



پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

بهبود مدل‌های شبکه عصبی گرافی برای حل مسائل گراف

Improving graph neural networks for solving graph problems

مجری پیشنهاد دهنده: علیرضا رضوانیان

۱- درباره مجری پیشنهاد دهنده طرح

- علیرضا رضوانیان، استادیار پایه ۱۱، گروه مهندسی کامپیوتر، دانشگاه علم و فرهنگ، تهران، ایران
- دانش آموخته دکتری مهندسی کامپیوتر، گروه مهندسی کامپیوتر، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)، تهران، ایران
- مجری طرح‌های پژوهشگر غیرمقیم از سال ۹۵ تا ۹۸ با پژوهشکده علوم کامپیوتر، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی.

۲- چکیده طرح

بسیاری از پدیده‌ها در دنیای واقعی را می‌توان به صورت گراف نشان داد، بطوریکه گره‌ها متناظر با موجودیت‌ها و یال‌ها متناظر با روابط بین موجودیت‌ها هستند. شبکه‌های عصبی گرافی (GNN) با بهره‌برداری از ساختار گراف و ویژگی‌های گره، به کارایی مناسبی در مسائل مختلف شبکه مانند طبقه‌بندی گره و پیشبینی پیوندی دست یافته‌اند. با این حال، مدل‌های شبکه عصبی گرافی موجود در معرض سوگیری‌هایی در ساختار گراف هستند که از یال‌های گم‌شده یا نادرست ناشی می‌شوند. یکی از روشهای متداول در شبکه عصبی گرافی در طول آموزش و آزمایش برای تجمیع ویژگی‌ها نمونه‌برداری از همسایگی محلی گره‌ها است. از طرفی ساختار همسایگی ناقص یا همراه با نویز می‌تواند باعث ایجاد سوگیری گردد. بدین منظور لازم است که در حین آموزش و استنتاج نسبت به یال‌های گم‌شده یا نادرست استحکام داشته باشد. از مسائل بنیادی و مهم در گراف می‌توان به موضوع پیشبینی پیوندی و طبقه‌بندی گره اشاره کرد که در کاربردهای مختلفی مانند سیستم‌های توصیه‌گر می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. در این طرح بهبود مدل‌های پایه شبکه‌های عصبی گرافی (GNN) برای حل این مسائل مدنظر است.

Many real-world phenomena can be represented as graphs, where nodes correspond to entities and edges represent relationships between them. Graph Neural Networks (GNNs) leverage graph structure and node features to achieve strong performance in various network-related tasks, such as node classification and link prediction. However, existing GNN models are susceptible to biases arising from graph structure imperfections, such as missing or erroneous edges. A common approach in GNNs involves aggregating features by sampling from the local neighborhood of nodes during training and inference. Yet, incomplete or noisy neighborhood structures can introduce biases. Thus, it is crucial to enhance the robustness of GNNs against missing or incorrect edges during both training and inference. Fundamental challenges in graph analysis include link prediction and node classification, which have broad applications, such as in recommender systems. This proposal aims to improve baseline GNN models to address these challenges effectively.

۳- تجربه و فعالیت قبلی مرتبط با طرح پیشنهادی حداکثر ده مورد پژوهشی (مقاله، کتاب، سخنرانی، ثبت اختراع) شاخص را ذکر نمایید:

مقاله

1. Karami, Reyhane, S. Mehdi Vahidipour, and Alireza Rezvanian. "SEAL+: A Subgraph-Enhanced Framework for Link Prediction with Graph Neural Networks." *Journal of Industrial Information Integration* (2025): 100802.
2. Khomami, Mohammad Mehdi Daliri, Mohammad Reza Meybodi, and Alireza Rezvanian. "A cellular goore game-based algorithm for finding the shortest path in stochastic multi-layer graphs." *The Journal of Supercomputing* 81.1 (2025): 1-50.
3. Khomami, Mohammad Mehdi Daliri, Mohammad Reza Meybodi, and Alireza Rezvanian. "Efficient identification of maximum independent sets in stochastic multilayer graphs with learning automata." *Results in Engineering* 24 (2024): 103224.
4. A. Rezvanian, S. M. Vahidipour, Z. S. Jalali, A spanning tree approach to social network sampling with degree constraints, *Social Network Analysis and Mining*, Volume 14, article number 101, 2024.
5. M. D. Khomami, M. R. Meybodi, A. Rezvanian, "Exploring social networks through stochastic multilayer graph modeling" *Chaos, Solitons & Fractals*, Volume 182, 114764, May 2024.
6. M. Mohammadi, S. Jamshidi, A. Rezvanian, M. Gheisari, A. Kumar, "Advanced fusion of MTM-LSTM and MLP models for time series forecasting: An application for forecasting the solar radiation", *Measurement: Sensors*, Volume 33, 101179, 2024.
7. S. Jamshidi, M. Mohammadi, S. Bagheri, H. E. Najafabadi, A. Rezvanian, M. Gheisari, M. Ghaderzadeh, A. S. Shahabi, Z. Wu, "Effective Text Classification using BERT, MTM LSTM, and DT", *Data & Knowledge Engineering*, Volume 151, 102306, 2024.
8. Y. Mashayekhi, A. Rezvanian, and S. M. Vahidipour, "A novel regularized weighted estimation method for information diffusion prediction in social networks," *Applied Network Science*, volume 8, Article number 81, 2023.
9. A. Rezvanian, S. M. Vahidipour and M. R. Meybodi, "A new stochastic diffusion model for influence maximization in social networks," *Scientific Reports*, volume 13, Article number 6122, 2023.
10. M. D. Khomami, A. Rezvanian, M. R. Meybodi, A. Bagheri, "CFIN: A community-based algorithm for finding influential nodes in complex social networks." *The Journal of Supercomputing* (Springer), 77, 2207-2236, 2021.

