
Australia
renata.borovica@unimelb.edu.au

Shanika Karunasekara
University of Melbourne
Melbourne
Australia
karus@unimelb.edu.au

Egemen Tanin
University of Melbourne
Melbourne
Australia
etanin@unimelb.edu.au

背景

图问题，如TSP问题和最小斯坦纳生成树问题，在数据工程和计算机科学中被广泛研究

而在实际应用中，图的特征往往会随着时间而变化

现有的启发式近似寻优算法一般仅适用于静态图

本文作者提出了一种名为**Graph Temporal Attention with Reinforcement Learning (GTA-RL)** 的架构，来解决基于图的动态组合优化问题

本文工作

符号说明与问题描述

给定图G，图上节点为$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$，其中$x_i=\{x_{0,i},x_{1,i},\cdots,x_{T-1,i}\}\in R^{T\times D}$

T为时间轴长度，D为节点特征维数

目标是找到一个长度为T_s的节点序列Y，满足约束$C(Y)$的前提下，最小化目标函数

$$P_{obj}(Y|G)=\sum_{t=1}^{T_s} f_c(x_{t,y_t},x_{t+1,y_{t+1}}) \tag{1}$$

其中f_c计算一个节点到另一个节点的代价，与具体问题有关

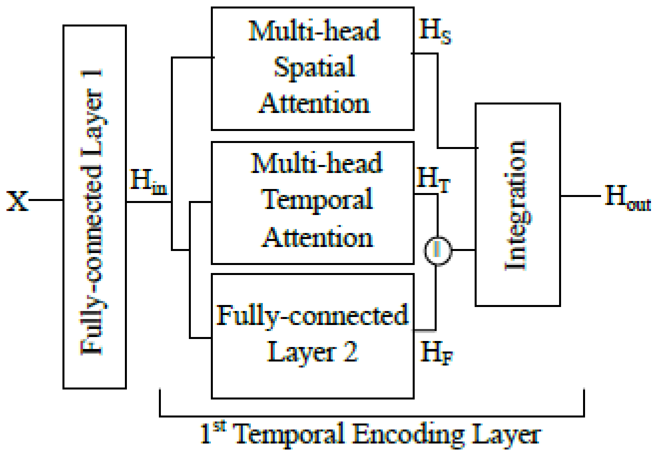
使用策略梯度方法来进行学习，参数化$\pi_\theta(Y|G)=Pr(Y|G)$

$$\pi_\theta(Y|G)=\prod_{t=1}^{T}\pi_\theta(y_t|G_{1:t-1},Y_{1:t-1}) \tag{2}$$

Graph Temporal Attention

主要分为编码器和解码器两部分

Encoder



对输入$X \in R^{T \times N \times D}$,先使用一个全连接层得到$H_{in} \in R^{T \times N \times D^h}$

对于H_{in}分别使用时间注意力和空间注意力

Spatial Attention

使用三个权重向量$wS_q \in R^{D^h \times D^h}$，$wS_k \in R^{D^h \times D^h}$，$wS_v \in R^{D^h \times D^h}$

对于每个时间步t，令$H_{S,t} = \{h_{1,t}, h_{2,t}, \cdots, h_{N,t}\} \in R^{N \times D^h}$

计算三个投影向量，如下

$$\begin{aligned} qS_t &= H_{S,t} wS_q \in R^{N \times D^h} \\ kS_t &= H_{S,t} wS_k \in R^{N \times D^h} \\ vS_t &= H_{S,t} wS_v \in R^{N \times D^h} \end{aligned} \tag{3}$$

计算注意力系数

$$\alpha_t = \mathbf{softmax}\left(\frac{qS_t \cdot (kS_t)^T}{\sqrt{D^h}}\right) \in R^{N \times N} \tag{4}$$

