پردیس علوم
دانشکده ریاضی، آمار و علوم کامپیوتر

تعریف و بررسی شبکه‌عصبی گرافی

نگارنده

امین رضوی

استاد راهنما:

مرتضی محمدنوری

پروژه برای دریافت درجه کارشناسی
در رشته علوم کامپیوتر

تابستان ۱۴۰۲

مقدمه

هدف از انجام این پروژه آشنایی با شبکه عصبی گرافی بوده است. در ابتدا به تعریف و توضیحی از شبکه عصبی و گراف پرداخته شده است و سپس تعریف شبکه عصبی گرافی بیان شده است. هم‌چنین سعی شده است به تفاوت اصلی این شبکه با شبکه عصبی معمولی پرداخته شود که منجر به بررسی مسئله مهم انتقال پیام[1] در شبکه عصبی گرافی می‌شود.

[1] Massage Passing

چکیده

یکی از ابزارهای بسیار کارآمد در یادگیری ماشین، شبکه عصبی گرافی است. گراف‌ها ساختار داده‌های بسیار مفیدی هستند که علاوه بر اطلاعاتی که در هر گره[۲] داریم، اطلاعات سودمندی در مورد ارتباط میان گره‌ها از طریق یال‌ها[۳] در اختیار می‌گذارد. استفاده از این اطلاعات و وارد کردن به شبکه عصبی نیازمند استفاده از روش انتقال پیام است که به ازای نام‌گذاری‌های مختلف گراف بردارهای ویژگی تغییری نکنند. در این نوشتار به بررسی این موضوع و مسیر به دست آوردن روش انتقال پرداخته شده است.

[2] Node
[3] Edge

سپاسگزاری

از استاد گران قدر خود دکتر محمدنوری سپاس گزارم که مشفقانه و بردبارانه یاریگر اینجانب بوده اند. همچنین از استاد ابراهیم‌نژادیان که در انتخاب موضوع و منابع مساعدت فرموند و از هیچ همکاری و کمکی دریغ نفرمودند.

پیشگفتار

شبکه‌های عصبی گرافی[۴] از زیرمجموعه‌های مدل‌های عصبی هستند که برای پردازش داده‌های گرافی مورد استفاده قرار می‌گیرند. این شبکه‌ها قادر به یادگیری اطلاعات مرتبط با ارتباطات و ویژگی‌های گره‌ها و یال‌های یک گراف هستند و از این اطلاعات برای انجام مسائل مختلفی مرتبط با گراف‌ها استفاده می‌کنند.

در شبکه‌های عصبی گرافی، هر گره با یک بردار ویژگی نمایش داده می‌شود که اطلاعات مربوط به خود را در بر دارد. همچنین، هر یال نیز می‌تواند با یک بردار ویژگی نمایش داده شود که اطلاعات مرتبط با ارتباط بین دو گره را نشان می‌دهد. این اطلاعات می‌تواند مثلاً وزن یال، جهت ارتباط یا ویژگی‌های مشترک بین دو گره باشد. به عنوان مثال، شبکه‌های عصبی گرافی برای مسائل مانند دسته‌بندی گره‌ها، تشخیص جامعه‌ها، پیش‌بینی ارتباطات یا تولید گراف‌های جدید استفاده می‌شوند. با توجه به تعامل بین گره‌ها و ارتباطات آن‌ها، شبکه‌های عصبی گرافی قادر به مدل‌سازی و فهم الگوهای پیچیده‌تر و ساختارهای نهفته در داده‌های گرافی هستند. نکته‌ی قابل توجه در این مبحث این است که این ابزار در حوزه‌های داده حجیم مورد استفاده قرار می‌گیرد. در چنین فضاهایی استخراج اطلاعات به صورت دستی کار بسیار دشواری استو مضاف بر این، داده‌هایی که در این حوزه مورد بررسی قرار می‌گیرند داده‌های درحال تغییر هستند.

شبکه عصبی گرافی ابزار بسیار سودمند و کارآمدی است. در ماه آگوست سال ۲۰۲۱ شرکت گوگل در مقاله‌ای از استفاده از شبکه‌عصبی گرافی در نقشه گوگل خبر داد. بدین صورت که از این ساختار برای تخمین زمان رسیدن به مقصد استفاده کرده است. ناحیه‌های کوچک محله‌ها و نقاطی از مسیرها را گره‌های گراف در نظر گرفته است و سایر بخش‌های مسیرها را به عنوان یال در نظر گرفته است. برای تبیین کامل موضوع و چیستی شبکه عصبی گرافی دو مقدمه در نوشتار بیان شده است. اول، تعریف گراف و مدل کردن داده‌ها با این ساختار داده. دوم، تعریف شبکه عصبی پرسپترون چند لایه و بررسی تفاوت شبکه عصبی با شبکه عصبی گرافی.