کتاب

1. J. Kazemi Kordestani, M. Rezapoor Mirsaleh, A. Rezvanian, M. R. Meybodi, Advances in Learning Automata and Intelligent Optimization, Springer, ISBN: 978-3-030-76290-2, 2021 .
2. R. Vafashoar, H. Morshedlou, A. Rezvanian, M.R. Meybodi, Cellular Learning Automata: Theory and Applications, Springer, ISBN: 978-3-030-53140-9, 2021.
3. A. Rezvanian, B. Moradabadi, M. Ghavipour, M. M. Daliri Khomami, M. R. Meybodi, Learning Automata Approach for Social Networks, Springer, ISBN: 978-3-030-10766-6, 2019.
4. A. Rezvanian, A. M. Saghiri, S. M. Vahidipour, M. Esnaashari, M. R. Meybodi, Recent Advances in Learning Automata, Springer, ISBN: 978-3319724270, 2018.

سخنرانی و کارگاه آموزشی

۱. سخنرانی با موضوع "انواع روش‌های نمونه‌برداری برای تحلیل شبکه‌های اجتماعی" دانشگاه علم و فرهنگ، ۳۰ آذر ۱۴۰۱.
۲. سخنرانی با موضوع "اتوماتای یادگیر در هوش مصنوعی" دانشگاه علم و فرهنگ، ۲۲ آذر ۱۴۰۰.
۳. سخنرانی با موضوع "پژوهش‌های هوش مصنوعی در صنعت و دانشگاه: ایران و جهان" دانشگاه علم و فرهنگ، ۲۰ آذر ۱۴۰۰.
۴. سخنرانی با موضوع "شبکه‌های اجتماعی تخصص محور"، موسسه آموزش عالی ارشاد دماوند، ۲۱ آبان ۱۳۹۹.
۵. برگزاری کارگاه آموزشی با موضوع "معرفی داده کاوی و کاربردهای آن"، پژوهشگاه علوم و فناوری اطلاعات ایران (ایرانداک)، ۲۱ بهمن ۱۳۹۸.

۴- بیان مسئله:

رشد روزافزون شبکه‌های اجتماعی برخط، توجه محققان را به پیش‌بینی پیوند جلب کرده است و در بسیاری از زمینه‌ها از جمله علوم کامپیوتر، علم اطلاعات و انسان‌شناسی مورد استفاده قرار گرفته است. شبکه‌های پیچیده ممکن است پدیده‌های طبیعی متعددی مانند شبکه‌های بیولوژیکی و شبکه‌های مغزی و همچنین پدیده‌هایی که توسط انسان در دوران فناوری ایجاد شده‌اند، مانند شبکه‌های اجتماعی و حمل‌ونقل را توضیح دهند [۱]. به‌طور مثال شبکه اجتماعی فیس‌بوک واقعیت جوامع انسانی را منعکس می‌کند و شامل مجموعه‌ای از کاربران اجتماعی و روابط بین آن‌ها است.

شبکه اجتماعی را می‌توان به‌عنوان یک گراف نمایش داد که گره‌ها کاربران و یال‌ها پیوندهای بین آن‌ها را نشان می‌دهد. معمولاً روابط بین افراد به دلیل تمایلات مشترک آن‌ها برقرار می‌شود. پدیده‌ای که بسیاری از محققان را در زمینه‌های مختلف به تحلیل ویژگی‌های آن‌ها واداشته است [۷]. در شبکه‌های پیچیده، چالش اصلی، پیش‌بینی پیوند است. پیش‌بینی پیوند یک کار حیاتی در تحلیل شبکه پیچیده است و درواقع از داده‌های گذشته برای پیش‌بینی ساختار آینده یک شبکه پیچیده، استفاده می‌کنند. می‌توان از پیش‌بینی پیوند در تشخیص ایمیل‌های هرزنامه، پیش‌بینی تعامل پروتئین-پروتئین [۲]، پیش‌بینی بیماری، سیستم‌های توصیه استفاده نمود [1].

رویکردهای اصلی پیش‌بینی پیوند به سه دسته تقسیم می‌شوند: ۱- پیش‌بینی پیوند مبتنی بر شباهت ۲- پیش‌بینی پیوند مبتنی بر مدل ۳- استفاده از تکنیک‌های جاسازی [۸]. هدف روش سوم ترسیم شبکه به فضای جاسازی با ابعاد کم است، به‌طوری‌که حداکثر ویژگی‌های اصلی آن حفظ می‌شود؛ بنابراین، گره‌های مشابه در نزدیکی یکدیگر در فضای جاسازی قرار دارند. تکنیک‌های جاسازی در مقایسه با دو روش دیگر مزایای زیادی دارند. به‌عنوان مثال، روش‌های قبلی از ماتریس مجاورت استفاده می‌کنند که دارای اشکالات زیادی مانند ایجاد ماتریس خلوت و حفظ تنها مجاورت مرتبه اول است. از سوی دیگر، تکنیک‌های جاسازی می‌توانند با کاهش ابعاد و حفظ مجاورت مرتبه بالاتر، این مسائل را به‌طور مؤثر برطرف کنند. رویکردهای ایجاد ماتریس جاسازی گراف شامل تجزیه ماتریسی، روش‌های مبتنی بر گام تصادفی و روش‌های مبتنی بر یادگیری عمیق است [۹، ۱۰].

تحقیقات زیادی برای استفاده از رویکردهای جاسازی برای حل مشکل پیش‌بینی پیوند انجام شده است، اکثر آن‌ها فقط اطلاعات ساختاری گراف فعلی را در نظر می‌گیرند، درحالی‌که مجموعه‌ای غنی از اطلاعات ویژگی مربوط به گره‌ها را نادیده می‌گیرند. گره‌هایی که ویژگی‌های مشابهی دارند، احتمال بیشتری برای برقراری پیوند بین آن‌ها وجود دارد. همان‌طور که اطلاعات ساختاری در پیش‌بینی پیوند مهم است، استفاده از اطلاعات ویژگی‌ها، می‌تواند به افزایش دقت پیش‌بینی پیوند کمک کند. در نتیجه، ترکیب اطلاعات ساختاری و ویژگی‌ها می‌تواند به بهبود عملکرد روش‌های پیش‌بینی پیوند منجر شود.