$\alpha_{t,i,j}$表示t时刻节点i, j间的注意力系数，若i, j间没有连边，则置为$-\infty$

计算每个节点在时间t下的表示

$$H'_{S,t} = \alpha_t \cdot vS_t \in R^{N \times D^h} \tag{5}$$

按时间轴堆叠，得到空间embeddingH'_S

$$H'_S = ||_{t=1}^{T} H'_{S,t} \in R^{T \times N \times D^h} \tag{6}$$

Temporal Attention

将会随时间改变的节点和不会改变的节点分开考虑

对于固定的节点$H_F \in R^{T \times U \times D^h}$，使用全连接层,得到$H'_F \in R^{T \times U \times D^h}$

对于会随时间改变的节点$H_T \in R^{T \times (N-U) \times D^h}$

类似地，使用三个权重向量$wT_q \in R^{D^h \times D^h}$，$wT_k \in R^{D^h \times D^h}$，$wT_v \in R^{D^h \times D^h}$

对于其中的每个节点$H_{T,i} = h_{i,1}, h_{i,2}, \cdots, h_{i,T} \in R^{T \times D^h}$

计算三个投影向量

$$qT_i = H_{T,i} wT_q \in R^{T \times D^h}$$

$$
\begin{aligned}
qT_i &= H_{T,i}wT_q \in R^{T\times D^h} \\
kT_i &= H_{T,i}wT_k \in R^{T\times D^h} \\
vT_i &= H_{T,i}wT_v \in R^{T\times D^h}
\end{aligned} \tag{7}
$$

计算注意力系数

$$
\beta_i = \mathbf{softmax}(\frac{qT_i \cdot (kT_i)^T}{\sqrt{D^h}}) \in R^{T\times T} \tag{8}
$$

β_{i,t_a,t_b}表示时刻t_a下的节点i与时刻t_b下的节点i间的注意力系数

计算节点i在每个时刻下的表示

$$
H'_{T,i} = \beta_t \cdot vT_i \in R^{T\times D^h} \tag{9}
$$

将所有可变节点的$H'_{T,i}$堆叠，得到H'_T

$$
H'_T = ||_{i=1,i\notin U}^{N} H'_{T,i} \in R^{(N-U)\times T\times D^h} \tag{10}
$$

再将H'_F和H'_T拼接得到最终的时间embedding

$$
H'_{TF} = H'_F || H'_T \in R^{N\times T\times D^h} \tag{11}
$$

多头注意力

时间注意力和空间注意力均使用多头注意力机制

令M为注意力的head数

以空间注意力为例，将上述的wS_q，wS_k，wS_v的维度改为$R^{D^h\times \frac{D^h}{M}}$，得到每个注意力下的$H'_{S,t}$为$R^{N\times \frac{D^h}{M}}$

再通过拼接的方式，将M个注意力下的embedding合并

时间注意力同理

融合层

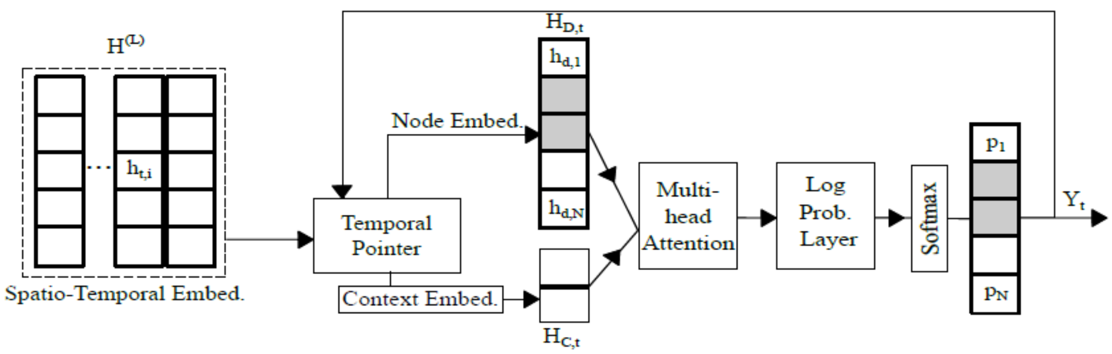
将空间注意力下的embedding H'_S和转置后的时间注意力下的embedding H'_{TF}拼接，得到$H'_S||H'_{TF} \in R^{T\times N\times 2*D^h}$

