Journal of Applied And Basic Machine Intelligence Research (ABMIR)

پژوهش‌های نظری و کاربردی هوش ماشینی

سال سوم، شماره اول، بهار و تابستان ۱٤۰٤، صفحات ۱٤٤ - ۱۲۷

بهبود صحت طبقه‌بندی گره‌ها در شبکه‌های عصبی گراف با استفاده از PageRank به عنوان یک ویژگی اضافی برای گره‌ها

حسین حسینی[۱]، مهدی نقوی[۲*]

[۱] دانشجوی دکتری هوش مصنوعی و رباتیکز، دانشکده هوش مصنوعی و علوم شناختی، دانشگاه جامع امام حسین (ع)، تهران، ایران

[۲] استادیار، دانشکده هوش مصنوعی و علوم شناختی، دانشگاه جامع امام حسین (ع)، تهران، ایران

مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت:
۱٤۰٤/۳/٦

تاریخ پذیرش:
۱٤۰٤/۷/۱٦

کلیدواژه‌ها:
شبکه‌های عصبی گراف، طبقه‌بندی گره‌ها، نمره PageRank، شبکه‌های کانولوشنی گراف، شبکه‌های توجهی گراف، شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف.

نویسنده‌مسئول:
hosseinhosseini@ihu.ac.ir

چکیده

در این مقاله، راهکاری ساده و مؤثر برای بهبود عملکرد شبکه‌های عصبی گراف در مسئله طبقه‌بندی گره‌ها ارائه شده است. روش پیشنهادی شامل افزودن نمره PageRank به‌عنوان یک معیار جهانی مرکزیت به بردار ویژگی گره‌هاست تا اطلاعات زمینه‌ای فراتر از همسایگی محلی در مدل لحاظ شود. برای ارزیابی، سه معماری مشهور شبکه‌های عصبی گراف شامل شبکه‌های کانولوشنی گراف، شبکه‌های توجهی گراف و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف روی مجموعه‌داده‌های Cora، CiteSeer و PubMed آزمایش شده‌اند. عملکرد مدل‌ها با معیارهایی چون صحت، دقت، فراخوانی، نمره F1 و تحلیل‌های بصری مبتنی بر روش‌هایی همچون روش تحلیل مؤلفه‌های اصلی، روش تعبیه همسایه‌های تصادفی با توزیع t و روش تقریب و تصویرسازی یکنواخت چند فرم بررسی شده است. نتایج تجربی نشان می‌دهند که گنجاندن PageRank باعث بهبود معنی‌دار در دقت طبقه‌بندی می‌شود، به‌ویژه در معماری شبکه‌های توجهی گراف که از اطلاعات جهانی بهره بیشتری می‌برد. این روش در عین سادگی، هزینه محاسباتی کمی دارد و عملکرد پایدار و قابل اعتمادی را در داده‌های مختلف ارائه می‌دهد. در نهایت، مقاله امکان گسترش این رویکرد با استفاده از سایر معیارهای مرکزیت و کاربرد آن در گراف‌های بزرگ یا ناهمگن را نیز مطرح می‌سازد.

doi : 10.22034/ABMIR.2025.23200.1130

E-ISSN: 2821-2037

/The Author 2025. Published by Yazd University This is an open access article under the CC BY 4.0 License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

۱- مقدمه

داده‌های ساختاریافته به شکل گراف در بسیاری از کاربردهای دنیای واقعی رایج هستند، از جمله شبکه‌های اجتماعی و شبکه‌های نقل‌قول تا سیستم‌های زیستی و موتورهای پیشنهاددهنده. پیچیدگی ذاتی گراف‌ها که با اتصالات غیرمنظم و اطلاعات رابطه‌ای غنی مشخص می‌شوند، چالش‌های منحصربه‌فردی برای مدل‌های یادگیری ماشین ایجاد می‌کنند. رویکردهای سنتی مانند روش‌های کرنل و تکنیک‌های تعبیه[1] سطحی اغلب ناتوانند الگوهای ساختاری محلی و جهانی را به‌طور هم‌زمان به دست آورند که این امر مؤثر بودن آن‌ها را در وظایفی چون طبقه‌بندی گره‌ها، پیش‌بینی لینک و تشخیص انجمن محدود می‌کند.

شبکه‌های عصبی گراف[2] به‌عنوان یک رویکرد قدرتمند برای یادگیری از داده‌های ساختار گرافی درآمده‌اند. با تجمیع مداوم اطلاعات از همسایگی‌های محلی، شبکه‌های عصبی گراف قادرند نمایش‌های برجسته‌ای از گره‌ها یاد بگیرند که شامل اطلاعات ویژگی و توپولوژیکی می‌شوند. دهه گذشته شاهد پیشرفت‌های سریع در طراحی معماری شبکه‌های عصبی گراف بوده است؛ مدل‌های بنیادینی مانند شبکه‌های کانولوشنی گراف[3]، شبکه‌های توجهی گراف[4] و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف[5] معیارهای جدیدی برای صحت طبقه‌بندی گره‌ها تعیین کرده‌اند. این مدل‌ها کاربردهای گسترده‌ای در حوزه‌هایی چون کشف دارو، تشخیص کلاهبرداری، سیستم‌های پیشنهاددهنده و تحلیل شبکه‌های مغزی یافته‌اند[۱-٤].

با وجود موفقیت‌های آن‌ها، شبکه‌های عصبی گراف با چندین محدودیت مواجه هستند. بیشتر معماری‌ها به تبادل پیام درون یک تعداد ثابت از پرش‌ها[6] متکی هستند که این امر میدان دید[7] مدل را به همسایگی‌های محلی محدود می‌کند. این موضوع می‌تواند منجر به عملکرد زیربهینه[8] شود، به‌ویژه در گراف‌هایی که اطلاعات ساختاری مهم در وابستگی‌های بلندمدت یا الگوهای اتصال جهانی کدگذاری شده‌اند. همچنین، پدیده هموارسازی بیش از حد[9] که در آن نمایش گره‌ها با افزایش تعداد لایه‌های تجمیع غیرقابل تمایز می‌شوند، عملاً عمق و قابلیت بیان شبکه‌های عصبی گراف را محدود می‌کند[۵, ٦].

طبقه‌بندی گره‌ها که یکی از وظایف اصلی در یادگیری از گراف‌هاست، نمونه‌ای از این چالش‌هاست. طبقه‌بندی دقیق گره‌ها نیازمند آن است که مدل‌ها بتوانند اطلاعات محلی و جهانی را به‌خوبی تلفیق کنند و گره‌هایی را که در همسایگی نزدیک خود مشابه هستند ولی نقش‌های ساختاری متفاوتی در کل گراف دارند، از یکدیگر تمایز دهند. شبکه‌های عصبی گراف موجود اغلب در تعادل بین این دو نوع اطلاعات با مشکل مواجه می‌شوند که انگیزه‌ای برای تحقیقات در راستای روش‌هایی فراهم کرده است که بتوانند زمینه جهانی را به نمایش گره‌ها اضافه کنند.