بسیاری از پدیده‌ها در دنیای واقعی را می‌توان به‌صورت گراف نشان داد، به‌طوری‌که گره‌ها متناظر با موجودیت‌ها و یال‌ها متناظر با روابط بین موجودیت‌ها هستند. شبکه‌های عصبی گرافی (GNN) با بهره‌برداری از ساختار گراف و ویژگی‌های گره، به کارایی مناسبی در مسائل مختلف شبکه مانند طبقه‌بندی گره دست یافته‌اند. با این حال، روش‌های شبکه عصبی گرافی موجود در معرض سوگیری‌هایی در ساختار گراف هستند که از یال‌های گمشده یا نادرست ناشی می‌شوند. یکی از روش‌های متداول شبکه عصبی گرافی در طول آموزش و آزمایش برای تجمیع ویژگی‌ها، نمونه‌برداری از همسایگی محلی گره است. ساختار همسایگی ناقص یا همراه با نویز، می‌تواند باعث ایجاد سوگیری گردد. برای مثال، اگر دو گره ویژگی‌های مشابهی داشته باشند اما به دلیل از دست دادن یال‌ها، همسایگی‌های متفاوتی داشته باشند، آنگاه شبکه عصبی گرافی ممکن است آن‌ها را متفاوت طبقه‌بندی کند، حتی اگر متعلق به یک کلاس باشند. درواقع مسئله این است که روش‌های شبکه عصبی گرافی، در برابر سوگیری و نویز در ساختار گراف استحکام ندارند. آن‌ها بر نمونه‌برداری همسایگی از گراف مشاهده شده تکیه می‌کنند، که در صورت ناقص بودن گراف، می‌تواند خطا ایجاد کند. به منظور کاهش حساسیت و سوگیری‌های مرتبط با نویز در ساختار گراف یک رویکرد نمونه‌گیری همسایگی با استفاده از استدلال علی مدنظر است. بدین منظور لازم است که در حین آموزش و استنتاج نسبت به یال‌های گمشده یا نادرست استحکام داشته باشد.

۵- اهداف اصلی و فرعی طرح:

هدف اصلی

* بهبود در مدل‌های شبکه‌های عصبی گرافی

هدف فرعی

* حل مسئله طبقه‌بندی گره در شبکه

* حل مسئله پیش‌بینی پیوندی در شبکه

۶- پیشینه تحقیق در ایران و جهان:

روش‌های طبقه‌بندی گره‌ها را می‌توان به طور کلی بر اساس اصول زیربنایی آن‌ها به ۳ گروه طبقه‌بندی کرد. یک گروه شامل الگوریتم‌های یادگیری ماشین سنتی مانند درخت‌های تصمیم، k -نزدیک‌ترین همسایه و ماشین بردار پشتیبان (SVM)^۱ است. این روش‌ها برای طبقه‌بندی گره‌ها بر قوانین از پیش تعریف شده، فواصل یا ابرصفحه‌ها تکیه می‌کنند. گروه دوم شامل روش‌های یادگیری عمیق، به‌ویژه شبکه‌های عصبی است که از چندین لایه از گره‌های به هم پیوسته برای یادگیری الگوهای پیچیده و پیش‌بینی دقیق استفاده می‌کنند. همچنین روش‌های مبتنی بر گراف نیز در سال‌های اخیر موفقیت‌های مناسبی بدست آورده است، که در آن موجودیت‌ها به عنوان گره‌های گراف بازنمایی داده می‌شوند و برچسب‌های آن‌ها با بررسی ویژگی‌های ساختاری گراف تعیین می‌شوند. علاوه بر این، گروه سوم روش‌های ترکیبی با استفاده از چندین طبقه‌بندی‌کننده هستند که برای بهبود عملکرد طبقه‌بندی با استفاده از نقاط قوت هر طبقه‌بندی جداگانه ترکیب می‌کنند. این گروه از روش‌های طبقه‌بندی گره، رویکردها و تکنیک‌های مختلفی را برای پرداختن به وظیفه تخصیص برچسب‌ها به گره‌ها در طیف وسیعی از کاربردها ارائه می‌کنند. در ادامه برخی از روش‌های مبتنی بر شبکه عصبی گرافی برای حل مسئله طبقه‌بندی گره به طور مختصر ارائه شده است.

همیلتون و همکاران در [1] روشی برای یادگیری بازنمایی گره‌ها در گراف‌های بزرگ پیشنهاد کرده‌اند. محققان بر اهمیت بازنمایی گره‌ها در برنامه‌های مختلف مبتنی بر گراف، مانند تجزیه و تحلیل شبکه‌های اجتماعی و سیستم‌های توصیه‌ها تأکید دارند. آنها استدلال کرده‌اند که روش‌های موجود برای یادگیری بازنمایی بر روی گراف‌ها محدودیت‌هایی مانند انتقالی بودن (نیاز به دسترسی به کل گراف در طول آموزش) یا عدم مقیاس‌پذیری برای گراف‌های بزرگ داشته و برای پرداختن به این محدودیت‌ها، محققان، یک چارچوب یادگیری بازنمایی استقرایی مقیاس‌پذیر را به نام GraphSAGE^۲ پیشنهاد کرده‌اند. این چارچوب با استفاده از ایده تجمیع همسایگی با جمع‌آوری اطلاعات از همسایگی‌های محلی برای بدست آوردن بازنمایی گره‌ها طراحی شده است. این روش باعث شده که گره‌های دیده نشده در گراف‌های بزرگ بدون نیاز به دسترسی به کل گراف آموزش داده شوند. به طور کلی، این مقاله یک روش مقیاس‌پذیر برای

¹ Support Vector Machine

² Graph Sample Aggregation

یادگیری بازنمایی استقرایی در گراف‌های بزرگ ارائه کرده با این حال به دلیل اینکه شامل اجزای متعددی مانند استراتژی‌های مختلف نمونه‌گیری و توابع تجمیع است، باعث افزایش هزینه شده و همچنین درک آن ساده نیست.