[4] Graph Neural Networks (GNNs)

فهرست مطالب

۱ مفاهیم مقدماتی **۲**
۱.۱ گراف ۲
۱.۱.۱ تعریف گراف ۲
۲.۱.۱ مثال از داده های گراف ۲
۲.۱ شبکه عصبی ۳
۱.۲.۱ شبکه عصبی پرسپترون ۳

۲ شبکه عصبی گراف **۵**
۱.۲ تفاوت با شبکه عصبی ۵
۲.۲ تعیین بردار ویژگی با ماتریس مجاورت ۷
۳.۲ انتقال داده ۹
۴.۲ فرمول کلی ریاضی ۱۰
۵.۲ چالش های شبکه عصبی گرافی ۱۱
۶.۲ مزایای شبکه عصبی گرافی ۱۲

فصل ۱

مفاهیم مقدماتی

۱.۱ گراف

۱.۱.۱ تعریف گراف

گراف مجموعه‌ای از یال‌ها و گره‌هاست. هر گره حاوی اطلاعاتی در مورد خودش است. هم‌چنین گراف‌ها اطلاعاتی در مورد روابط بین گره‌ها که از طریق یال‌ها به هم متصل شده‌اند دارند. لذا در مواجهه با گراف‌ها می‌توانیم در ۳ نگاه متفاوت به بررسی آن‌ها بپردازیم [۱]:

۱. بررسی در سطح گره

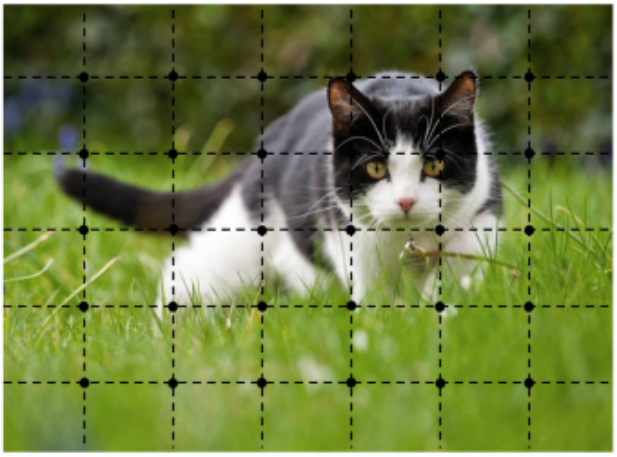
۲. بررسی در سطح یال

۳. بررسی در سطح گراف

به عنوان نمونه در گراف ارتباطی انسان‌ها در فضای اینستاگرام اگر به ویژگی‌های افراد مانند سن و جنسیت بپردازیم در سطح گره به گراف نگاه کرده‌ایم. اگر ارتباط‌ها و دنبال کردن و دنبال شدن‌ها را بررسی کنیم در سطح یال با مسئله مواجه شدیم. اما اگر مثلا تحلیل هم‌زمان افراد با مشخصاتشان و نوع و تعداد ارتباطات را بررسی کنیم، در سطح گراف به بررسی پرداخته‌ایم. در بحث شبکه عصبی گرافی ما به بررسی در سطح گراف می‌پردازیم.

۲.۱.۱ مثال از داده های گراف

برای وارد شدن به بحث شبکه عصبی گرافی، ابتدا باید داده‌ها را به شکل گراف در بیاوریم. برای برخی از داده‌ها اولین مدل پیشنهادی مدل گراف است همانند مثالی که در بالا ذکر شد (شبکه‌های اجتماعی)، نقشه‌ها، ساختارها ی مولکولی و ...



شکل ۱.۱: مدل کردن یک عکس با استفاده از ساختار داده گراف [۲].

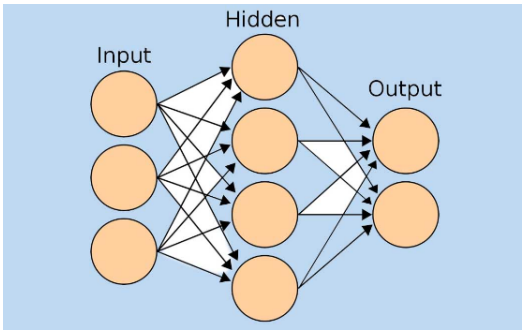
برخی دیگر از داده‌ها را می‌توان به روش‌هایی با گراف پیاده سازی کرد مانند داده‌های تصویری و متنی. همان طور که در شکل ۱.۱ مشخص شده است، گرافی را بر عکس منطبق کردیم تا داده‌های عکس در گره‌ها و یال‌های گراف نگهداری شود.