再使用权重参数$wI \in R^{D^h\times 2*D^h}$，得到

$$
H_{out} = \sigma(wI \cdot (H'_S||H'_{TF})) \in R^{T\times N\times D^h} \tag{12}
$$

H_{out}可以再作为Encoder的输入，即使用多层的Encoder

Decoder



将最后一层Encoder的输出$H^{(L)}$作为解码器的输入

$H_{D,t}$应该是$H^{(L)}[t,:,:] \in R^{N \times D^h}$

Context Embedding

对于每个时间点t

计算context embedding $H_{C,t} = f_{cnxt}(H_t^{(L)}, Y_t) \in R^{K*D^h+e}$，其中$f_{cnxt}, K, e$与具体的求解问题有关

在TSP中，作者设计

$$\begin{aligned} H_{C,t} &= h_{y_0}^{(L)} || h_{y_t}^{(L)} || H_{G,t} \\ H_{G,t} &= \sum_{i=1}^{N} h_{t,i}^{(L)} \end{aligned} \tag{13}$$

在VRP中

$$H_{C,t} = h_{y_t}^{(L)} || r || H_{G,t} \tag{14}$$

其中$H_{G,t}$同上，r为车辆的剩余容量

Multi-head Attention

使用权重参数$wC_q \in R^{(K*D^h+e) \times D^h}, wC_k \in R^{D^h \times D^h}, wC_v \in R^{D^h \times D^h}$

计算投影向量

$$\begin{aligned} qC_t &= H_{C,t} wC_q \in R^{N \times D^h} \\ kC_t &= H_{D,t} wC_k \in R^{N \times D^h} \\ vC_t &= H_{D,t} wC_v \in R^{N \times D^h} \end{aligned} \tag{15}$$

计算最终的embedding

$$H_{D,t}^{(F)} = \mathbf{softmax}(\frac{qC_t (kC_t)^T}{D^h}) \cdot vC_t \in R^{N \times D^h} \tag{16}$$

Log Probability Layer

使用权重参数wP计算每个节点的log概率

$$\gamma_i = \tanh\left(H_{D,t}^{(F)} \cdot (wP \cdot H_{D,t})^T\right) \tag{17}$$

再使用softmax归一化，得到每个点被选出的概率

$$P_t = \mathbf{softmax}(\gamma_i) \in R^N \tag{18}$$

概率最高的节点被加入到节点序列Y中

使用强化学习来训练

$$J(\theta|G) = \mathbb{E}_{Y \sim \pi_\theta}[P_{obj}(Y|G)] \tag{19}$$

使用策略梯度定理，可得

$$\nabla_\theta J(\theta|G) = \mathbb{E}_{Y \sim \pi_\theta}[P_{obj}(Y|G) \nabla_\theta \log(\pi_\theta(Y|G))] \tag{20}$$

由于直接使用上式，方差较大，因此改写为

$$\nabla_\theta J(\theta|G) = \mathbb{E}_{Y \sim \pi_\theta}[(P_{obj}(Y|G) - b(G)) \nabla_\theta \log(\pi_\theta(Y|G))] \tag{21}$$