در مقاله [2] روشی برای طبقه‌بندی گره نیمه نظارت شده در داده‌های گرافی معرفی شده است. روش پیشنهادی از شبکه‌های پیچشی گراف چند مقیاسی استفاده کرده است که هم اطلاعات محلی و هم سراسری را از گراف می‌گیرد. با ترکیب مقیاس‌های چندگانه، مدل به عملکرد بهبود یافته در وظایف طبقه‌بندی گره در مقایسه با روش‌های موجود دست یافته است. این مقاله نتایج تجربی را بر روی مجموعه‌های داده مختلف ارائه کرده، که اثربخشی و برتری رویکرد پیشنهادی در طبقه‌بندی گره نیمه نظارت شده را نشان داده و یک مدل با استفاده از شبکه‌های پیچشی گراف پیشنهاد کرده، که نمونه‌های متعددی از شبکه عصبی گرافی را از طریق جفت گره‌هایی که در فواصل مختلف در یک پیاده‌روی تصادفی یافت شده، آموزش داده است و ترکیب خروجی‌های نمونه برای بهبود عملکرد طبقه‌بندی GraphSAGE مورد آموزش قرار داده است. همچنین این مقاله فرض می‌کند که ساختار گراف از قبل شناخته شده است، که ممکن است همیشه در سناریوهای دنیای واقعی صادق نباشد.

در مرجع [3] رویکردی برای بهبود الگوریتم GraphSAGE با ترکیب یک استراتژی نمونه‌برداری گره مبتنی بر داده ارائه شده است. هدف روش پیشنهادی پرداختن به محدودیت‌های GraphSAGE، مانند هزینه‌های محاسباتی بالا و نمونه‌برداری همراه با سوگیری است. با استفاده از یک رویکرد مبتنی بر داده، مدل به صورت پویا احتمال نمونه‌برداری گره‌ها را بر اساس اهمیت و ارتباط آن‌ها با کار یادگیری تنظیم کرده است. ارزیابی‌های تجربی بر روی مجموعه‌های داده دنیای واقعی مختلف نشان داده است که رویکرد پیشنهادی از نظر کارایی محاسباتی و دقت پیش‌بینی بهتر از الگوریتم GraphSAGE اصلی است. این پژوهش با وجود بهبودهایی که حاصل کرده اما سازوکاری جهت بررسی اطلاعات مخدوش شده و راهی برای افزایش استحکام در نظر نگرفته است.

محققان در [4] یک رویکرد به نام شبکه‌های پیچشی گراف خاص (AS-GCN)^۳ برای طبقه‌بندی احساسات مبتنی بر جنبه که با استفاده از بافت و عبارات جنبه‌ای جمله، یک گراف مخصوص جنبه می‌سازد که در آن گره‌ها کلمات و یال‌ها روابط بین کلمات هستند را پیشنهاد کردند. این پژوهش از شبکه پیچشی گراف (GCN)^۴ استفاده کرده تا با انتشار اطلاعات در طول گراف، بازنمایی‌های کلمه‌ای آگاه از جنبه را بیاموزد. همچنین از معماری حافظه طولانی کوتاه مدت (LSTM)^۵ دو جهت برای رمزگذاری زمینه و به دست آوردن بازنمایی نهایی استفاده کرده است. برای تمرکز بر کلمات مهم برای هر جنبه از مکانیسم توجه استفاده شده است. برای پیش‌بینی قطبیت احساسات بازنمایی‌های گره به یک طبقه‌بندکننده جنبه خاص وارد شده‌اند. نتایج تجربی روی مجموعه داده‌های SemEval^۶ نشان داده است که چارچوب پیشنهادی با گرفتن مؤثر معناشناسی جنبه‌های خاص از طریق ساختار گراف و مکانیسم توجه، از روش‌های موجود بهتر عمل کرده است با این حال توانایی مدل کردن روابط بین جمله ای را نداشته و بررسی‌ها فقط روی جملات کوتاه انجام شده است.

در مقاله [5] استحکام شبکه‌های عصبی با کاوش در روابط علی بین داده‌های ورودی، بازنمایی‌های مدل و پیش‌بینی‌ها بررسی شده است. محققان بیان کرده‌اند که درک مکانیسم‌های علی و معلولی در پشت رفتار شبکه عصبی برای بهبود استحکام آن‌ها بسیار مهم است و نشان دادند که دستکاری عوامل علی، مانند ویژگی‌های ورودی، تأثیر قابل توجهی بر استحکام شبکه‌های عصبی دارد. همچنین یک چارچوب گراف علی برای مدل‌سازی روابط بین ورودی‌ها، بازنمایی‌ها و پیش‌بینی‌ها پیشنهاد شده که بینش‌هایی را در مورد

³ Aspect specific Graph Convolutional Network

⁴ Graph Convolutional Network (GCN)

⁵ Long short-term memory (LSTM)

⁶ Semantic Evaluation

آسیب‌پذیری‌ها و محدودیت‌های شبکه‌های عصبی ارائه داده است. به طور کلی، این مقاله اهمیت در نظر گرفتن علت در تحلیل و طراحی شبکه عصبی را بررسی کرده است. با این حال، بر جنبه‌های نظری تمرکز دارد و دستکاری‌های هرکلاس به طور جداگانه را در نظر نگرفته است.