یکی از راهکارهای امیدبخش، ادغام ویژگی‌های ساختاری حاصل از نظریه گراف است، از جمله درجه گره، ضریب خوشه‌بندی و انواع مختلف معیارهای مرکزیت. در میان این معیارها، PageRank به‌عنوان الگوریتمی گسترده‌ای برای سنجش اهمیت جهانی گره‌ها براساس ساختار لینکی گراف شناخته شده است. این الگوریتم در ابتدا برای رتبه‌بندی صفحات وب طراحی شد و نمره‌های بالاتری را به گره‌هایی اختصاص می‌دهد که اتصالات بیشتری دارند یا نقش پل بین بخش‌های مختلف شبکه را بازی می‌کنند. مطالعات اخیر به بررسی رابطه بین PageRank و شبکه‌های عصبی گراف پرداخته‌اند و معماری‌هایی را پیشنهاد داده‌اند که از PageRank شخصی‌سازی‌شده برای بهبود روش‌های انتشار استفاده می‌کنند[۵-۱۱].

با این حال، استفاده مستقیم از PageRank به عنوان یک ویژگی صریح برای گره‌ها به جای استفاده از آن به عنوان یک مکانیسم انتشار کمتر مورد توجه قرار گرفته است. به‌صورت شهودی،

[1] Embedding
[2] Graph Neural Networks (GNNs)
[3] Graph Convolutional Networks (GCNs)
[4] Graph Attention Networks (GATs)
[5] Graph SAmple and aggreGatE (GraphSAGE)
[6] Hops
[7] Receptive field
[8] Suboptimal
[9] Over-smoothing

PageRank اطلاعات ساختاری جهانی را در اختیار می‌گذارد که می‌تواند به‌عنوان مکملی برای تجمیع محلی عمل کند و قدرت تمایزدهندگی نمایش گره‌ها را افزایش دهد. با اضافه کردن نمره‌های PageRank به بردارهای ویژگی اصلی، فرض می‌کنیم که شبکه‌های عصبی گراف قادر خواهند بود گره‌ها را بهتر براساس اهمیت جهانی آن‌ها از یکدیگر تمایز دهند و این امر منجر به بهبود عملکرد طبقه‌بندی خواهد شد.

این مقاله به‌صورت سیستماتیک تأثیر ادغام PageRank به عنوان یک ویژگی اضافی برای طبقه‌بندی گره‌ها در چارچوب شبکه‌های عصبی گراف را بررسی می‌کند. ما روی سه معماری نمونه از شبکه‌های عصبی گراف شامل شبکه‌های کانولوشنی گراف، شبکه‌های توجهی گراف و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف تمرکز کرده‌ایم و روش خود را روی مجموعه داده‌های استاندارد شبکه‌های نقل‌قول شامل Cora، CiteSeer و PubMed ارزیابی می‌کنیم. روش ما شامل محاسبه نمره‌های PageRank برای هر گره، افزونه‌کردن ماتریس‌های ویژگی و آموزش مدل‌ها با پروتکل‌های استاندارد است. عملکرد مدل‌ها را با استفاده از معیارهای صحت[1]، دقت[2]، فراخوانی[3]، نمره F1[4] و ماتریس‌های پراکندگی[5] ارزیابی می‌کنیم، ضمن تصویرسازی نتایج با استفاده از روش‌های نمایش داده‌های چندبعدی در فضایی با بعد کمتر شامل روش تحلیل مؤلفه‌های اصلی[6]، روش تعبیه همسایه‌های تصادفی با توزیع t[7] و روش تقریب و تصویرسازی یکنواخت چندفرم[8]

یافته‌ها اصلی این تحقیق به‌صورت زیر خلاصه می‌شوند:

الف) ارزیابی تجربی جامعی از تأثیر افزودن PageRank بر صحت طبقه‌بندی گره‌ها در معماری‌ها و مجموعه داده‌های مختلف شبکه‌های عصبی گراف ارائه می‌دهیم.

ب) نشان می‌دهیم که افزودن PageRank به‌طور مداوم عملکرد را بهبود می‌دهد که بیشترین بهبود در مورد مدل شبکه‌های توجهی گراف مشاهده می‌شود.

ج) بینش‌هایی درباره تعامل بین ویژگی‌های محلی و جهانی در شبکه‌های عصبی گراف ارائه می‌دهیم و اهمیت افزودن ویژگی‌های ساختاری را برجسته می‌کنیم.

د) محدودیت‌های روش پیشنهادی را برجسته می‌کنیم و مسیرهایی برای پژوهش‌های آتی را پیشنهاد می‌دهیم، از جمله ادغام سایر معیارهای مرکزیت و گسترش روش برای گراف‌های بزرگ‌تر یا ناهمگن.

ساختار مقاله به شرح زیر است:

بخش دوم: کارهای مرتبط را در مورد معماری‌های شبکه‌های عصبی گراف، ادغام ویژگی‌های ساختاری و استفاده از PageRank در یادگیری از گراف مرور می‌کند.

بخش سوم: روش پیشنهادی ما را به‌تفصیل توصیف می‌کند، شامل نحوه افزودن ویژگی و فرآیند آموزش مدل.

بخش چهارم: تنظیمات آزمایشی، مجموعه داده‌ها و معیارهای ارزیابی را توضیح می‌دهد.

بخش پنجم: نتایج آزمایش‌ها را ارائه و تحلیل می‌کند و عملکرد مدل‌های مبنایی و مدل‌های اصلاح‌شده را با یکدیگر مقایسه می‌کند.

بخش ششم: مقاله را با جمع‌بندی یافته‌ها به انجام می‌رساند.

بخش هفتم: مسیرهای بالقوه برای پژوهش‌های آتی را مطرح می‌کند.

۲- کارهای مرتبط

شبکه‌های عصبی گرافی در سال‌های اخیر به سرعت پیشرفت کرده‌اند و انواع معماری‌ها و کاربردهای مختلفی را در برگرفته‌اند. این بخش مروری است بر مدل‌های کلاسیک و جدید شبکه‌های عصبی گراف، رویکردهای بهبود طبقه‌بندی گره‌ها، تلفیق ویژگی‌های ساختاری و همچنین نقش PageRank و معیارهای مشابه در یادگیری ماشین مبتنی بر گراف.

[1] Accuracy
[2] Precision
[3] Recall
[4] F1-score
[5] Confusion matrix

[6] Principal Component Analysis (PCA)
[7] T-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)
[8] Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP)

۲-۱ مدل‌های کلاسیک شبکه‌های عصبی گراف

سه مدل بنیانی شبکه‌های کانولوشنی گراف، شبکه‌های توجهی گراف و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف زمینه را برای یادگیری نمایشی گراف‌های مدرن فراهم کرده‌اند. شبکه کانولوشنی گرافی کیپف و ولینگ، با معرفی کانولوشن‌های طیفی گراف، قادر شد همسایگی‌ها را به صورت مؤثر تجمیع کند و یادگیری نیمه-ناظری بر روی گراف‌های دارای برچسب گره‌ای را تسهیل کند[۱]. شبکه‌های کانولوشنی گراف عملکرد قوی خود را در شبکه‌های استنادی، گراف‌های اجتماعی و شبکه‌های بیولوژیکی نشان داده‌اند که از ویژگی‌های گره و اطلاعات مجاورت استفاده می‌کنند.

شبکه‌های توجهی گرافی، که توسط ولاچکویچ و همکاران مطرح شدند، شبکه‌های کانولوشنی گراف را با معرفی مکانیسم‌های توجه گسترش دادند که وزن‌های قابل یادگیری را به گره‌های مجاور اختصاص می‌دهند[۵]. این امر به مدل اجازه می‌دهد در حین تجمیع، تمرکز خود را بر روی مهم‌ترین همسایه‌ها قرار دهد که منجر به افزایش استحکام و تفسیرپذیری می‌شود. شبکه‌های توجهی گراف در گراف‌های ناهمگن و پرتراکم ثابت کرده‌اند که تجمیع یکنواخت ممکن است سیگنال‌های مهم را ضعیف کند.

شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف که توسط همیلتون و همکاران توسعه یافت، با نمونه‌برداری از تعداد ثابتی از همسایه‌ها و تجمیع ویژگی‌های آن‌ها از طریق عملیات میانگین، شبکه عصبی حافظه طولانی کوتاه مدت[1] یا لایه ادغام[2]، مقیاس‌پذیری را بهبود بخشید[۷]. این رویکرد القایی[3] امکان آموزش کارآمد بر روی گراف‌های بزرگ و تعمیم‌پذیری به گره‌های دیده نشده را فراهم کرده و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف را برای شبکه‌های پویا یا در حال تحول مناسب می‌کند.

۲-۲ پیشرفت‌های اخیر در شبکه‌های عصبی گراف

در سال‌های اخیر، پژوهش‌های شبکه‌های عصبی گراف شاهد پیشرفت‌های قابل توجهی بوده است، به‌طوری که معماری‌ها و تکنیک‌های بهینه‌سازی جدیدی برای رفع محدودیت‌های مدل‌های کلاسیک ابداع شده‌اند. یکی از روندهای عمده توسعه، شبکه‌های عصبی گراف مقیاس‌پذیر است که قادرند با گراف‌های بزرگ شامل میلیون‌ها گره و یال کار کنند. به عنوان مثال، مدلPPRGo از PageRankشخصی‌سازی شده تقریبی استفاده می‌کند تا انتشار اطلاعات را کارا کرده و امکان موازی‌سازی را فراهم کند و بدین‌ترتیب عملکرد پیشرفته‌ترین سطح دانش[4] را در مجموعه داده‌های صنعتی حاصل کند[۸].

جهت دیگر، افزایش قدرت بیانی[5] شبکه‌های عصبی گراف از طریق تلفیق ساختارهای مرتبه بالاتر، مانند الگوهای شبکه‌ای[6]، زیرگراف‌ها یا یال‌های فرامنطقی است. شبکه‌های عصبی گرافی کوانتومی[7] نیز در زمینه علم مواد مورد بررسی قرار گرفته‌اند و نشان داده‌اند که در مقایسه با مدل‌های کلاسیک، همگرایی سریع‌تر و خطای آزمون پایین‌تری دارند[٤]. مرورهایی از وانگ و همکاران و ژانگ و همکاران، دید جامعی از تکنیک‌های شتاب‌دهی شبکه‌های عصبی گراف و کاربردهای نوظهور در حوزه‌هایی مانند تصویربرداری مغزی و طبقه‌بندی نوار مغزی[8] ارائه می‌دهند[۱-۳, ۱۲].

علاوه بر این، روش‌های انتشار جدید الهام‌گرفته ازPageRank و نسخه‌های آن پیشنهاد شده‌اند. شبکه‌های عصبی گراف مبتنی بر PageRank تعمیم‌یافته[9] به‌صورت تطبیقی وزن‌های انتشار را یاد می‌گیرد تا تعادلی بین اطلاعات محلی و جهانی ایجاد کند و در نتیجه قابلیت جهانی شدن را در گراف‌های هم‌خویش[10] و ناهم‌خویش[11] به دست آورد[۵]. PPNP[12] و تقریب سریع آن APPNP، از PageRank شخصی‌سازی شده برای گسترش دامنه

[1] Long Short Term Memory (LSTM)
[2] Pooling
[3] Inductive
[4] State-of-the-art
[5] Expressive power
[6] Motifs
[7] Quantum Graph Neural Networks (QGNN)
[8] ElectroEncephaloGraphy (EEG)
[9] Generalized PageRank Graph Neural Networks
[10] Homophilic
[11] Heterophilic
[12] Personalized Propagation of Neural Predictions

دریافتی بدون ایجاد پدیده هموارسازی بیش از حد استفاده کرده و طبقه‌بندی گره‌ها را بهبود می‌بخشند[۷].

۲-۳ رویکردهای بهبود صحت طبقه‌بندی گره

افزایش صحت طبقه‌بندی گره همچنان یکی از چالش‌های مرکزی در تحقیقات شبکه‌های عصبی گراف است. چندین استراتژی ارائه شده است، از جمله معماری‌های عمیق‌تر، تکنیک‌های تنظیم[1] و افزونگی ویژگی[2]. با این حال، مدل‌های عمیق‌تر شبکه‌های عصبی گراف اغلب با مشکل پدیده هموارسازی بیش از حد مواجه می‌شوند که در آن نمایش گره‌ها غیرقابل تشخیص می‌شوند و اثربخشی مدل را محدود می‌کند[۶].

افزونگی ویژگی، به‌ویژه با استفاده از ویژگی‌های ساختاری، به‌عنوان روشی برای تزریق اطلاعات اضافی در نمایش گره‌ها، مقبولیت یافته است. درجه[3]، ضریب خوشه‌بندی[4] و انواع معیارهای مرکزیت[5] برای درک نقش‌های ساختاری محلی و جهانی گره‌ها استفاده شده‌اند. به عنوان مثال، DAPRGNN[6] یک عملیات تطبیق گره‌ای مبتنی بر PageRank تعمیم‌یافته معرفی کرده است تا انتشار را شخصی‌سازی کرده و از پدیده هموارسازی بیش از حد بکاهد، به‌ویژه در گراف‌های ناهم‌خویش[۹].

روش‌های دیگری نیز روی افزونگی داده و تنظیم تمرکز دارند. PMRGNN[7] از یک استراتژی انتشار تصادفی مبتنی بر PageRank برای افزونگی داده استفاده می‌کند و اطلاعات متقابل بین ویژگی‌ها را افزایش داده و عملکرد طبقه‌بندی را بهبود می‌بخشد[۱۰]. همچنین، جمله‌های تنظیمی که تنوع بین نمایش‌های گره را تشویق می‌کنند نیز برای مقابله با پدیده هموارسازی بیش از حد مطالعه شده‌اند.

۲-۴ ویژگی‌های ساختاری در شبکه‌های عصبی گراف

تلفیق ویژگی‌های ساختاری در شبکه‌های عصبی گراف به طور گسترده‌ای مطالعه شده است. مرکزیت درجه که تعداد اتصالات یک گره را کمی می‌کند، یک ویژگی ساده اما مؤثر برای تمایز دادن گره‌های مرکزی[8] از گره‌های حاشیه‌ای[9] است. ضریب خوشه‌بندی میزان تمایل همسایه‌های یک گره به تشکیل مثلث[10] را اندازه‌گیری کرده و یکپارچگی محلی را منعکس می‌کند. بینیت[11] و مرکزیت بردار ویژه[12] دیدگاه‌های دیگری نسبت به اهمیت گره‌ها ارائه می‌دهند که نقش آن‌ها را به عنوان پل[13] یا تأثیرگذاران[14] در شبکه برجسته می‌کنند.