۲.۱ شبکه عصبی

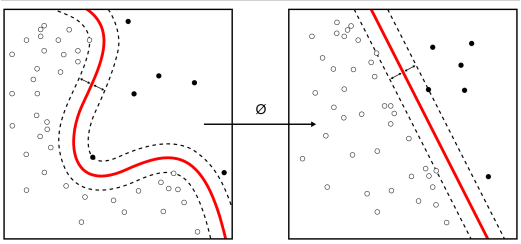
۱.۲.۱ شبکه عصبی پرسپترون

پرسپترون چند لایه[1] دسته ای از شبکه‌های عصبی است. همان طور که در شکل ۲.۱ می‌بینید، یک پرسپترون چند لایه شامل حداقل سه لایه گره است: یک لایه ورودی، یک لایه پنهان و یک لایه خروجی. به جز گره‌های ورودی، هر گره یک نورون است که از یک تابع فعال‌سازی غیر خطی استفاده می‌کند پرسپترون چند لایه از تکنیک یادگیری نظارت شده برای آموزش استفاده می‌کند. لایه‌های متعدد آن و فعال‌سازی غیر خطی آن پرسپترون چند لایه را از یک پرسپترون خطی متمایز می‌کند. در واقع می‌تواند داده‌هایی را متمایز کند که به صورت خطی قابل‌تفکیک نیستند [۳].(همانند نمونه در شکل ۳.۱)

[1] Multy Layer Perceptron



شکل ۲.۱: پرسپترون با یک لایه مخفی [۳].



شکل ۳.۱: در تصویر سمت راست خط قرمز توسط پرسپترون معمولی رسم شده و در تصویر سمت چپ منحنی قرمز توسط پرسپترون چند لایه ساخته شده است [۳].

فصل ۲

شبکه عصبی گراف

۱.۲ تفاوت با شبکه عصبی

تفاوت اصلی بین شبکه‌های عصبی گرافی و شبکه‌های عصبی معمولی (که به عنوان شبکه‌های عصبی ازترادیشنال نیز شناخته می‌شوند) در نحوه پردازش داده‌ها و ساختار مورد استفاده در هر یک است. این تفاوت‌ها نشأت می‌گیرد از اینکه شبکه‌های عصبی گرافی مخصوص پردازش داده‌های گرافی و ارتباطات بین گره‌ها هستند، در حالی که شبکه‌های عصبی معمولی بیشتر برای پردازش داده‌های ساختارمند و ماتریس‌های ورودی به کار می‌روند.
تفاوت‌های اساسی میان این دو نوع شبکه به شرح زیر است:

۱. ویژگی‌ها و ساختار ورودی:

- در شبکه‌های عصبی گرافی، ورودی شبکه، یعنی گراف، تشکیل شده از گره‌ها و یال‌هاست که هر گره می‌تواند ویژگی‌های خود را داشته باشد و هر یال نیز می‌تواند ویژگی‌های خود را داشته باشد.
- در شبکه‌های عصبی معمولی، ورودی شبکه معمولاً یک ماتریس یا بردار است که ویژگی‌ها و اطلاعات به صورت ساختار نشان داده نمی‌شوند.

۲. ساختار شبکه:

- شبکه‌های عصبی گرافی از لایه‌هایی تشکیل شده‌اند که به طور خاص برای پردازش اطلاعات گرافی طراحی شده‌اند، مانند لایه‌های گراف کانولوشنی[1] [۴] و پولینگ گراف[2] [۵]، که با توجه به ساختار گراف و ارتباطات بین گره‌ها، ویژگی‌ها را به‌روزرسانی می‌کنند.

[1] Graph Convolutional Layers
[2] Graph Pooling

- شبکه‌های عصبی معمولی معمولاً از لایه‌های پرسپترون[3] و تمام متصل[4] تشکیل شده‌اند که به منظور پردازش داده‌ها به صورت ماتریس‌ها و بردارها طراحی شده‌اند.

۳. نوع مسائل حل شده::

- شبکه‌های عصبی گرافی اغلب برای مسائل مرتبط با داده‌های گرافی مانند دسته‌بندی گره‌ها، تشخیص جامعه‌ها، پیش‌بینی ارتباطات و تولید گراف‌های جدید استفاده می‌شوند.
- شبکه‌های عصبی معمولی معمولاً برای مسائل دسته‌بندی، رگرسیون، تشخیص الگو و سایر مسائل عمومی پردازش داده‌ها به کار می‌روند [۶].