محققان مقاله [6] چارچوبی به نام راه‌اندازی علی را پیشنهاد داده‌اند که هدف آن یادگیری روابط علی از داده‌های مشاهده‌ای با استفاده از یک رویکرد خود نظارتی است. ایده کلیدی شروع مجموعه کوچکی از روابط علی شناخته شده یا فرضی برای استنتاج روابط علی اضافی از داده‌ها در یک فرآیند راه‌اندازی تکراری است. هر تکرار شامل استفاده از آزمون‌های استقلال شرطی و سایر الگوریتم‌های کشف علی بر روی داده‌های مشاهده‌ای است که توسط مجموعه فعلی روابط علی استنباط شده هدایت شده است. اگر با داده‌ها و روابط موجود سازگار باشد، روابط علی به عنوان نامزد جدید اضافه می‌شود. این فرآیند برای گسترش تدریجی گراف علی آموزش داده شده و بدون نیاز به داده‌های برجسب دار اضافی یا دانش دامنه تکرار گردیده است. این مقاله نشان داده است که چگونه راه‌اندازی علی را می‌توان با استفاده از الگوریتم‌های مختلف کشف علی و آزمون‌های استقلال شرطی پیاده‌سازی کرد. با این حال، معایب استنتاج علی، از جمله چالش‌های ایجاد علت در سیستم‌های پیچیده و پتانسیل سوگیری‌ها و متغیرهای مخدوش‌کننده نیز همچنان وجود دارد.

پژوهش [7] روش یادگیری نیمه نظارتی به نام پیاده‌روی توجه بازگشتی (RAW)⁷ که از ساختار داده‌های گراف برای انجام انتشار برجسب استفاده شده پیشنهاد داده است. این روش از یک شبکه عصبی بازگشتی (RNN)⁸ مبتنی بر توجه، برای انجام پیاده‌روی‌های تصادفی روی گراف استفاده کرده و در هر مرحله اطلاعات همسایگی را با استفاده از مکانیزم توجه آموخته و جمع‌آوری کرده و برای یادگیری بازنمایی شباهت بین گره‌ها از داده‌های برجسب دار و بدون برجسب استفاده کرده است. در طول استنتاج، چندین پیاده‌روی تصادفی را با شروع از یک گره هدف انجام داده و بازنمایی گره‌های بازدید شده با استفاده از وزن توجه تجمیع شده و در نهایت گره هدف را برای طبقه‌بندی استفاده کرده است. نتایج آزمایش‌ها روی شبکه‌های استناد معیار و مجموعه داده‌های تصویر نشان داده که این روش در مقایسه با روش‌های یادگیری نیمه‌نظارت شده قبل، به پیشرفت‌های قابل توجهی در دقت طبقه‌بندی دست یافته اما به دلیل وابستگی محتوای داده ورودی به ساختار گراف امکان آسیب به عملکرد توسط یال‌های از دست رفته وجود دارد.

پژوهش [8] یک رویکرد شبکه عصبی گرافی به نام شبکه عصبی گرافی سند (DocGNN)⁹ را برای طبقه‌بندی متن استقرایی گراف مخصوص سند پیشنهاد داده است. در پیشنهاد هر جمله به عنوان یک گره بازنمایی شده و یال‌ها شباهت بین جملات را رمزگذاری کرده‌اند. از شبکه پیچشی گراف برای یادگیری تعبیه گره‌ها با انتشار اطلاعات در طول گراف و از بازخوانی در سطح گراف برای به دست آوردن بازنمایی سند با طول ثابت استفاده شده است. در طول استنتاج اسناد جدید، این رویکرد بدون دسترسی به برجسب‌ها گراف‌ها را ساخته است. نتایج آزمایش‌ها روی مجموعه داده‌های معیار نشان داد که رویکرد پیشنهادی به دستاوردهای قابل توجهی نسبت به خطوط پایه برای طبقه‌بندی استقرایی دست یافته است اما لزوم تعریف روابط بین جملات از چالش‌های این تحقیق است.

مقاله [9] رویکرد آموزش کمکی را برای بهبود عملکرد شبکه عصبی گرافی در وظایف طبقه‌بندی گره پیشنهاد کرده است. آموزش کمکی باعث شده است که شبکه عصبی گرافی با استفاده از داده‌های بدون برجسب اضافی، بازنمایی گره‌های گویاتری را بیاموزد. محققان از طریق آزمایش‌های گسترده بر روی مجموعه داده‌های معیار مختلف، نشان دادند که روش پیشنهادی به طور قابل توجهی از

⁷ Recurrent Attention Walk

⁸ Recurrent neural network

⁹ Document Graph Neural Network

تکنیک‌های موجود از نظر دقت طبقه‌بندی، بهتر عمل کرده است. علیرغم آنکه هدف از این پژوهش این بوده که با آموزش کمکی به طور موثری توانایی شبکه عصبی گرافی را برای گرفتن ساختار زیر گراف افزایش دهد و قابلیت‌های تعمیم آن را بهبود بخشد. با این حال، محدودیت‌های بالقوه شامل نیاز به مقدار زیادی داده بدون برچسب برای دستیابی به پیشرفت‌های قابل توجه و امکان افزایش پیچیدگی محاسباتی وجود دارد، به همین دلیل تحقیقات بیشتری برای کشف مقیاس پذیری و کاربرد روش پیشنهادی در سناریوهای دنیای واقعی مورد نیاز است.

پژوهش انجام شده در [10] یک معماری شبکه عصبی گرافی به نام Graph-MLP^{۱۰} پیشنهاد شده که طبقه‌بندی گره‌ها را بدون ارسال صریح پیام‌ها بین گره‌ها انجام می‌دهد. برخلاف شبکه‌های عصبی گرافی معمول که بازنمایی گره‌ها را با تجمیع ویژگی‌های همسایگان را به طور مکرر به روز می‌کنند، در این پژوهش از یک پرسپترون چندلایه برای یادگیری مستقیم بازنمایی گره‌ها برای در نظر گرفتن الحاق ویژگی‌های یک گره و ویژگی‌های گره‌ها در مجاورت با پرس ثابت استفاده شده است. برای محاسبه تابع هزینه تابعی به نام تفاوت همسایه^{۱۱} طراحی شده است تا با استفاده از اطلاعات مجاورت به طور ضمنی، شکاف بین شبکه‌های عصبی گرافی و پرسپترون‌های چند لایه اصلاح شود. این روش ساختارهای گراف محلی را بدون ارسال پیام تکراری ذخیره کرده است. آزمایش‌ها بر روی شبکه‌های استنادی معیار و گراف‌های دانش نشان داده‌اند که عملکرد قابل مقایسه یا بهتری نسبت به شبکه‌های عصبی گرافی معمول دارد، در حالی که به طور قابل توجهی از نظر محاسباتی کارآمد است، اما به دلیل اینکه فقط همسایگی مرتبه اول را در نظر گرفته ممکن است در گراف‌های بزرگ که در آن مفروضات محلی شکسته می‌شود، مشکل داشته باشد.

