**G-NN Literatür Taraması**

**1- GPT-GNN Generative Pre-Training of Graph Neural Networks**

Bu çalışmada, üretken bir model olan GPT-GNN geliştirilmiştir. Sırasıyla öznitelik üretimi ve kenar üretimi aşamaları uygulanmıştır. Çeşitli ön işlem aşamalarının sonrasında maskelenmiş kenarlar oluşturulmuştur. GPT-GNN, her bir düğümün öznitelik ve kenar üretim kayıplarını aynı anda hesaplayabilmekte ve böylece GNN'yi graf için yalnızca bir kez çalıştırması gerekmektedir. Ayrıca GPT-GNN, alt grafik örnekleme ile büyük ölçekli grafları işleyebilmekte ve negatif örneklemin getirdiği hatalı kaybı azaltabilmektedir. Deneysel sonuçlarda OAG ve Amazon olmak üzere iki farklı veri kümesinde sırasıyla %13,3 ve %5,7 kazanımlar elde edilmiştir.

**2- Extending the Nested Model for User-Centric XAI: A Design Study on GNN-based Drug Repurposing**

Bu makale, ilaç repurposing alan uzmanları için özel olarak tasarlanmış açıklanabilir AI (XAI) araçları tasarlamaya odaklanmaktadır. Çalışma, kullanıcı uzmanlığı, açıklama ayrıntı düzeyi ve görsel etkileşim gibi XAI tasarım hususlarını entegre etmektedir. Tasarım sürecinin kullanıcı ihtiyaçlarıyla uyumlu olmasını sağlamak için iç içe tasarım modelini kullanmaktadır. DrugExplorer, MetaMatrix aracılığıyla açıklamaları görselleştirerek kullanıcıların açıklayıcı yolları keşfetmesini ve karşılaştırmasını sağlar. Eğitim verileri 10 farklı varlık türünden oluşmakta olup 32 anlamsal olarak farklı ilişki türü varlıklar arasında (örneğin, ilaç-hastalık endikasyonları, protein-protein etkileşimleri, ilaç-protein etkileşimleri) etkileşimler mevcuttur.

**3- Unleashing the power of SDN and GNN for network anomalydetection: State-of-the-art, challenges, and future directions**

Bu çalışmada, ağ anomalisi tespiti için SDN ve GNN'nin birleştirilmesi uygulanmıştır. Ayrıca hibrit modellerin başarımları ile karşılaştırmalı analizleri sunulmuştur. SDN tabanlı çerçeve temel olarak uygulama düzlemi, kontrol düzlemi ve veri düzlemi olmak üzere üç düzlemden oluşmaktadır. Uygulama düzlemi, altta yatan katmanla etkileşim kurma, ağ davranışını yönetme, kontrol etme ve değiştirme olanağı sağlamaktadır. Kontrol düzlemi, veri paketlerinin ağ üzerinden yönlendirilmesine karar veren bir beyin görevi görürken, veri düzlemi paketlerin yönlendirilmesinden sorumludur. Sonuçlar, SDN tabanlı yaklaşımın saldırıları %97'lik bir doğrulukla tespit etmede etkili olduğu gözlemlenmiştir.

**4- GPT-GNN: Generative Pre-Training of Graph Neural Networks**

Bu makalede, GPT-GNN modeli sunulmuştur. GPT-GNN, bir grafın yapısal ve anlamsal özelliklerini yakalayabilmesi için bir GNN'yi önceden eğitmek üzere kendi kendine denetlenen bir graf oluşturmaktadır. Graf oluşturma öznitelik oluşturma ve kenar oluşturma olmak üzere iki bileşene ayrılır: Her ikisini de modelleyerek bileşenleri arasındaki doğal bağımlılığı yakalar. GPT-GNN'nin ön eğitim olmaksızın en gelişmiş GNN modellerinden %9,1'e varan oranda daha iyi performans verdiği görülmüştür.

**5- QA-GNN: Reasoning with Language Models and Knowledge Graphs for Question Answering**

Bu çalışmada, yeni bir model olan QA-GNN önerilmiştir. KG (Knowledge graphs) düğümlerinin verilen KG bağlamına göre önemini tahmin etmek için LM'ler kullanılmıştır. İlgililik puanlaması ve KG bağlamını ve KG'yi ortak bir çizge oluşturmak için bağlanmakta ve temsillerini çizge sinir ağları aracılığıyla karşılıklı olarak güncellenmektedir. Model, CommonsenseQA, OpenBookQA ve biyomedikal (MedQA-USMLE) alanlarındaki KG ölçütleri üzerinde değerlendirilmiştir. QA-GNN, mevcut LM ve LM+KG modellerinden daha iyi performans göstermiştir. Sorulardaki olumsuzlukları doğru bir şekilde ele alma yetenekleri gösterilmiştir.

