

ویژگی‌های گراف در یادگیری عمیق

سجاد سبزی
محمدرضا احمدی تشنیزی

۲۷ آذر ۱۴۰۲

مقدمه

ویژگی‌های گراف در یادگیری عمیق، به ویژه در زمینه شبکه‌های عصبی گراف (GNNs)، نقش مهمی در پردازش و تفسیر داده‌های ساختاریافته به شکل گراف‌ها ایفا می‌کنند. گراف‌ها، که شامل گره‌ها و یال‌ها هستند، در زمینه‌های مختلفی مانند شبکه‌های اجتماعی، زیست‌شناسی مولکولی و شبکه‌های کامپیوتری، که داده‌ها به طور بنیادین به شکل یک ساختار شبکه‌ای هستند، ضروری می‌باشند.

استفاده از ویژگی‌های گراف در یادگیری عمیق

ویژگی‌های گراف در یادگیری عمیق عمدتاً از طریق شبکه‌های عصبی گراف (GNNs) مورد استفاده قرار می‌گیرند که مفهوم یادگیری عمیق را به داده‌های ساختار گرافی توسعه می‌دهند. GNN گراف‌ها را با بهره‌گیری از عملیات‌های سطح گره و سطح گراف پردازش می‌کنند. شبکه‌های عصبی بازگشتی (RNNs) در سطح گره، که نوعی از GNN هستند، اطلاعات ساختاری گراف را در هر گره کدگذاری می‌کنند. آن‌ها از یک تعریف بازگشتی پیروی می‌کنند، که در آن حالات گره‌ها در ارتباط با گره‌های همسایه تعریف می‌شوند. این روش اطلاعات اتصال و رابطه‌ای موجود در گراف‌ها را در بر می‌گیرد. از طرف دیگر، RNN‌های سطح گراف، برای ثبت الگوهای در سطح گراف مانند پویایی‌های زمانی در گراف‌های پویا یا ساختارهای سلسله مراتبی، از RNN استفاده می‌کنند. به عنوان مثال، در مسائل تولید گراف، معماری‌های RNN سلسله مراتبی در یادگیری از گراف‌های ورودی موثر بوده‌اند و انعطاف‌پذیری GNN را در برخورد با وظایف مرتبط با گراف نشان می‌دهند.

علاوه بر این، مفهوم جاسازی گره در نظریه گراف حیاتی است.

این شامل نگاشت گره‌ها به فضای جاسازی کم‌بعدی است تا اطمینان حاصل شود که گره‌های محله شبکه محلی یک گره جمع‌آوری می‌کند، محقق می‌شود. این رویکرد هم ساختار گراف و هم اطلاعات ویژگی گره‌ها را که سپس از طریق لایه‌ها در یک شبکه عصبی پردازش می‌شوند، در بر می‌گیرد.

چالش‌ها و محدودیت‌های ویژگی‌های گراف در یادگیری عمیق

با وجود پتانسیل‌های خود، ویژگی‌های گراف در یادگیری عمیق با چندین چالش و محدودیت روبرو هستند:

توپولوژی پیچیده و اندازه دلخواه

گراف‌ها اغلب توپولوژی‌های پیچیده‌ای بدون محلیت فضایی دارند و اندازه‌شان می‌تواند به شدت متغیر باشد. این پیچیدگی چالشی برای شبکه‌های عصبی کانولوشنال (CNNs) است که برای ساختارهای داده‌ای منظم و شبکه‌ای مانند تصاویر طراحی شده‌اند.

تغییرپذیری ترتیب گره‌ها

گراف‌ها نسبت به ترتیب گره‌ها بی‌تغییر هستند. این به این معنی است که ورودی به شبکه عصبی می‌تواند با ترتیب‌های مختلف گره‌ها به شدت تغییر کند، که حفظ یادگیری و تفسیر سازگار در بین نمایش‌های مختلف یک گراف را دشوار می‌سازد.

چالش‌های رمزگذاری و تجمیع

تابع رمزگذار در شبکه‌های عصبی گراف باید قادر به تجمیع مؤثر اطلاعات از همسایگان گره با در نظر گرفتن ساختار گراف باشد. این نیازمند توسعه الگوریتم‌های پیچیده‌ای است که بتوانند با طبیعت تغییرناپذیر جایگشتی داده‌های گراف برخورد کنند.

دشواری‌های آموزش و بهینه‌سازی

آموزش شبکه‌های عصبی گراف می‌تواند به دلیل نیاز به تعادل بین نمایش ساختارهای محله محلی با ویژگی‌های جهانی گراف، چالش‌برانگیز باشد. علاوه بر این، بهینه‌سازی این شبکه‌ها اغلب نیازمند روش‌های نوآورانه‌ای برای مقابله با ویژگی‌های منحصر به فرد داده‌های گرافی هستند.

نتیجه‌گیری

ویژگی‌های گراف در یادگیری عمیق، به‌ویژه از طریق GNNها و عده‌های قابل توجهی برای مقابله با پیچیدگی‌های داده‌های ساختار گرافی نشان داده‌اند. آن‌ها ابزار قدرتمندی برای ثبت هم ساختار و هم اطلاعات ویژگی موجود در گراف‌ها ارائه می‌دهند. با این حال، چالش‌های مرتبط با توپولوژی پیچیده آن‌ها، تغییرپذیری ترتیب گره‌ها و نیاز به روش‌های رمزگذاری و تجمیع مؤثر، موانع قابل توجهی ایجاد می‌کنند. غلبه بر این چالش‌ها نیازمند تحقیق و توسعه مداوم مدل‌ها و الگوریتم‌های پیچیده‌تر است.

منابع

۱. یادگیری عمیق در گراف: یک مرور. <https://arxiv.org/abs/1812.04202>
۲. شبکه‌های عصبی گراف و کاربردهای آنها. <https://neptune.ai/blog/graph-neural-network-and-some-of-gnn-applications>