

日期: /

# Application of Deep Graph Generative Models to Molecule Generation

Q: 如何使用深度生成模型生成符合规则的分子图?

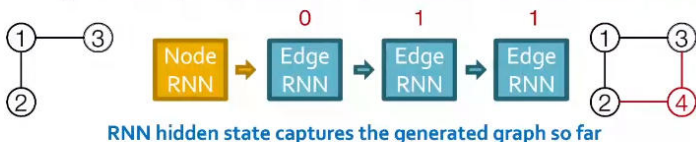
A: 我们将分子生成问题看作一个强化学习问题。

结合图表示和强化学习的图卷积策略网络(GCPN)

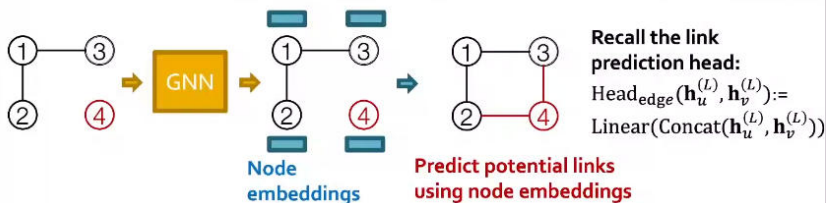
- GCPN 根据图神经网络而非类似 RNN 的隐藏层序贯地给出输出。表现力更强但时间成本大。

- GCPN 同时使用强化学习引导特定结构的生成。

■ GraphRNN: predict action based on RNN hidden states



■ GCPN: predict action based on GNN node embeddings



1) 插入节点

2) 使用 GNN 预测节点连接

3) 采取行动 (检查化学有效性)

4) 计算奖励

Step reward: 遵守化学规则

Final reward: 优化期望性质

Reward = Step ~ + Final

日期: /

## GCPN 的两部分优化:

- 1) 监督学习: 优化生成图和数据相似性
- 2) 强化学习: 使用策略梯度下降优化奖励