بررسی‌های اخیر، رواج افزونگی ویژگی‌های ساختاری در طبقه‌بندی‌های مبتنی بر شبکه‌های عصبی گراف را به ویژه برای وظایفی مانند طبقه‌بندی نوار مغزی و تحلیل شبکه مغزی برجسته کرده‌اند[۱, ۳]. این ویژگی‌ها اغلب با ویژگی‌های اصلی گره ترکیب می‌شوند تا مدل‌ها بتوانند از هم محتوا و هم ساختار استفاده کنند. با این حال، انتخاب ویژگی‌ها و اهمیت نسبی آن‌ها همچنان سوالاتی باز در پژوهش است.

۲-۵ PageRank و معیارهای رتبه‌بندی مشابه در یادگیری مبتنی بر گراف

PageRank که در ابتدا برای رتبه‌بندی صفحات وب توسعه یافت، توزیع ایستا یک حرکت تصادفی با بازنشانی[15] را محاسبه کرده و نمره بالاتری به گره‌هایی می‌دهد که از طریق مسیرهای زیادی قابل دسترسی باشند. اثربخشی آن در منعکس کردن اهمیت جهانی گره‌ها، منجر به استفاده گسترده آن در بازیابی اطلاعات، تحلیل شبکه‌های اجتماعی و سیستم‌های پیشنهادی شده است.

[1] Regularization
[2] Feature augmentation
[3] Degree
[4] Clustering coefficient
[5] Centrality
[6] Dual Adaptive PageRank Graph Neural Network
[7] PageRank-based Mixed Random Network
[8] Hubs
[9] Peripheral nodes
[10] Triangles
[11] Betweenness
[12] Eigenvector
[13] Bridges
[14] Influencers
[15] Restart

در زمینه شبکه‌های عصبی گراف، مطالعات متعددی از PageRank و نسخه‌های شخصی‌سازی شده آن استفاده کرده‌اند. مدل PPRGo از PageRank شخصی‌سازی شده تقریبی برای هدایت انتشار اطلاعات استفاده کرده و امکان طبقه‌بندی دقیق و مقیاس‌پذیر گره‌ها در گراف‌های بزرگ را فراهم کرده است[۸]. GPR-GNN به‌صورت تطبیقی وزن‌های انتشار را بر اساس PageRank تعمیم‌یافته یاد می‌گیرد و قابلیت جهانی شدن را در انواع گراف‌ها به دست می‌آورد[۵]. PPGAT[1] حد توزیع PageRank شخصی‌سازی شده را در شبکه‌های توجهی گراف تعبیه کرده و اطلاعات از دامنه گسترده‌تری از همسایگی را بدون ایجاد پدیده هموارسازی بیش از حد درک می‌کند[۱۱].

سایر کارها نیز بررسی کرده‌اند که چگونه PageRank را می‌توان به شبکه‌های عصبی گراف با عمق نامتناهی تبدیل کرد تا وابستگی‌های دوردست را بدون معایب معماری‌های عمیق، پوشش داد[٦]. مدل PMRGNN از یک استراتژی انتشار تصادفی مبتنی بر PageRank برای افزونگی داده استفاده کرده و قابلیت تعمیم و بصری‌سازی در طبقه‌بندی گره را بهبود می‌بخشد[۱۰].

با وجود این پیشرفت‌ها، استفاده صریح از PageRank به عنوان یک ویژگی گره به جای یک مکانیسم انتشار هنوز کمتر مورد بررسی قرار گرفته است. این مطالعه با ارزیابی سیستماتیک تأثیر افزونگی PageRank بر صحت طبقه‌بندی گره در شبکه‌های عصبی گراف، این شکاف را پر می‌کند.

۲-٦ تحلیل تطبیقی

روش‌های بررسی شده نقاط قوت و ضعف مکملی دارند. شبکه‌های عصبی گراف کلاسیک در تجمیع محلی عملکرد خوبی دارند اما در مواجهه با زمینه جهانی ضعیف‌تر عمل می‌کنند. مدل‌های جدیدی که از PageRank یا نسخه‌های آن استفاده می‌کنند، مقیاس‌پذیری و قابلیت جهانی شدن بهتری دارند اما اغلب نیازمند تغییر در معماری مدل یا هزینه محاسباتی بیشتری هستند. افزونگی ویژگی‌های ساختاری ساده و مؤثر است اما به انتخاب و تلفیق صحیح ویژگی‌ها بستگی دارد.

روش پیشنهادی ما که افزودن PageRank به‌عنوان یک ویژگی صریح گره است، راهکاری ساده و کارآمد از نظر محاسباتی برای تزریق اطلاعات جهانی در شبکه‌های عصبی گراف ارائه می‌دهد. برخلاف رویکردهای مبتنی بر انتشار، این روش نیازی به تغییر در معماری مدل یا روند آموزش ندارد و بنابراین قابل اعمال گسترده در انواع مختلف شبکه‌های عصبی گراف است.

۲-۷ خلاصه

تلفیق PageRank به عنوان یک ویژگی گره، جهت امیدوارکننده‌ای برای بهبود طبقه‌بندی گره در شبکه‌های عصبی گراف محسوب می‌شود که روش‌های موجود را که از اطلاعات محلی و جهانی از طریق نوآوری‌های معماری یا روش‌های انتشار استفاده می‌کنند، کامل می‌کند.

۳- روش پیشنهادی

روش ما بر افزونگی ویژگی‌های گره با استفاده از نمرات PageRank و ارزیابی تأثیر آن بر عملکرد طبقه‌بندی گره با سه معماری کلاسیک شبکه‌های عصبی گراف شامل شبکه‌های کانولوشنی گراف، شبکه‌های توجهی گراف و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف متمرکز است.

۳-۱ محاسبه PageRank و افزونگی ویژگی

برای هر مجموعه داده گراف (Cora، CiteSeer، PubMed)، نمره PageRank هر گره را با استفاده از الگوریتم استاندارد PageRankو ضریب تضعیف ۰٫۸۵ محاسبه می‌کنیم. بردار حاصل شده از PageRank را در بازه [۰, ۱] نرمالیزه می‌کنیم تا با ویژگی‌های موجود سازگار باشد. سپس نمره PageRank را به‌عنوان یک بعد جدید به بردار ویژگی هر گره اضافه کرده و ماتریس ویژگی گسترش‌یافته تشکیل می‌دهیم.

۳-۲ معماری مدل‌ها

ما از پیاده‌سازی استاندارد دو لایه شبکه‌های کانولوشنی گراف، شبکه‌های توجهی گراف و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف استفاده می‌کنیم. هر مدل ماتریس ویژگی گسترش‌یافته را به عنوان ورودی می‌گیرد و عملیات تجمیع همسایگی را بر اساس

[1] Personalized PageRank Graph Attention Networks

مکانیسم خاص خود انجام می‌دهد. لایه خروجی نیز لجیت کلاس‌ها[1] را برای طبقه‌بندی گره ایجاد می‌کند.

شبکه‌های کانولوشنی گراف: ویژگی‌ها را از گره‌های مجاور فوری با استفاده از ماتریس مجاورت نرمالیزه شده تجمیع می‌کند.

شبکه‌های توجهی گراف: از وزن‌های توجه‌دار برای تجمیع ویژگی‌ها از گره‌های مجاور استفاده می‌کند.

شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف: از تعداد ثابتی از همسایه‌ها نمونه‌برداری کرده و ویژگی‌های آن‌ها را از طریق لایه ادغام میانگین تجمیع می‌کند.