در ادامه در جدول ۱ خلاصه‌ای از مطالعات انجام شده در رابطه با طبقه‌بندی گره با استفاده از تکنیک‌های یادگیری عمیق گرافی ارائه شده است.

جدول ۱. مقایسه کارهای پیشین در حوزه طبقه‌بندی گره در گراف

مرجع	سال	روش	مجموعه دادگان	مزایا/معایب روش
[1]	۲۰۱۷	بدست آوردن تعبیه گره با رویکرد استقرایی توسط الگوریتم (GraphSAGE)	Citation Reddit, PPI ^{۱۲}	مزایا • تعبیه گره برای داده‌های دیده نشده • بهبود عملکرد شبکه پیچشی گراف معایب • عدم توانایی نمونه برداری از همسایگی غیر یکنواخت • فقدان پیاده سازی بر روی گراف جهت دار
[2]	۲۰۱۸	طبقه بندی گره با اجرای مدل‌های گراف پیچشی دلخواه روی خروجی پیاده‌روی‌های	Pubmed, Citeseer, Cora PPI	مزایا • عملکرد بهتر در چندین مجموعه داده معیار • بازنمایی بهتر داده‌های محلی و سراسری

¹⁰ Graph Muti Layer Perceptron

¹¹ neighboring contrastive (NCcontrast)

¹² Protein-Protein Interactions

معایب		تصادفی (N-GCN)		
• مغایرت دنیای واقعی با ساختار گراف از قبل شناخته شده • عدم بررسی مدل بر مجموعه داده‌های بزرگ				
مزایا	PPI,Reddit pubmed	نمونه‌برداری مبتنی بر داده با هدف کاهش واریانس بالا که ناشی از نمونه‌برداری تصادفی بی طرفانه با الگوریتم AdvanceGraphSAGE	۲۰۱۹	[3]
• ارتباط مستقیم بین گره‌های نمونه و گره‌های تجمیع شده • تعمیم به گره‌های دیده نشده معایب • در نظر گرفتن ارتباط گره نمونه و برچسب آن • مخدوش شدن نتیجه با مخدوش شدن اطلاعات گره				
مزایا	SemEva	یک رویکرد شبکه پیچشی گراف ویژه جنبه، برای طبقه‌بندی احساسات مبتنی بر جنبه (AS-GCN)	۲۰۱۹	[4]
• مدل سازی وابستگی بین جنبه‌ها و کلمات متن با ساختن یک گراف خاص برای هر جمله • ارائه توضیحی از پیش بینی‌های مدل از طریق توجه به جنبه‌های مهم و کلمات زمینه معایب • پیچیده تر از مدل‌های متوالی و مبتنی بر توجه • گزارش نتایج فقط برای جملات کوتاه • عدم توانایی مدل کردن روابط بین جمله ای				
مزایا	^{۱۴} MNIST	استحکام شبکه‌های عصبی در برابر اختلالات ورودی به کمک استدلال علی با طراحی یک مدل تقویت شده توسط دستکاری علی تقویت شده ^{۱۳} (CAMA)	۲۰۲۰	[5]
• سازگار با دستکاری‌های غیرقابل مشاهده در زمان آزمایش • رفع مشکل استحکام در شبکه‌های عصبی عمیق معایب • عدم توانایی حذف اختلالاتی که از حملات خصمانه مبتنی بر گرادیان • در نظر نگرفتن دستکاری‌های هر کلاس به طور جداگانه • عدم سازگاری با آشفتگی‌ها به طور پیوسته				
مزایا	داده‌های صوتی به مارکینسون ^{۱۵} و	مدل گراف علی اولیه با استفاده از اصلاح تنایج زیرگراف به طور مکرر تا زمانی که گراف با	۲۰۲۰	[6]

¹³ causal manipulation augmented

¹⁴ Modified National Institute of Standards and Technology

¹⁵ Parkinson's voice data

• کمک به حذف خطاها و عدم قطعیت‌ها از طریق اصلاح زیرگراف معایب • در نظر نگرفتن دستکاری‌های هر کلاس به طور جداگانه • عدم سازگاری با آشفتگی‌ها به طور پیوسته	MNIST	اطمینان بالا راه‌اندازی شود (causal bootstrapping)		
مزایا • کمک به طبقه‌بندی با برچسب محدود با استفاده از ساختار گراف برای انتشار برچسب • تمرکز روی همسایگی با اطلاعات همسایگی بیشتر • امکان آموزش روی داده‌های برچسب دار و بدون برچسب معایب • وابستگی ورودی به ساختار گراف • امکان آسیب به عملکرد توسط یال‌های از دست رفته • افزایش پیچیدگی زمانی در آموزش مدل • بدست آمدن نتایج متفاوت به دلیل استفاده از پیاده‌روی تصادفی	CoraL1 CoraIDA DBLP DELVE	استفاده از ساختار گراف داده‌ها برای انتشار برچسب با رویکرد پیاده‌روی توجه مکرر (RAW)	۲۰۲۰	[7]
مزایا • تعامل بین بخش‌های مختلف متن برخلاف مدل کیسه کلمات • امکان تعمیم به داده‌های دیده نشده معایب • وابستگی عملکرد به کیفیت ساخت گراف • نیاز به تعریف روابط بین جملات	Ohsumed و MR ^{۱۶}	ساخت گراف مخصوص سند که در آن هر جمله تبدیل به یک گره و رمزگذاری شباهت بین جملات با یال‌ها (DocGNN)	۲۰۲۰	[8]
مزایا • بازنمایی گویا تر گره‌ها با استفاده از داده‌های بدون برچسب • به تصویر کشیدن ساختار زیر گراف با آموزش کمکی • بهبود قابلیت تعمیم زیر گراف معایب • نیاز به مقدار بسیار زیادی داده بدون برچسب • افزایش پیچیدگی محاسباتی	Pubmed, Cora و Citeseer	تقویت شبکه‌های عصبی گرافی از طریق آموزش کمکی برای طبقه‌بندی گره (EGNN) ^{۱۷}	۲۰۲۱	[9]