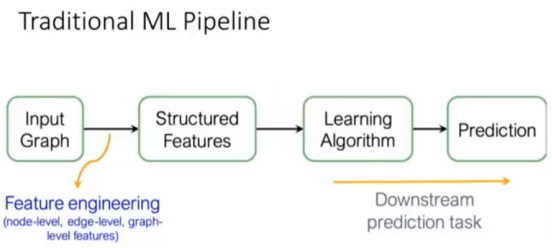
در کل، شبکه‌های عصبی گرافی از شبکه‌های عصبی معمولی به خاطر قابلیت‌ها و نیازهای خاص خود در پردازش داده‌های گرافی متمایز می‌شوند. از آنجایی که داده‌های گرافی در بسیاری از حوزه‌ها و مسائل واقعی به صورت شبکه‌ها و ارتباطات میان عناصر نمایش داده می‌شوند، استفاده از شبکه‌های عصبی گرافی به عنوان یک ابزار قدرتمند برای مدل‌سازی و پیش‌بینی اطلاعات مرتبط با این شبکه‌ها بسیار مفید است.

تفاوت مهم دیگر در رویکرد کلی گراف است. در مدل های غیر گرافی یادگیری ماشین باید در ابتدا بردار ویژگی ساخته می‌شد تا بتوان ورودی شبکه باشد. یعنی ابتدا باید کاملا یک بردار ویژگی برای هر گره را به تفکیک مشخص کنیم. سپس این بردار ویژگی را به شبکه بدهیم. ساختار این چنین شبکه‌هایی در شکل ۱.۲ قابل رؤیت است. اما مشکلی که وجود دارد این است که همان طور که گفته شد، ما در سطح گراف به مسئله نگاه می‌کنیم. پس ارتباطات گره‌ها با هم از طریق یال‌ها باید در بردار ویژگی ورودی شبکه مهم باشد. به این ترتیب نام‌گذاری گره‌ها مهم می‌شود. اما این نباید مهم باشد جون در اکثر داده‌ها ترتیب گره‌ها معنایی ندارد. هم‌چنین داده ما پویاست و دائم ممکن است گره و یال به آن اضافه و کم شود. پس باید وابسته به ترتیب خاصی نباشد.(به شکل ۲.۲ توجه کنید. ورودی وردار ویژکی حذف شده است و به جای آن یادگیری خودکار بردار ویژگی جایگزین شده است.)

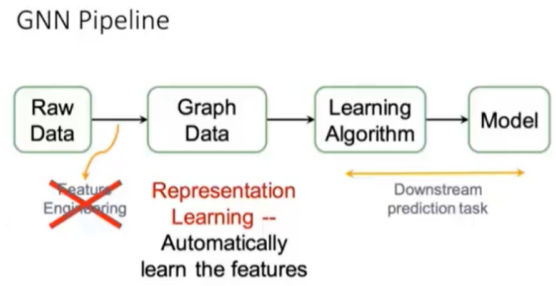
در واقع تفاوت اصلی شبکه عصبی گرافی با شبکه عصبی ساده در این است که استخراج ویژگی در شبکه عصبی گرافی به صورت خودکار در الگوریتم ساخته می‌شود در حالی که در شبکه عصبی ساده باید به الگوریتم داده شود.

---

[3]Perceptron Layers
[4]Fully-Connected Layers



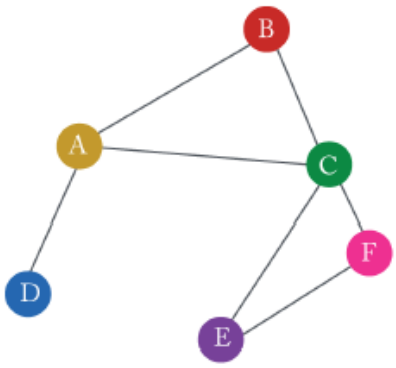
شکل ۱.۲: مسیر استفاده از شبکه عصبی ساده [۶].



شکل ۲.۲: مسیر استفاده از شبکه عصبی گرافی [۶].

۲.۲ تعیین بردار ویژگی با ماتریس مجاورت

فرض کنید گرافی داده شده داریم که ۶ گره دارد. به طریق دلخواهی این گراف را نام‌گذاری می‌کنیم. شکل این گراف در شکل ۳.۲ قابل مشاهده است.



