**Graph Neural Networks**

**ABSTRACT**

Graphs have been used to model relations between objects connected in a pairwise manner,

with applications on a wide variety of real world situations and mathematical abstractions such

as in complex systems. In the last decade interest in applying neural networks which can oper-

ate on graph data has been increasing, either in the direction of structure learning or dynamics

acting on graphs. In this thesis the basic principles of graph theory and neural networks are

presented, with an emphasis on the evolution of the approaches building up to the creation

of the first modern Graph Neural Networks (GNNs). To this end, Different kinds of graphs

and complex dynamics are introduced, the basic principles of machine learning are explained

and finally a GNN using an Attention mechanism is used for several experiments on synthetic

datasets of contagion dynamics acting on random graphs, to showcase the quantitative ac-

curacy of this approach’s predictions and the complexity of the dynamics it can model. The

GNN produces predictions which are more accurate and smooth that those of the maximum

likelihood estimators, while being able to interpolate better on pairs of predictions-targets not

present in the training sets.

**Νευρωνικά δίκτυα σε γράφους**

**Περιλήψη**

Οι γράφοι έχουν χρησιμοποιηθεί για την μοντελοποίηση των σχέσεων ανάμεσα σε αντικείμενα και οντότητες που συνδέονται, με εφαρμογές σε πληθώρα προβλημάτων από την καθημερινότητα ενώ η μαθηματική τους ανάλυση είναι πεδίο που μελετάται. Την τελευταία δεκαετία έχει υπάρξει ενδιαφέρον για την εφαρμογή νευρωνικών δικτύων τα οποία μπορούν να δράσουν πάνω σε δεδομένα από γράφους, για την μελέτη είτε της δομής και τοπολογίας τους, είτε για την εφαρμογή πολύπλοκων δυναμικών πάνω σε αυτά τα δίκτυα. Στην παρούσα εργασία παρουσιάζονται οι βασικές αρχές της θεωρίας γράφων, των νευρονικών δικτύων και της μηχανικής μάθησης ενώ στη συνέχεια παρουσιάζονται ως συνέχεια αυτών τα πρώτα μοντέλα νευρωνικών δικτύων για γράφους (GNNs)