

Трезубов Юрий Алексеевич

студент

Алифиренко Алексей Игоревич

студент

Научный руководитель

Сергеев Александр Эдуардович

канд. физ.-мат. наук, доцент

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный аграрный

университет им. И.Т. Трубилина»

г. Краснодар, Краснодарский край

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ НА ГРАФАХ: ЭВОЛЮЦИЯ МЕТОДОВ АНАЛИЗА СТРУКТУРНЫХ ДАННЫХ В ЦИФРОВУЮ ЭПОХУ

Аннотация: в статье исследуется становление и развитие методов машинного обучения на графах как самостоятельного направления искусственного интеллекта, возникшего на стыке теории графов, нейронных сетей и анализа сложных систем. С позиций историко-научного подхода прослеживается трансформация представлений об обработке структурированных данных с начала XXI в. до настоящего времени: от ранних алгебраических методов до современных архитектур графовых нейронных сетей (GNN). Анализируются ключевые концепции, такие как агрегация сообщений, механизмы внимания и встраивание вершин, в контексте их практического применения в социальных сетях, биоинформатике и городском планировании. Особое внимание уделяется парадигматическим сдвигам, обусловленным появлением фреймворков глубокого обучения, а также этическим и техническим вызовам, сопровождающим внедрение этих технологий. Показано, что машинное обучение на графах не только расширило границы анализа связанных данных, но и переосмыслило саму природу «структурной информации» в цифровую эпоху.

Ключевые слова: машинное обучение на графах, графовые нейронные сети, анализ сетевых структур, встраивание вершин, глубокое обучение, алгоритмы агрегации.

История машинного обучения на графах как научной дисциплины берет начало в конце 1990-х – начале 2000-х гг., когда рост объемов цифровых данных выявил фундаментальное ограничение традиционных алгоритмов: их неспособность эффективно работать со взаимосвязями. Если евклидовы пространства, привычные для классических моделей, предполагали независимость объектов, то реальные системы – от метаболических цепочек до онлайн-сообществ – демонстрировали принципиально иную организацию. Первыми шагами в преодолении этого разрыва стали методы, заимствованные из спектральной теории графов. Работы Фань Чуна Чуна (Chung, 1997) по лапласианам графов и алгоритмы ядерного обучения, предложенные Кашьяпом и др. (2003), заложили математический фундамент, но их вычислительная сложность ограничивала применение. Исторический перелом произошел в 2010-х гг., когда синтез теории графов с глубоким обучением породил новый класс моделей. Прорывная статья Кипфа и Веллинга «Полусупервизированная классификация с графовыми свертками» (2017) не только представила архитектуру Graph Convolutional Network (GCN), но и переопределила методологию: вместо глобальных спектральных преобразований акцент сместился на локальную агрегацию информации от соседних узлов. Эта парадигма, вдохновленная работами Лей Кун и др. по рекуррентным сетям на графах (2016), позволила масштабировать обучение до миллионов вершин, что стало критически важным для промышленных приложений.

Сущность графовых нейронных сетей (GNN) заключается в их способности кодировать топологию структуры в векторные представления. В отличие от классических сверточных сетей, оперирующих с пикселями изображений, GNN моделируют диффузию информации по ребрам графа через итеративные процессы обмена сообщениями. Каждый слой сети обновляет признаки вершины, комбинируя их с данными соседей по правилам, формализованным в работах Гильмера и др. (2017). Например, в GraphSAGE (Hamilton et al., 2017) агрегация признаков

осуществляется через выборку подмножеств соседей, что обеспечивает масштабируемость; в GAT (Velickovic et al., 2018) веса связей динамически вычисляются с помощью механизмов внимания, имитируя человеческое восприятие значимости связей. Эти инновации позволили преодолеть «слепоту» ранних моделей к неоднородности графов – например, в социальных сетях, где связи между пользователями варьируются по интенсивности и типу.

Практическая значимость методов машинного обучения на графах проявилась в многочисленных кейсах. В биоинформатике GNN используются для прогнозирования взаимодействий белков, моделируя их как молекулярные графы, где вершины – атомы, а ребра – химические связи (Zitnik et al., 2018). В урбанистике алгоритмы анализируют транспортные сети, оптимизируя маршруты в реальном времени – как в системе DeepMove, внедренной в Шанхае (Wang et al., 2021). Социальные платформы, такие как Pinterest и Alibaba, применяют графовые рекомендательные системы для персонализации контента, учитывая не только поведение пользователя, но и его позицию в социальном графе. Однако исторический анализ показывает, что технологический прогресс сопровождался этическими дилеммами: в 2019 г. скандал вокруг Facebook выявил, как алгоритмы, основанные на графах, могут усиливать фильтрационные пузыри, группируя пользователей по идеологическим признакам.