شکل ۳.۲: یک گراف فرضی [۷].

می‌خواهیم این گراف داده شده را که حاوی اطلاعاتی در هر گره و روابط میان گره‌ها است، در قالب یک شبکه پرسپترون چند لایه پیاده سازی کنیم. برای این کار ابتدا ماتریس مجاورت این گراف را تشکیل می‌دهیم. این ماتریس در عبارت ۱.۲ آمده است.

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (۱.۲)$$

پرسپترون چند لایه را به این صورت تشکیل می‌کنیم که هر سطر ماتریس مجاورت ورودی‌های شبکه عصبی می‌شود. ممکن است برای هر گره ویژگی‌های دیگری نیز در نظر گرفته باشیم، همگی آن ویژگی‌ها با اطلاعات در هر سطر ماتریس ورودی‌های شبکه عصبی می‌شوند.

اما نکته‌ای که وجود دارد شبکه حاصله وابسته به نام‌گذاری ماست. یعنی با تغییر نام‌گذاری شبکه سطرهای ماتریس مجاورت جابجا می‌شود فلذا ورودی‌های هر لایه پرسپترون چند لایه متفاوت می‌شود. پس این نمی‌تواند راه منحصر به فردی باشد زیرا ما به دنبال این هستیم که بردارهای ویژگی به صورت خودکار ساخته شوند و برای یک ماتریس مشخص که مدلی از داده ماست خروجی‌های مختلفی از شبکه نداشته باشیم. پس باید راهی را انتخاب کنیم که جدای از نام گذاری یک شبکه تولید شود [۷].

۳.۲ انتقال داده

همان طور که در بالا اشاره شد، به ازای تغییر در نام‌گذاری گراف، ماتریس جایگشت تغییر می‌کند. تغییر آن هم به این صورت است که همگی ماتریس‌های مجاورت یک گراف خاص، جایگشت‌های سطری و ستونی یک‌دیگر هستند. ما به دنبال تعریف تابعی هستیم که ورودی آن ماتریس مجاورت باشد و خروجی آن یک شبکه عصبی. در این تابع اگر سطرها و ستون‌های ماتریس مجاورت ورودی جایگشت یابند، خروجی تابع نباید تغییر کند. صورت ریاضی این مطلب معادله ۲.۲ نشان داده شده است.

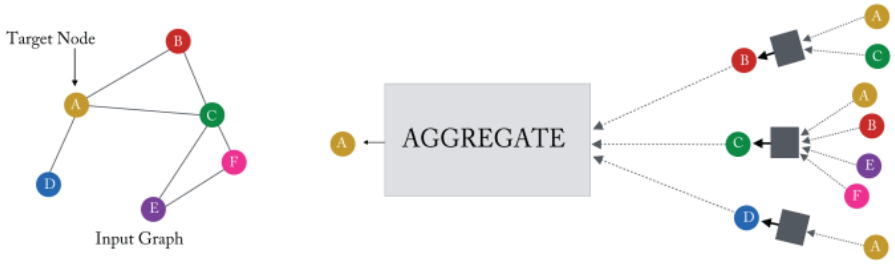
$$f(PAP^T) = f(A) \qquad (۲.۲)$$

که در آن f تابعی است که به دنبال آن هستیم.

برای این کار، ابتدا یکی از گره‌ها را در نظر می‌گیریم. سپس تمامی گره‌ها دیگر که با یال‌هایی به این گره مشخص شده متصل اند را در لایه بعد قرار می‌دهیم. همین کار را برای تمامی گره ها در لایه دوم انجام می‌دهیم. این کار را تا جایی که بخواهیم ادامه می‌دهیم. به این روش، روش انتقال داده گفته می‌شود [۷].

به عنوان نمونه با توجه به شکل ۳.۲، فرض کنیم گره A را در ابتدا انتخاب می‌کنیم (توجه کنیم این نام‌گذاری الان فقط به این علت است که بدانیم درباره کدام گره صحبت می‌کنیم. در انتها خواهیم دید اگر نام گذاری به طریقی دیگر بود خروجی تغییری نمی‌کرد.)

سپس، هر گرهی که به گره A متصل است را در لایه بعد قرار می‌دهیم. پس B, C, D در لایه بعد قرار می‌گیرد. بعد همین کار را برای این گره‌ها مجدد انجام می‌دهیم. خروجی این کار در شکل ۴.۲ قابل رؤیت است.