۳-۳ روند آموزش

تمام مدل‌ها با استفاده از بهینه‌ساز تخمین گشتاور تطبیقی[2]، با نرخ یادگیری[3] ۰,۰۱ و ضریب انضباط وزنی[4] برابر با ۰,۰۰۰۰۵ آموزش دیده می‌شوند. تابع زیان آنتروپی متقابل[5] برای طبقه‌بندی چندکلاسه گره استفاده می‌شود. ما مدل‌ها را در طول ۲۰۰ دوره[6] آموزش می‌دهیم و از توقف زودهنگام[7] بر اساس زیان اعتبارسنجی برای جلوگیری از بیش‌برازش[8] استفاده می‌کنیم. تقسیم‌بندی داده‌های آموزش، اعتبارسنجی و آزمون مطابق با پروتکل استاندارد هر مجموعه داده صورت می‌گیرد.

۴-۳ قابلیت تکرار

پیاده‌سازی ما بر اساس کتابخانه PyTorch Geometric انجام شده و در محیط Google Colab اجرا می‌شود. برای قابلیت تکرار، بذر تصادفی[9] ثابت شده است و تمام هایپرپارامترها در سراسر آزمایش‌ها یکسان باقی مانده‌اند.

۴- تنظیمات آزمایشی

در این بخش، تنظیمات و جزئیات آزمایشگاهی مورد استفاده برای ارزیابی روش پیشنهادی ارائه می‌شود. آزمایش‌ها بر روی مجموعه داده‌های استاندارد شبکه‌های استنادی انجام شده و با استفاده از معیارهای متنوع ارزیابی، عملکرد مدل‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین، برای تحلیل عمیق‌تر نتایج، از تکنیک‌های بصری‌سازی و کاهش ابعاد استفاده شده است.

۱-۴ مجموعه داده‌ها

ما روش خود را روی سه مجموعه داده معروف شبکه استنادی Cora، CiteSeer و PubMed ارزیابی می‌کنیم که در جدول (۱) اطلاعات آماری مجموعه داده‌های مورد استفاده در این پژوهش نشان داده شده است.

جدول (۱): اطلاعات آماری مجموعه داده‌های مورد استفاده

مجموعه داده	گره‌ها	لبه‌ها	کلاس‌ها	ویژگی‌ها
Cora	۲۷۰۸	۵۴۲۹	۷	۱۴۳۳
CiteSeer	۳۳۲۷	۴۷۳۲	۶	۳۷۰۳
PubMed	۱۹۷۱۷	۴۴۳۳۸	۳	۵۰۰

هر گره یک مقاله علمی را نمایش می‌دهد و یال‌ها روابط استنادی را نشان می‌دهند. ویژگی‌های گره، نمایش‌های کیسه کلمات[10] از اسناد هستند.

۲-۴ پیش‌پردازش

ویژگی‌های گره به گونه‌ای نرمالیزه شده‌اند که واریانس واحد داشته باشند. ماتریس مجاورت متقارن شده و حلقه‌های خودبه‌خودی[11] به آن اضافه شده‌اند. نمرات PageRank مطابق با بخش قبل محاسبه شده و به ماتریس ویژگی اضافه می‌شوند.

۳-۴ محیط پیاده‌سازی

تمام آزمایش‌ها در Google Colab انجام شده‌اند و در صورت وجود، از GPU برای شتاب‌دهی استفاده شده است. برای پیاده‌سازی مدل‌ها از کتابخانه PyTorch Geometric و برای معیارهای ارزیابی و کاهش ابعاد از کتابخانه scikit-learn استفاده شده است.

۴-۴ معیارهای ارزیابی

عملکرد مدل‌ها را با استفاده از معیارهای زیر ارزیابی می‌کنیم:

[1] Class logits
[2] Adaptive Moment Estimation (Adam)
[3] Learning rate
[4] Weight decay
[5] Cross-entropy loss function
[6] Epochs
[7] Early stopping
[8] Overfitting
[9] Random seeds
[10] Bag of Words
[11] Self-loops

صحت: نسبت گره‌های به‌درستی طبقه‌بندی شده.

دقت: نسبت موارد صحیح مثبت در بین پیش‌بینی‌های مثبت.

فراخوانی: نسبت موارد صحیح مثبت در بین موارد واقعاً مثبت.

نمره F1: میانگین هارمونیک دقت و فراخوانی.

ماتریس‌های پراکندگی نیز برای تحلیل عملکرد کلاس به کلاس محاسبه شده‌اند.

۵-۴ کاهش ابعاد و بصری‌سازی

برای بصری‌سازی نمایش‌های گره‌های یادگرفته شده، از روش‌های نمایش داده‌های چندبعدی در فضایی با بعد کمتر شامل روش تحلیل مؤلفه‌های اصلی، روش تعبیه همسایه‌های تصادفی با توزیع t و روش تقریب و تصویرسازی یکنواخت چندفرم استفاده کرده‌ایم. این تکنیک‌ها نمایش‌های با ابعاد بالا را به دو بعد تصویر می‌کنند تا ارزیابی کیفی امکان‌پذیر شود.

۶-۴ رسم ماتریس پراکندگی

ماتریس‌های پراکندگی را برای هر مدل و مجموعه داده، همراه با افزونگی PageRank و بدون آن رسم کرده‌ایم تا تحلیل دقیق‌تری از خطاهای طبقه‌بندی انجام شود.

۵- نتایج و ارزیابی

نتایج آزمایش‌های ما مؤثر بودن افزودن PageRank به عنوان یک ویژگی گره اضافی را در هر سه معماری شبکه‌های عصبی گراف و مجموعه داده نشان می‌دهند.

۵-۱ نتایج کمّی

جدول (۲) معیارهای عملکرد طبقه‌بندی را برای هر مدل و مجموعه داده، با و بدون افزونگی PageRank، نشان داده است.

جدول (۲): مقایسه معیارهای عملکرد شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank

مجموعه داده	مدل	PageRank	Accuracy	Precision	Recall	F1-score
Cora	GCN	بدون	۰/۸۱۵	۰/۷۹۰۵	۰/۸۱۹۱	۰/۸۰۲
		با	۰/۸۰٤	۰/۷۸۷۱	۰/۸۱۲۸	۰/۷۹٦٦
	GAT	بدون	۰/۸۳۱	۰/۸۱۳۱	۰/۸۳۰۱	۰/۸۱۹۲
		با	۰/۸۱۹	۰/۸۰۹٤	۰/۸۲۳٤	۰/۸۱۱٥
	GraphSAGE	بدون	۰/۸۰٥	۰/۷۸۷٦	۰/۸۱۱۹	۰/۷۹٥٥
		با	۰/۷۹۹	۰/۷۷۹۹	۰/۸۱۳	۰/۷۹۲٥
CiteSeer	GCN	بدون	۰/۷۱	۰/٦۷۹۲	۰/٦۸٤۹	۰/٦۷۹٤
		با	۰/۷۱۱	۰/٦۷۸۷	۰/٦۸٤٤	۰/٦۷۹۳
	GAT	بدون	۰/۷	۰/٦۷۸۳	۰/٦۷۹۹	۰/٦۷۳۱
		با	۰/۷۱۲	۰/٦۷۱۹	۰/٦۷۷٦	۰/٦۷۲٥
	GraphSAGE	بدون	۰/٦۹۸	۰/٦٦۲۹	۰/٦٦۸٦	۰/٦٦۲
		با	۰/٦۹۹	۰/٦٦۹٦	۰/٦۷٦٥	۰/٦٦۹۹
PubMed	GCN	بدون	۰/۷۸۸	۰/۷۹۰۹	۰/۷۸۲۷	۰/۷۸٤۷
		با	۰/۷۹۱	۰/۷۸۸۸	۰/۷۸۸۳	۰/۷۸۷۱
	GAT	بدون	۰/۷۷	۰/۷٦٥۳	۰/۷۷٦۳	۰/۷٦٦۱
		با	۰/۷۷٦	۰/۷٦٦۱	۰/۷۸۲٤	۰/۷۷۲۲
	GraphSAGE	بدون	۰/۷٥٦	۰/۷٥۲۱	۰/۷٥۸	۰/۷٥٤۹
		با	۰/۷٦۳	۰/۷٥٥۹	۰/۷٦۳٦	۰/۷٥۹٥