¹⁶ Movie Reviews

¹⁷ Enhance the Graph Neural Networks

[10]	۲۰۲۱	طبقه‌بندی گره با استفاده از پرسپترون چند لایه بدون بدون ارسال پیام در گراف با الگوریتم (GraphMLP)	Pubmed, Cora و CiteSeer	مزایا • ساختار ساده • دقت خوب بدون هدایت پیام • آموزش بازنمایی‌ها بر اساس ویژگی‌های گره و ساختار • گراف محلی بدون بروزرسانی‌های تکراری • نیاز به نمونه‌های کم برای آموزش نسبت به شبکه عصبی معایب • عدم توانایی تعمیم به گراف‌های بزرگ
------	------	---	-------------------------	---

۷- زمینه‌های استفاده و کاربرد نتایج (تولید دانش فنی، تولید نمونه محصول، ارائه خدمات):

انتشار مقاله در نشریات معتبر

۸- روش انجام تحقیق:

گام اول، مطالعه منابع مرتبط با شبکه های عصبی گرافی و حل مسائل مرتبط با طبقه بندی گره و پیشبینی پیوندی درگراف به منظور قرار دادن تحقیقات خود به طور گسترده تر دانش موجود، کاری که در این گام انجام می شود به شناسایی و بررسی مطالعات قبلی که روش های طبقه بندی مبتنی بر گراف، تکنیک های نمونه گیری علی و سایر موضوعات مرتبط پرداخت خواهد شد. با بررسی آثار مرتبط، می توان تکنیک های پیشرفته فعلی را درک کرد و تعیین کرد که روش پیشنهادی چگونه به مجموعه دانش موجود کمک خواهد کرد.

گام دوم، جمع آوری و پیش پردازش داده های مرتبط با مسئله گراف که در این تحقیق، از مجموعه داده های استاندارد [11]CORA، [11]PubMed و [12]Citeseer پیشنهاد شده است. این مجموعه داده ها در حوزه انتشارات علمی و شبکه های استنادی هستند و هر مقاله منتشر شده با فرهنگ لغت منحصر به فرد مورد بررسی قرار می گیرد و یال وزن دار ۰ یا ۱ یا وزن براساس TF/IDF بین هر مقاله و کلمه فرهنگ لغت ایجاد شده است. به دلیل اینکه در اکثر پژوهش های پیشین هم از این مجموعه داده ها استفاده شده است می توان گفت که با اهداف پژوهشی حوزه طبقه بندی گره همسو هستند و امکان ارزیابی روش پیشنهادی را فراهم خواهند کرد. پس از جمع آوری داده ها، برای اطمینان از کیفیت و مناسب بودن آن برای بررسی، باید پیش پردازش شوند. این شامل پاکسازی داده ها با حذف اطلاعات نامربوط و نویز، مدیریت مقادیر از دست رفته و نرمال سازی داده ها برای اطمینان از سازگاری است. علاوه بر این، ممکن است نیاز باشد که داده ها به یک قالب مناسب برای بررسی توسط گراف تبدیل یا کدگذاری شوند. به طور کلی، جمع آوری داده ها و پیش پردازش گام های مهمی هستند که پایه و اساس بررسی و طبقه بندی دقیق و قابل اعتماد را در این تحقیق را فراهم خواهند کرد.

گام سوم، طراحی مدلی جهت بهبود مدل پایه شبکه عصبی گرافی که شامل ساخت یک بازنمایی گراف است که در آن گره ها نمونه ها را نشان می دهند و یال ها نشان دهنده روابط هستند. سپس در نمونه گیری علی برای انتخاب نمونه های اطلاعاتی بر اساس تأثیر علی آنها بر متغیر هدف اعمال می شود. الگوریتم پیشنهادی در قالب یک شبکه کانولوشن گراف (GCN) را برای یادگیری تعبیه گره با جمع آوری اطلاعات از گره های همسایه با بیشترین وزن را جایگزین نمونه گیری تصادفی می کند، یک لایه طبقه بندی برای پیش بینی برچسب های کلاس با استفاده از تعبیه گره آموخته شده یکپارچه شده می شود و مدل با بهینه سازی پارامترهای GCN و لایه طبقه بندی با یک تابع هزینه مناسب آموزش داده خواهد شد.

گام چهارم، ارزیابی با استفاده از طراحی آزمایش های مختلف که کارایی را براساس معیارهای صحت، زمان اجرا و F-score بدست می آورد، که برای دقت از فرمول ۱ استفاده شده است. در این فرمول TP تعداد نمونه هایی که در آن گره ها در یک طبقه بندی مثبت در نظر گرفته شده و برچسب آن ها به درستی پیش بینی شده است و متعلق به همان کلاس است TN. تعداد نمونه هایی که در آن گره ها که در یک طبقه بندی مثبت در نظر گرفته شده اند که در واقع برچسب آن ها اینگونه نیست، متعلق به این کلاس نیستند و مدل اشتباه طبقه بندی کرده است و به همین ترتیب FP و FN هم نشان دهنده متعلق بودن به کلاس منفی هستند که FP نشان دهنده طبقه بندی نمونه به درستی در کلاس منفی و FN هم نشان دهنده طبقه بندی اشتباه نمونه های گره در کلاس منفی است.

گام پنجم مستند سازی که نتایج مدل پیشنهادی با مدل‌های [13]GAT, [1]GraphSAGE, GCN و [3]RL-GraphSAGE مقایسه خواهد شد و در نهایت مقاله به نگارش درخواهد آمد.