其中$b(G)$称为baseline函数，文本试验了critic baseline和rollout baseline后，发现后者效果更好

实验

问题

TSP

在欧式空间中有n个点，需要找到一个节点的访问顺序，使得总行驶距离最小

动态版本中，节点的位置等信息会随着时间改变

VRP

在欧式空间中有n个点和一辆容量为c的运输车，除n个点外还有仓库节点

节点i需求d_i单位的货物，且其位置可能随时间变化

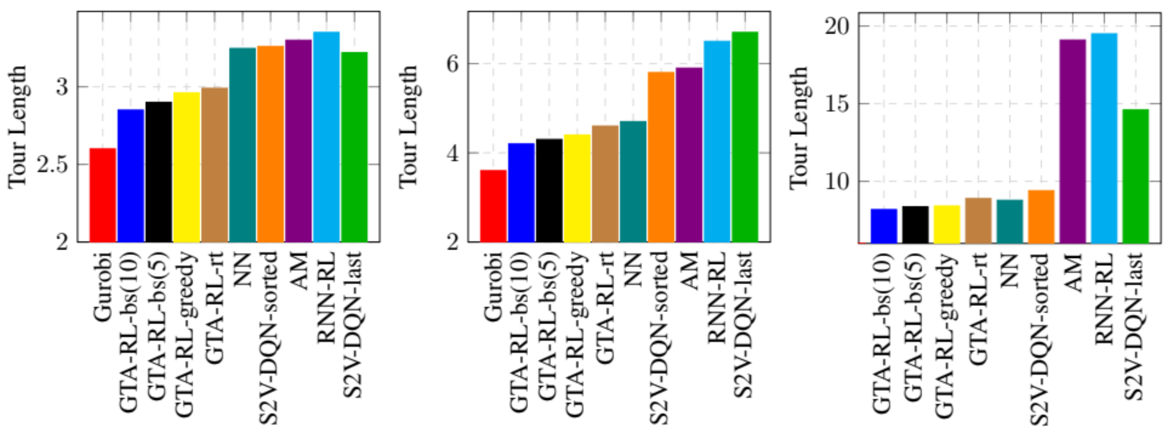
仓库节点可以将运输车装填至满载容量，且其位置不会改变

实验设定

- GTA-RL-greedy：GTA-RL的标准版本，每次贪心选择概率最大的节点加入路径
- GTA-RL-bs：每次保留概率最大的前k个路径
- GTA-RL-sum：$H_{D,t} = H_{C,t} = \frac{\sum_{t=1}^{T} H^{(L)}[t,:,:]}{T}$
- GTA-RL-0：$H_{D,t} = H_{C,t} = H^{(L)}[0,:,:]$
- GTA-RL-rt：GTA-RL的实时在线版本

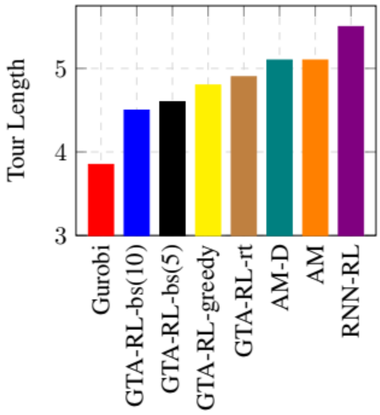
实验结果

在TSP中的

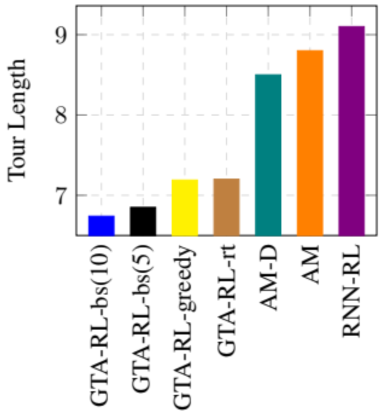


(a) Tour Length for TSP10 (b) Tour Length for TSP20 (c) Tour Length for TSP50

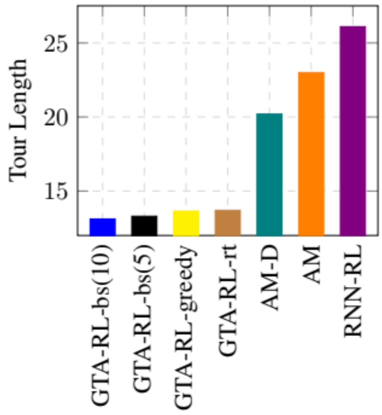
在VRP中



(a) Tour Length for VRP10



(b) Tour Length for VRP20



(c) Tour Length for VRP50