**6- DeepRank-GNN: a graph neural network framework to learn patterns in protein–protein interfaces**

Bu çalışmada, protein–protein arayüzlerindeki (PPI) etkileşim desenlerini öğrenmek için geliştirilmiş bir GNN framework'ü sunulmuştur. BM5 veri seti üzerinde yapılan 10 katlı çapraz doğrulama sonucunda ortalama bir AUC değeri olarak 0.95 elde etmiştir. Test setinde en iyi performans fold 6 modeli ile yakalanmıştır. Hız ve depolama verimliliği, model başına 0.65 saniye ile 20 kat daha hızlı veri üretimi sağlamaktadır. Ayrıca, veri başına 22 kat daha az depolama alanı kullanmaktadır. Sonuçlar DeepRank-GNN, hem hız hem de doğruluk açısından mevcut yöntemlere göre önemli ölçüde üstünlük sağlamaktadır. %82 doğruluk oranı ile biyolojik ve kristal arayüzlerin sınıflandırılmasında oldukça başarılı bir performans göstermiştir.

**7- FP-GNN: a versatile deep learning architecture for enhanced molecular property prediction**

Bu çalışmada, moleküler özellik tahmini için FP-GNN (Fingerprints and Graph Neural Networks) adında yeni bir derin öğrenme mimarisini sunulmuştur. FP-GNN, moleküler grafikleri ve moleküler parmak izlerini birleştirerek geniş bir yelpazede moleküler özellikleri tahmin etme performansını artırmaktadır. Bulgular: Benchmark Veri Setleri Performansı: FP-GNN, 13 yaygın kamu veri setinde başarılı performanslar göstermiştir. FreeSolv veri setinde FP-GNN, RMSE=0.905 ile en iyi sonucu elde etmiştir. LIT-PCBA veri setinde FP-GNN, ortalama AUC değeri 0.739 ile diğer makine öğrenimi ve derin öğrenme modellerini geride bırakmıştır. Fenotipik tarama veri setinde FP-GNN, ortalama AUC değeri 0.849 ile başarılı sonuçlar üretmiştir. FP-GNN, hem küçük hem de büyük veri setlerinde moleküler özelliklerin tahmininde güçlü bir performans göstermiştir.

**8- GNN-based long and short term preference modeling for next-location prediction**

Bu makalede, uzun ve kısa vadeli tercihlerin dikkate alınarak bir sonraki ziyaret edilecek konumu tahmin etmeyi amaçlayan bir model (GLSP) sunulmaktadır. Modelde GNN ve LSTM kullanılmıştır. GLSP, kullanıcıların geçmiş konum tercihlerini grafik sinir ağları ile mekansal bağımlılıkları ortaya koyarak, LSTM ile de zamansal bağımlılıkları modelleyerek hem uzun hem de kısa vadeli tercihleri bir araya getirmektedir. Veri seti olarak NYC ve TKY veri setleri kullanılmıştır. GLSP modeli, diğer yöntemlere göre daha yüksek doğruluk oranları sağlamıştır.

**9- FAENet: Frame Averaging Equivariant GNN for Materials Modeling**

Bu çalışmada, FAENet adında bir GNN mimarisinin malzeme modellemesi için geliştirilmiştir. FAENet modeli OC20 veri setinde enerji tahmini ve kuvvet tahmininde yüksek başarı göstermiştir. Sonuçlar, FAENet'in 3B simetri dönüşümlerine uyumlu tahminler üretebildiğini ve hızlı hesaplama süresi ile geniş ölçekli malzeme modelleme uygulamalarına uygun olduğunu göstermektedir. Model, yüksek doğruluk ve işlem verimliliği sunarak özellikle enerji ve kuvvet tahmininde başarılı sonuçlar elde etmektedir.

**10- Identifying performance anomalies in fluctuating cloud environments: A robust correlative-GNN-based explainable approach**

Bu makale, bulut ortamlarında performans anomalilerini tespit etmek için derin öğrenme tabanlı yeni bir yöntem sunmaktadır. Önerilen CGNN-MHSA-AR modeli, özellikler ve zaman boyutlarındaki ilişkileri öğrenmek için iki paralel grafik sinir ağı kullanarak yanlış pozitifleri azaltmayı amaçlamaktadır. Ayrıca, bu model anomali tespiti için daha fazla bağlamsal bilgi yakalamak adına multi-head self-attention, GRU ve AR modelini bir araya getirmektedir. Makalede, CGNN-MHSA-AR modelinin yedi veri kümesinde diğer mevcut yöntemlerden üstün olduğu ve tespit edilen anomalilerin kök nedenlerini %74.1 doğruluk oranıyla tanımlayabildiği gösterilmiştir. CGNN-MHSA-AR modeli, yedi veri kümesinde ortalama 0.871 F1 puanı elde etmiş ve diğer yöntemlere kıyasla %19.9 daha iyi performans sergilemiştir.