۹- نوآوری:

بیشتر روش‌های قبلی برای حل مسائل طبقه بندی گره و پیش‌بینی پیوند که از شبکه عصبی گرافی استفاده می‌کنند، فقط اطلاعات ساختاری محلی گراف فعلی را در نظر می‌گیرند، در حالی که مجموعه‌ای غنی از اطلاعات ویژگی مربوط به گره‌ها در شعاع بیشتری از گراف را نادیده می‌گیرند. در این تحقیق به بررسی یک نسخه اصلاح شده از شبکه عصبی گرافی پرداخته شده که یک ماتریس انتقال جدید پیشنهاد شده است که با استفاده از ترکیب مقدار اندازه شباهت ساختاری و ویژگی‌های مهم هر گره، ماتریس انتقال محاسبه می‌شود.

۱۰- محدودیت‌های اجرای تحقیق:

چالش‌های محاسباتی و نیاز به GPU برای استخراج نتایج شبیه سازی

--

۱۱- ملاحظات اخلاقی (کد اخلاق در صورت لزوم):

ندارد

--

۱۲- فعالیت‌های طرح و زمانبندی طبق نمودار گانت

شماره مرحله / فعالیت	نام مرحله / فعالیت	مرحله / فعالیت پیش نیاز	درصد وزنی به کل پروژه	نام منابع مورد استفاده (نیروی انسانی ، مواد مصرفی و...)	مدت زمان اجرا (ماه)	نمودار زمان بندی (ماه)											
						۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰	۱۱	۱۲
۱	جمع آوری منابع و مطالعه پیشینه پژوهش				۱												
۲	آماده سازی داده های گرافیکی				۲												
۳	طراحی مدل بهبود یافته شبکه عصبی گرافیکی				۲												
۴	پیاده سازی، ارزیابی و طراحی آزمایش				۲												
۵	مستندسازی و نگارش مقاله				۲												

۱۳- فهرست منابع و مآخذ مورد استفاده برای انجام طرح:

- [1] Li, X., Fan, Z., Huang, F., Hu, X., Deng, Y., Wang, L., & Zhao, X. (2024). Graph neural network with curriculum learning for imbalanced node classification. *Neurocomputing*, 574, 127229.
- [2] Liu, X., Li, X., Fiumara, G., & De Meo, P. (2023). Link prediction approach combined graph neural network with capsule network. *Expert Systems with Applications*, 212, 118737.
- [3] W. Hamilton, Z. Ying, and J. Leskovec, 'Inductive Representation Learning on Large Graphs', in *Advances in Neural Information Processing Systems*, Curran Associates, Inc., 2017.
- [4] Y. Wu, Y. Song, H. Huang, F. Ye, X. Xie, and H. Jin, 'Enhancing Graph Neural Networks via auxiliary training for semi-supervised node classification', *Knowledge-Based Systems*, vol. 220, p. 106884, 2021.
- [5] C. Zhang, K. Zhang, and Y. Li, 'A Causal View on Robustness of Neural Networks', *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 33, pp. 289–301, 2020, 2023.
- [6] Berahmand, K., Nasiri, E., Rostami, M., & Forouzandeh, S. (2021). A modified DeepWalk method for link prediction in attributed social network. *Computing*, 103, 2227-2249.
- [7] Nasiri, E., Berahmand, K., Rostami, M., & Dabiri, M. (2021). A novel link prediction algorithm for protein-protein interaction networks by attributed graph embedding. *Computers in Biology and Medicine*, 137, 104772.
- [8] Chaturvedi, I., Thapa, K., Cavallari, S., Cambria, E., & Welsch, R. E. (2021). Predicting video engagement using heterogeneous DeepWalk. *Neurocomputing*, 465, 228-237.
- [9] Gao, Y., Gong, M., Xie, Y., & Zhong, H. (2020). Community-oriented attributed network embedding. *Knowledge-Based Systems*, 193, 105418.
- [10] Wu, X., Pang, H., Fan, Y., Linghu, Y., & Luo, Y. (2021). ProbWalk: A random walk approach in weighted graph embedding. *Procedia Computer Science*, 183, 683-689.
- [11] Li, J., Wu, L., Hong, R., & Hou, J. (2021). Random walk based distributed representation learning and prediction on social networking services. *Information Sciences*, 549, 328-346.
- [12] Ghorbanzadeh, H., Sheikahmadi, A., Jalili, M., & Sulaimany, S. (2021). A hybrid method of link prediction in directed graphs. *Expert Systems with Applications*, 165, 113896.

- [13] Cai, L., Li, J., Wang, J., & Ji, S. (2021). Line graph neural networks for link prediction. *Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 44(49), 5103-5113.
- [14] Cai, H., Zheng, V. W., & Chang, K. C. C. (2018). A comprehensive survey of graph embedding: Problems, techniques, and applications. *IEEE transactions on knowledge and data engineering*, 30(39), 1616-1637.
- [15] Li, Z., Wang, X., Li, J., & Zhang, Q. (2021). Deep attributed network representation learning of complex coupling and interaction. *Knowledge-Based Systems*, 212, 106618.
- [16] Wang, X., Chai, Y., Li, H., & Wu, D. (2021). Link prediction in heterogeneous information networks: An improved deep graph convolution approach. *Decision Support Systems*, 141, 113448.
- [17] Liu, X., Li, X., Fiumara, G., & De Meo, P. (2023). Link prediction approach combined graph neural network with capsule network. *Expert Systems with Applications*, 212, 118737.
- [18] Zhang, P., Chen, J., Che, C., Zhang, L., Jin, B., & Zhu, Y. (2023). IEA-GNN: Anchor-aware graph neural network fused with information entropy for node classification and link prediction. *Information Sciences*, 634, 665-676.
- [19] Li, Y., Jian, C., Zang, G., Song, C., & Yuan, X. (2024). Node classification oriented Adaptive Multichannel Heterogeneous Graph Neural Network. *Knowledge-Based Systems*, 292, 111618.