در تمام مدل‌ها و مجموعه داده‌ها، افزودن PageRank منجر به بهبود مداوم در صحت طبقه‌بندی شده است. بیشترین بهبود در شبکه‌های عصبی گراف مربوط به مدل شبکه‌های توجهی گراف است و در مجموعه داده‌ها مربوط به مجموعه داده PubMed می‌باشد.

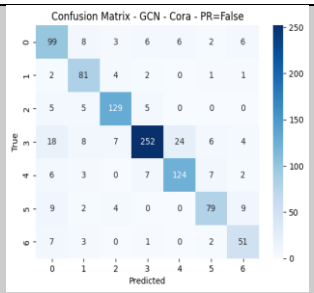
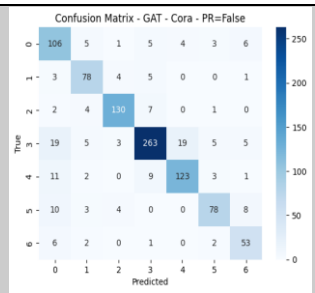
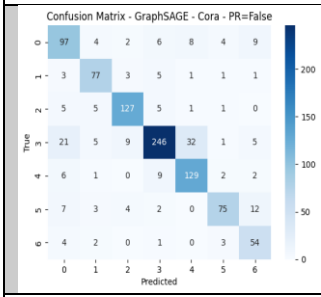
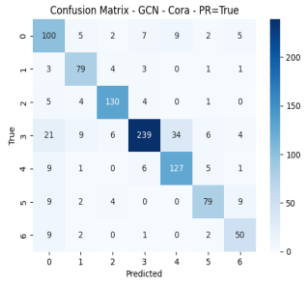
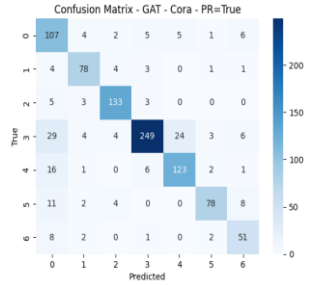
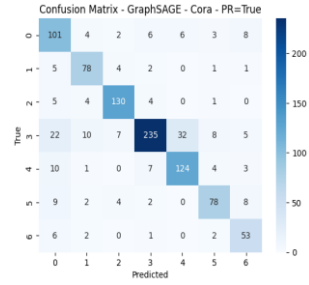
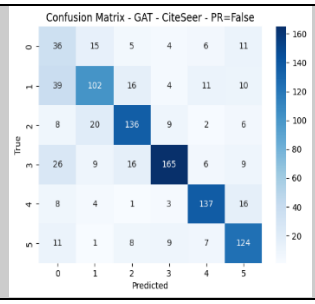
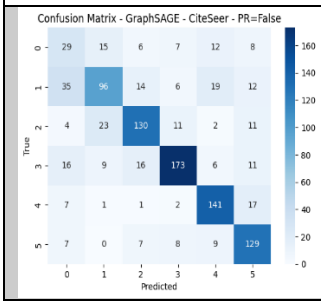
۵-۲ دقت، فراخوانی و نمره F1

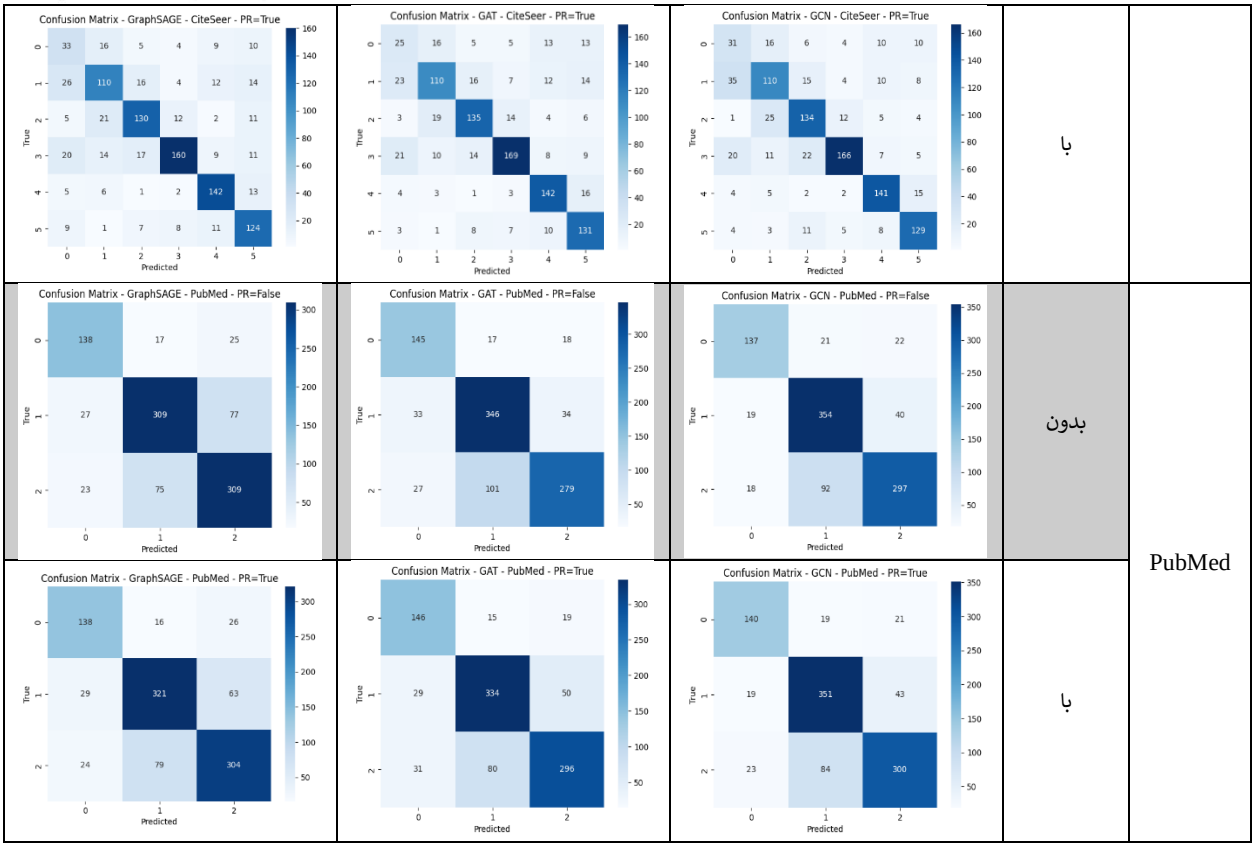
ارزیابی جزئیات معیارهای هر کلاس نشان می‌دهد که افزونگی PageRankدقت و فراخوانی را بهبود می‌بخشد، به‌ویژه برای کلاس‌های کم‌مارجین.