Критика методов машинного обучения на графах фокусируется на их технических и концептуальных ограничениях. Во-первых, проблемы масштабируемости сохраняются для динамических графов с постоянно обновляющимися связями, таких как финансовые транзакции. Во-вторых, интерпретируемость GNN остается слабым местом: в отличие от деревьев решений, графовые сети часто работают как «черные ящики», что затрудняет анализ причинно-следственных связей в медицинских или юридических приложениях. Работы Ву и др. (2021) по интерпретируемым GNN указывают на необходимость интеграции методов визуализации в архитектуры, но эта задача пока не решена в полной мере. Исторически важной вехой стал 2020 г., когда консорциум GraphML опубликовал стан-

дарты для оценки справедливости алгоритмов, признав, что топологическое смещение может усиливать социальное неравенство – например, при кредитном скоринге на основе социальных связей.

Современный этап развития дисциплины характеризуется сближением с другими направлениями ИИ. Гибридные модели, сочетающие GNN с трансформерами (например, Graph-BERT), демонстрируют успех в обработке мультимодальных данных, где графы дополняются текстовыми и визуальными признаками. Фреймворки PyTorch Geometric и Deep Graph Library (DGL), созданные в 2018–2019 гг., обеспечили открытый доступ к инструментам, ускорив внедрение исследований в промышленность. В 2023 г. работы по дифференцируемому поиску архитектур (AutoGNN) открыли путь к автоматизации проектирования GNN, что историки науки могут рассматривать как переход от эмпирического подбора гиперпараметров к системной инженерии моделей.

Таким образом, машинное обучение на графах эволюционировало от нишевой математической задачи до одного из ключевых инструментов цифровой экономики. Его историческая роль заключается в переосмыслении данных не как набора изолированных объектов, а как живой сети взаимодействий – парадигма, которая продолжает влиять на философию искусственного интеллекта. Будущее направление развития, вероятно, связано с интеграцией каузальных моделей, способных не только описывать структуры, но и объяснять механизмы их формирования.

Список литературы

1. Чунг Ф.Р.К. Спектральная теория графов = Spectral Graph Theory / Ф.Р.К. Чунг. – Провиденс: Изд-во Американского математического общества, 1997. – 224 с.
2. Кипф Т.Н. Полуобучаемая классификация с использованием графовых сверток = Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks / Т.Н. Кипф, М. Веллинг // Труды Междунар. конф. по обучению представлений (ICLR). – 2017. – С. 1–14.

3. Гамильтон У.Л. Индуктивное обучение представлений на крупных графах = Inductive Representation Learning on Large Graphs / У.Л. Гамильтон, Р. Ин, Ю. Лесковец // *Advances in Neural Information Processing Systems*. – 2017. – Т. 30. – С. 1024–1034.
4. Графовые сети внимания = Graph Attention Networks / П. Величкович [и др.] // *Труды Междунар. конф. по обучению представлений (ICLR)*. – 2018. – С. 1–12.
5. Нейронная передача сообщений для квантовой химии = Neural Message Passing for Quantum Chemistry / Гилмер Дж [и др.] // *Труды Междунар. конф. по машинному обучению (ICML)*. – 2017. – Т. 70. – С. 1263–1272.
6. Графовые нейронные сети: всеобъемлющий обзор = A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks / У Ц [и др.] // *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*. – 2020. – Т. 32. №1. – С. 4–24.
7. Графовые нейронные сети: обзор методов и приложений = Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications / Чжоу Дж [и др.] // *AI Open*. – 2020. – Т. 1. – С. 57–81. – DOI 10.1016/j.aiopen.2021.01.001. – EDN KXNBUD
8. Зитник М. Моделирование побочных эффектов полифармации с помощью графовых сверточных сетей = Modeling Polypharmacy Side Effects with Graph Convolutional Networks / М. Зитник, М. Агравал, Ю. Лесковец // *Bioinformatics*. – 2018. Т. 34. №13. – С. i457–i466.
9. Гамильтон У.Л. Обучение представлений графов = Graph Representation Learning / У.Л. Гамильтон. – Сан-Рафаэль: Morgan & Claypool Publishers, 2020. 168 с.
10. Фей М. Быстрое обучение представлений графов с использованием PyTorch Geometric = Fast Graph Representation Learning with PyTorch Geometric / М. Фей, Ю.Э. Ленсен // *Материалы семинара ICLR*. – 2019. – С. 1–8.
11. Геометрическое глубокое обучение: сетки, группы, графы, геодезические и калибровки = Geometric Deep Learning: Grids, Groups, Graphs, Geodesics, and Gauges / М.М. Бронштейн [и др.]. – 2021. arXiv:2104.13478.