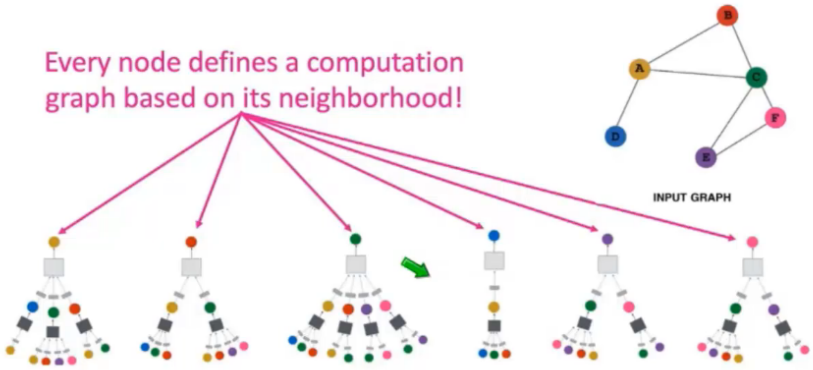


شکل ۴.۲: گره شروع شونده گره A است و تا لایه ۳ انتقال داده بررسی شده است [۷].

گره‌های سمت راست در تصویر بالا ورودیی که به شبکه می‌دهند همان بردار ویژگی‌های خودشان است. وقتی که به قسمت مربع شکل‌ها می‌رسند ابتدا میان ورودی‌ها میانگینی گرفته می‌شود و این میانگین حاصل، ورودی شبکه عصبی‌ای می‌شوند که در مربع قرار دارد.

به عنوان نمونه با توجه به شکل ۴.۲، A, C بردارد ویژگی‌های خود را وارد می‌کنند و خروجی آن‌ها با هم میانگین‌گرفته می‌شود و به عنوان داده ورودی به شبکه عصبی داخل مربع داده می‌شود. خروجی شبکه عصبی در آن مربع با بردار ویژگی B جمع می‌شود و به مرحله بعد می‌رود. همین اتفاق برای بقیه رخ می‌دهد و در مرحله تجمیع مجدداً ۳ خروجی قبل میانگین گرفته میشود و ورودی شبکه عصبی در این مرحله می‌شود.

این کار برای هر کدام از گره‌ها انجام می‌شود. یعنی به ازای تعداد گره‌ها گراف‌هایی ساخته می‌شود. شکل ۵.۲ برای تمامی روؤس این شبکه‌ها را نشان می‌دهد.



شکل ۵.۲: ۶گراف ساخته شده به ازای ۶ گره گراف [۷].

۴.۲ فرمول کلی ریاضی

آن‌چه که مورد بحث در ساخت شبکه عصبی گرافی است نوع تولید شدن داده‌ها و انتقال به لایه بعد است که در این بخش به آن می‌پردازیم. عبارت ۳.۲ فرم کلی ریاضی شبکه عصبی گرافی را نشان می‌دهد.

$$h_v^{(k+1)} = \sigma(W_k \sum_{u \in N(v)} \frac{h_u^k}{|N(v)|} + B_k h_v^{(k)}), \forall k \in \{0, \dots, K-1\} \qquad (۳.۲)$$

در ابتدا و لایه صفرم ورودی شبکه h_v^0 همان بردار ویژگی های گره ها است، به عبارت دیگر $h_v^0 = x_v$. ورودی برای هر لایه بعدی خروجی تابع هزینه غیر خطی σ است. ورودی این تابع هزینه از چند قسم تشکیل شده است. همان طور که اشاره شد، ابتدا میانگین خروجی شبکه عصبی‌ها نهفته (در شکل ۵.۲ به شکل مربع نشان داده شده بود) گرفته می‌شود. این خروجی که به شکل بردار است در وزن‌های مربوطه هر گره W_k در شبکه عصبی ضرب می‌شود. سپس این مقدار با حاصل ضرب ضریب B در خروجی همان لایه B_k (که در لحظه خروج از مربع این مقدار برابر با بردار ویژگی آن گره است) جمع می‌شود. حاصل این محاسبات که یک برداری به اندازه تعداد گره‌های لایه است، ورودی تابع هزینه است [۸].