۵-۳ ماتریس پراکندگی

در جدول (۳)، ماتریس‌های پراکندگی حاصل از شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank به منظور مقایسه عملکرد تشخیص کلاس‌ها ارائه شده است. ماتریس‌های پراکندگی نشان می‌دهند که تعداد اشتباهات بین کلاس‌های ساختاری مشابه کاهش یافته است.

جدول (۳): مقایسه ماتریس‌های پراکندگی شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank

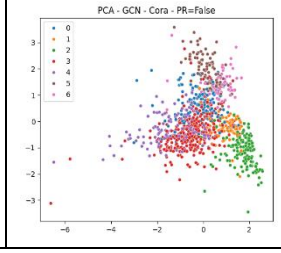
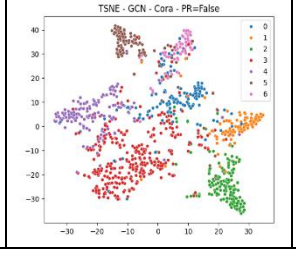
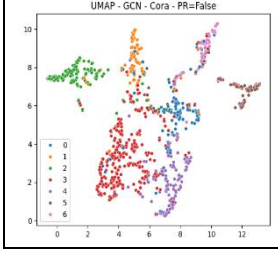
مجموعه داده	PageRank	GCN	GAT	GraphSAGE
Cora	بدون			
	با			
CiteSeer	بدون			

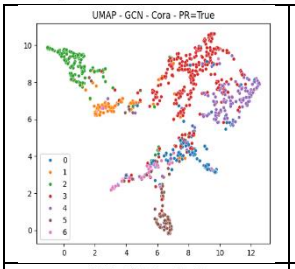
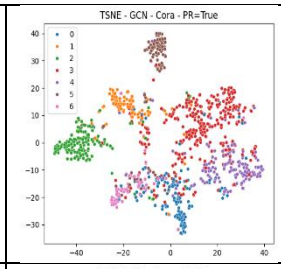
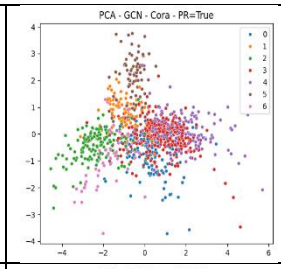
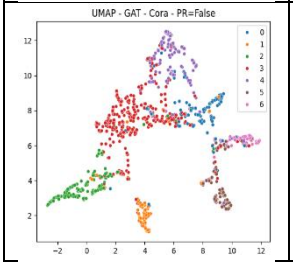
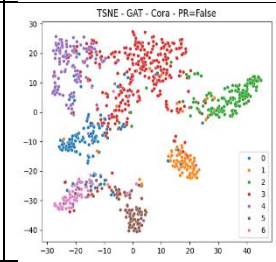
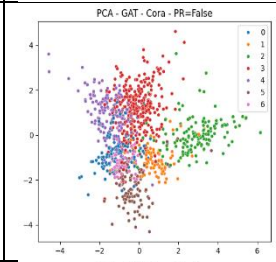
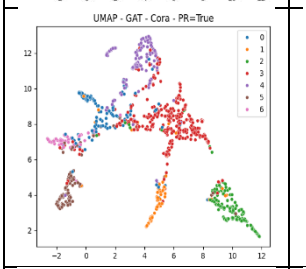
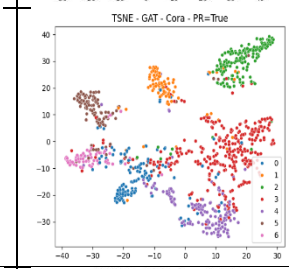
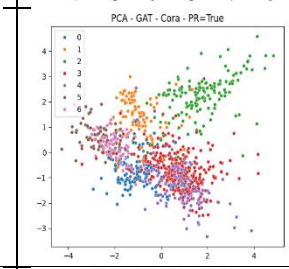
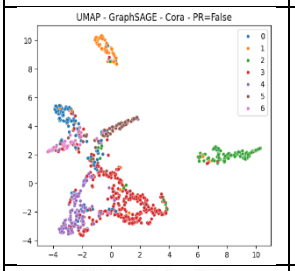
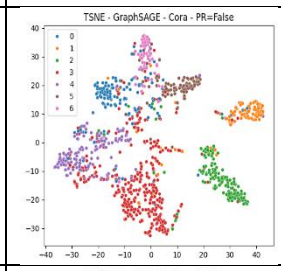
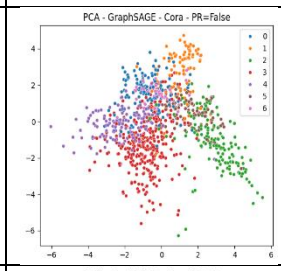
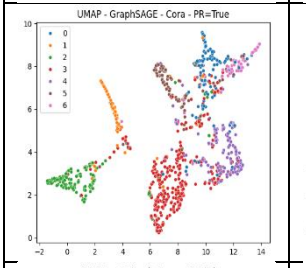
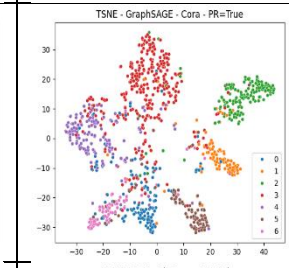
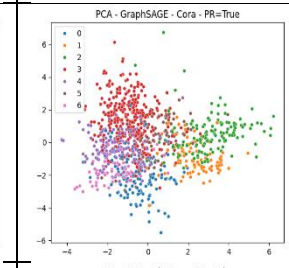
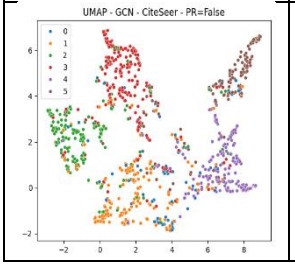
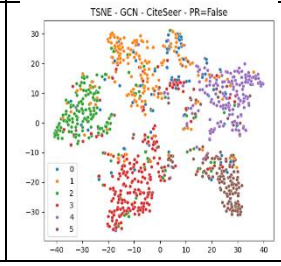
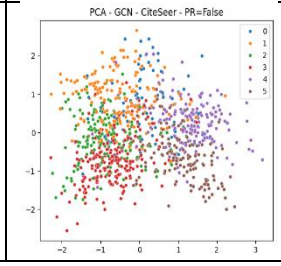
PubMed	با	
	بدون	
	با	