**11- FROM STARS TO SUBGRAPHS: UPLIFTING ANY GNN WITH LOCAL STRUCTURE AWARENESS**

Bu çalışmada, GNN’lerin ifade gücünü artırmak amacıyla bir çerçeve önerilmiştir. Mevcut mesaj iletimi tabanlı sinir ağlarının (MPNN) yerel komşularından bilgi toplama sınırlamasını aşarak, düğüm temsilini yıldız yapısından daha genel alt grafiklere genişletilmiştir. GNN-AK (Graph Neural Network As Kernel) adı verilen bu yaklaşım, her düğümü çevresindeki bir alt grafiği kodlayarak daha zengin düğüm temsilleri oluşturuyor. Bu yapılandırma ile model, daha güçlü hale getirilmiştir. CIFAR10 ve PATTERN veri setleri: Sırasıyla %74.79 ve %86.887 doğruluk oranlarıyla diğer yöntemlerden daha başarılıdır.

**12- Extracting Low-/High- Frequency Knowledge from Graph Neural Networks and Injecting It into MLPs: An Effective GNN-to-MLP Distillation Framework**

Bu makale, grafik sinir ağları tarafından öğrenilen düşük ve yüksek frekans bilgilerini çok katmanlı algılayıcı ağlara (MLP) aktaran yenilikçi bir distilasyon çerçevesi olan FF-G2M'yi tanıtmaktadır. Mevcut GNN'den MLP'ye bilgi distilasyonunun yüksek frekanslı bilgilerin düşük frekanslı bilgiler tarafından baskılanması nedeniyle bilgi kaybına yol açabileceği belirtilmektedir. Bu sorunu çözmek için, FF-G2M hem düşük hem de yüksek frekans bileşenlerini ayırarak bilgiyi MLP'ye aktarmaktadır. Düşük Frekans Bilgi Distilasyonu (LLFD): GNN'lerin düşük frekanslı bilgisini kullanılarak, temel GLNN yöntemine kıyasla tüm veri kümelerinde sınıflandırma doğruluğunu artırılmıştır. Yüksek Frekans Bilgi Distilasyonu (LHFD): Düşük frekans kadar etkili olmasa da, MLP performansını iyileştirmiş olup düşük frekans ile birleştirildiğinde ek performans sağlamıştır. FF-G2M, üç farklı GNN mimarisine kıyasla ortalama %2,6 daha yüksek sınıflandırma doğruluğu sağlamıştır.

**13- Graph Neural Network (GNN) in Image and Video Understanding Using Deep Learning for Computer Vision Applications**

Bu çalışmada, görüntü ve video anlamlandırmada GNN’lerin kullanımı ele alınmaktadır. Sıfır-atış (zero-shot) öğrenme için GNN kullanılarak, sınıflandırmada semantik bilgiler grafik yapısında kullanılarak geliştirilmiştir. HOI tanıma standartlarında (V-COCO, HICO-DET gibi) test edilerek daha yüksek doğruluk sağlanmıştır. GNN, aktörler ve nesneler arası etkileşimleri zaman-mekan bağlamında anlamlandırmak için güçlü bir araç olarak öne çıkmaktadır. Mevcut veri setleri üzerinde %5.5’e varan performans iyileştirmeleri gözlenmiştir.

**14- Multiphysical graph neural network (MP-GNN) for COVID-19 drug design**

Bu çalışma, COVID-19 ilaç tasarımında kullanılan çok fiziksel grafik sinir ağı (MP-GNN) modelini tanıtmaktadır. MP-GNN, PDBbind-v2007, PDBbind-v2013 ve PDBbind-v2016 veri kümelerinde daha önceki modellerin tamamını geçerek, PDBbind-v2013 için mevcut en iyi performansı %2 oranında geçebilmiştir. SARS-CoV BA veri setinde MP-GNN, Pearson korelasyon katsayısında (Rp) %15-24 oranında iyileşme sağlayarak 0.855 seviyesine ulaşmıştır. SARS-CoV BA veri setinde %0.855 Rp ve 0.654 Kendall’s tau değeri ile en yüksek doğruluk oranlarına ulaşmıştır. Çok ölçekli istifleme ve elemente özgü grafik temsilleri sayesinde model, SARS-CoV/SARS-CoV-2 inhibitörlerinin etkileşimlerini yüksek doğrulukla tahmin edebilmektedir.

15-