۵.۲ چالش های شبکه عصبی گرافی

شبکه‌های عصبی گرافی همچنان یکی از حوزه‌های پژوهشی پرطرفدار هستند و بسیاری از مسائل گرافی و شبکه‌های پیچیده را با موفقیت حل می‌کنند. اما همچنان با چالش‌ها و مسائلی مواجه هستند که برخی از آن‌ها عبارت‌اند از:

- حجم داده‌ها: داده‌های گرافی معمولاً بسیار پیچیده و حجیم هستند. این امر باعث افزایش هزینه محاسباتی و مصرف منابع سیستمی می‌شود.
- انتخاب ساختار شبکه: انتخاب معماری مناسب برای شبکه عصبی گرافی در مسائل مختلف چالش‌هایی ایجاد می‌کند. انتخاب تعداد لایه‌ها، تعداد گره‌ها در هر لایه، نحوه ارتباطات بین گره‌ها و سایر پارامترها می‌تواند تأثیر قابل توجهی بر عملکرد شبکه داشته باشد.
- پیچیدگی محاسباتی: محاسبات بر روی داده‌های گرافی معمولاً پیچیده‌تر از داده‌های ساده ترتیبی[5] است. این مسئله می‌تواند باعث کند شدن آموزش و پیش‌بینی مدل‌های عصبی گرافی شود.
- مشکل ناهمگنی داده‌ها: در داده‌های گرافی، گره‌ها و یال‌ها ممکن است انواع ویژگی‌ها و خصوصیات مختلفی داشته باشند که این ناهمگنی می‌تواند در آموزش و تعمیم‌پذیری مدل‌ها مشکلاتی ایجاد کند.
- انتقال یادگیری: در داده‌های گرافی، انتقال یادگیری[6] میان مسائل مختلف ممکن است دشوار باشد، به خصوص زمانی که داده‌ها و ساختارهای مسائل متفاوت هستند.

[5] Sequential
[6] Transfer Learning

- پایگاه داده‌های کم: برای برخی مسائل گرافی، ممکن است داده‌های آموزشی کمی در دسترس باشد و این موضوع می‌تواند باعث بیش‌برازش[7] شود.

- اعتبارسنجی مدل: اعتبارسنجی مدل‌های عصبی گرافی به دلیل ساختار پیچیده داده‌ها و پیچیدگی محاسباتی مسئله‌ای مهم و دشوار است.

- تحلیل نتایج: تفسیر نتایج و ارزیابی کیفیت عملکرد شبکه‌های عصبی گرافی نیازمند روش‌های متفاوتی است که همچنان موضوع پژوهشی مطرح است.

به طور کلی، شبکه‌های عصبی گرافی با وجود پیشرفت‌های قابل‌توجه، هنوز هم با برخی چالش‌ها روبرو هستند که پژوهش‌های آینده بهبود عملکرد و کارایی آن‌ها را ادامه خواهد داد.

۶.۲ مزایای شبکه عصبی گرافی

شبکه‌های عصبی گرافی به عنوان یکی از حوزه‌های مهم در پژوهش‌های علوم داده و یادگیری عمیق، دارای مزایای بسیاری هستند که آن‌ها را به ابزار قدرتمندی در پردازش داده‌های گرافی و مسائل مرتبط تبدیل کرده‌اند. برخی از مزایای شبکه‌های عصبی گرافی عبارت‌اند از:

- مدل‌سازی داده‌های گرافی: از آنجایی که شبکه‌های عصبی گرافی به طور مستقیم بر روی گراف‌ها و ارتباطات بین گره‌ها عمل می‌کنند، برخورداری از قابلیت مدل‌سازی داده‌های گرافی و استفاده از اطلاعات مرتبط با ساختار گرافی، آن‌ها را برای مسائلی مانند تشخیص جامعه‌ها، پیش‌بینی ارتباطات و دسته‌بندی گره‌ها بسیار مناسب می‌کند.

- انعطاف‌پذیری در ویژگی‌ها: شبکه‌های عصبی گرافی قادر به یادگیری ویژگی‌های پیچیده‌تر از داده‌های گرافی هستند. به عبارت دیگر، می‌توانند اطلاعات مرتبط با هر گره و یال را به‌خوبی استخراج و به اندازه کافی انعطاف‌پذیر باشند که مسائل پیچیده را حل کنند.

- انتقال یادگیری: یکی از مزایای شبکه‌های عصبی گرافی، قابلیت انتقال یادگیری است. یعنی می‌توانند اطلاعات یادگرفته شده از یک گراف به مسئله‌ای دیگر را انتقال دهند. این ویژگی مفید است زمانی که داده‌ها و مسائل مرتبط با گراف‌ها مشابه هم باشند.

- حفظ اطلاعات ساختاری: شبکه‌های عصبی گرافی، معمولاً مجموعه‌ای از لایه‌های کانولوشنی را روی گراف اجرا می‌کنند که این کار باعث حفظ ویژگی‌های ساختاری موجود در گراف می‌شود. این ویژگی می‌تواند در تشخیص الگوهای پیچیده و ساختارهای مختلف در داده‌های گرافی مفید باشد.

---

[7] overfitting

- پیچیدگی محاسباتی کمتر: با اینکه مدل‌های عصبی گرافی پیچیدگی محاسباتی خود دارند، اما به دلیل استفاده از اطلاعات محلی گره‌ها و محدودیت‌های مرتبط با ساختار گرافی، می‌توانند پیچیدگی محاسباتی کمتری نسبت به روش‌های کلاسیکی و مبتنی بر ماتریس داشته باشند.
- کارآیی بالا در گراف‌های بزرگ: شبکه‌های عصبی گرافی به دلیل اینکه بر روی گراف‌ها عمل می‌کنند و از اطلاعات محلی استفاده می‌کنند، کارآیی بالایی در پردازش گراف‌های بزرگ دارند.

با توجه به مزایای بالا، شبکه‌های عصبی گرافی ابزاری قوی در حوزه‌هایی همچون تحلیل شبکه‌ها، پردازش زبان طبیعی، تحلیل شبکه‌های اجتماعی، ترافیک شبکه و مسائل دیگر مرتبط با داده‌های گرافی محسوب می‌شوند.

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

انتقال پیام ..... Message Passing
انتقال یادگیری ..... Transfer Learning
بیش برازش ..... Overfitting
پرسپترپن چند لایه ..... Multy Layer Perceptron
پولینگ گراف ..... Graph Pooling
ترتیب ..... Sequential
تمام متصل ..... Fully-Connected Layers
شبکه عصبی گرافی ..... Graph Neural Networks
گره ..... Node
لایه‌های پرسپترون ..... Perceptron Layers
لایه‌های گراف کانولوشنی ..... Graph Convolutional Layers
یال ..... Edge

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

یال ..... Edge
تمام متصل ..... Fully-Connected Layers
لایه‌های گراف کانولوشنی ..... Graph Convolutional Layers
شبکه عصبی گرافی ..... Graph Neural Networks
پولینگ گراف ..... Graph Pooling
انتقال پیام ..... Message Passing
پرسپترپن چند لایه ..... Multy Layer Perceptron
گره ..... Node
بیش برازش ..... Overfitting
لایه‌های پرسپترون ..... Perceptron Layers
ترتیب ..... Sequential
انتقال یادگیری ..... Transfer Learning

کتاب‌نامه

[1] G. Ciano, A. Rossi, M. Bianchini, and F. Scarselli, "On inductive–transductive learning with graph neural networks," *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, vol.44, p.758–769, feb 2022.

[2] M. M. Bronstein, J. Bruna, Y. LeCun, A. Szlam, and P. Vandergheynst, "Geometric deep learning: Going beyond euclidean data," *IEEE Signal Processing Magazine*, vol.34, no.4, pp.18–42, 2017.

[3] A. Micheli, "Neural network for graphs: A contextual constructive approach," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol.20, no.3, pp.498–511, 2009.

[4] X. Zhang, H. Liu, Q. Li, and X.-M. Wu, "Attributed graph clustering via adaptive graph convolution," in *Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence*, IJCAI'19, p.4327–4333, AAAI Press, 2019.

[5] O. Vinyals, S. Bengio, and M. Kudlur, "Order matters: Sequence to sequence for sets," 11 2015.

[6] H. Wang and J. Leskovec, "Unifying graph convolutional neural networks and label propagation," *CoRR*, vol.abs/2002.06755, 2020.

[7] M. Niepert, M. Ahmed, and K. Kutzkov, "Learning convolutional neural networks for graphs," in *Proceedings of the 33rd International Conference on International Conference on Machine Learning - Volume 48*, ICML'16, p.2014–2023, JMLR.org, 2016.

[8] M. Khamsi and W. Kirk. *An Introduction to Metric Spaces and Fixed Point Theory*. John Wiley and Sons, Ltd, 2001.

Abstract

This article explores the significant role of neural networks in machine learning, highlighting their efficiency as powerful tools. Additionally, it delves into the utility of graphs as data structures, which offer valuable insights not only into individual node information but also facilitate communication analysis between nodes through edges. Effectively incorporating this information as input into neural networks necessitates a consistent message transfer approach, independent of the naming conventions used for feature vectors. The present study addresses this issue and proposes a suitable method for achieving seamless message transfer.

College of Science
School of Mathematics, Statistics, and Computer Science

Definition and Review of Graph Neural Network

Amin Razavi

Supervisor: Morteza Mohammad Nouri

A thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for
the degree of B.Sc. in Computer Science

2023