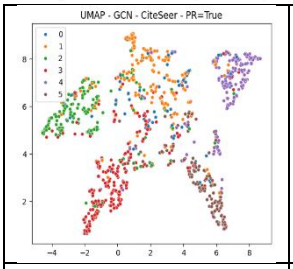
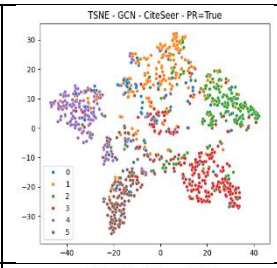
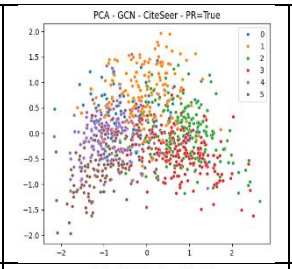
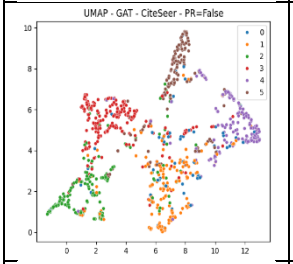
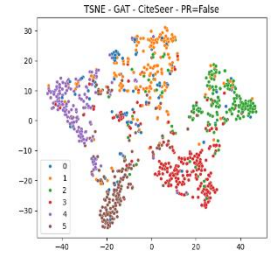
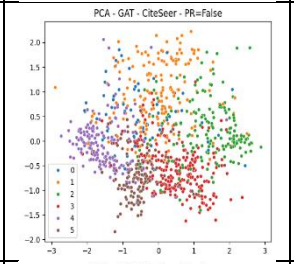
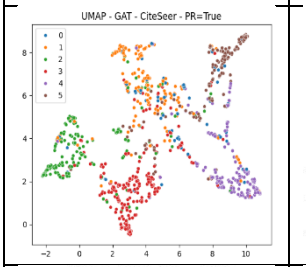
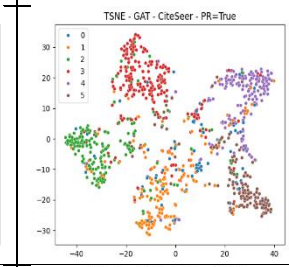
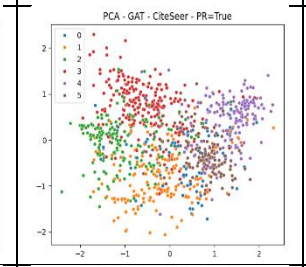
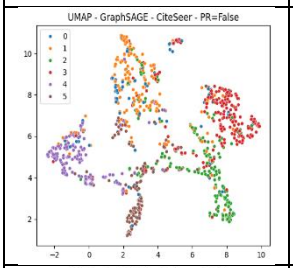
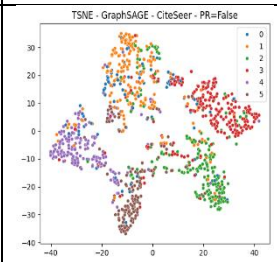
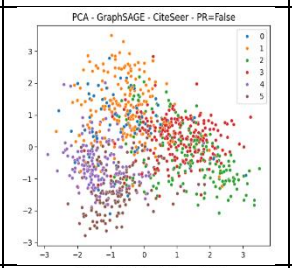
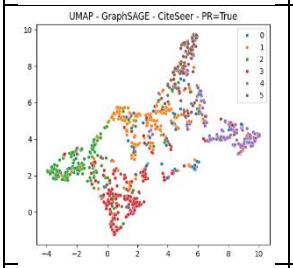
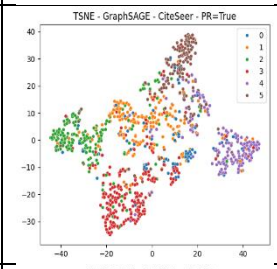
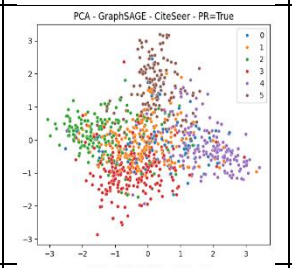
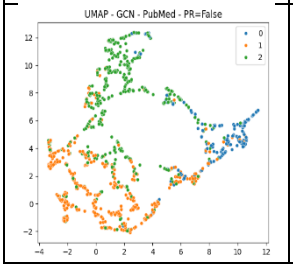
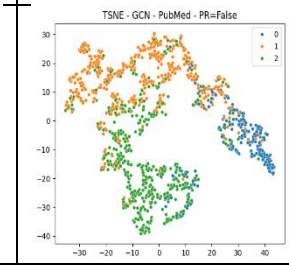
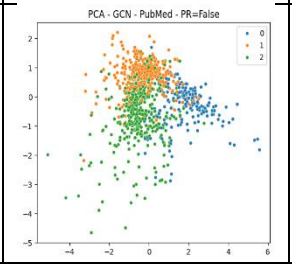
۵-۴ بصری‌سازی

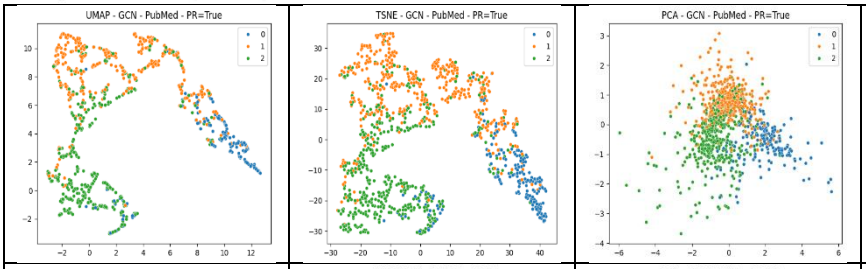
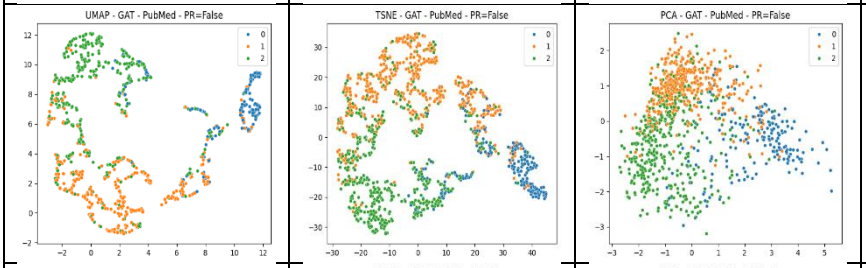
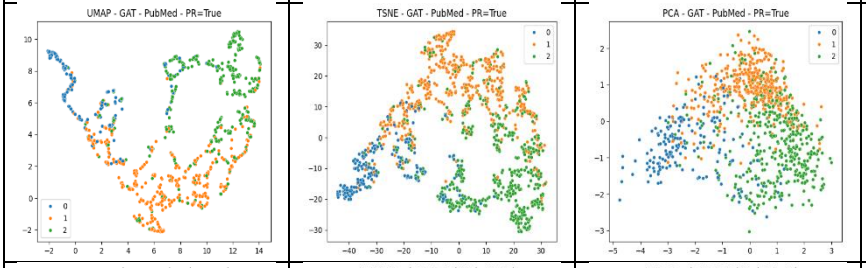
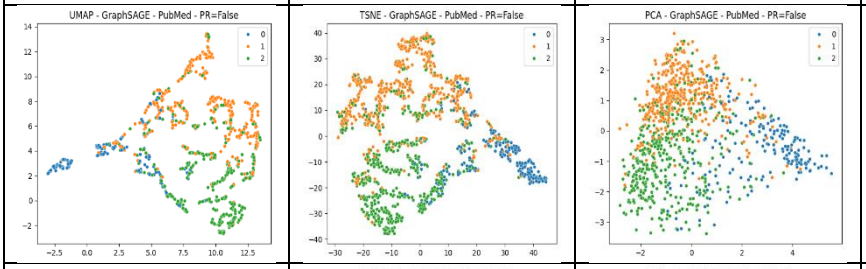
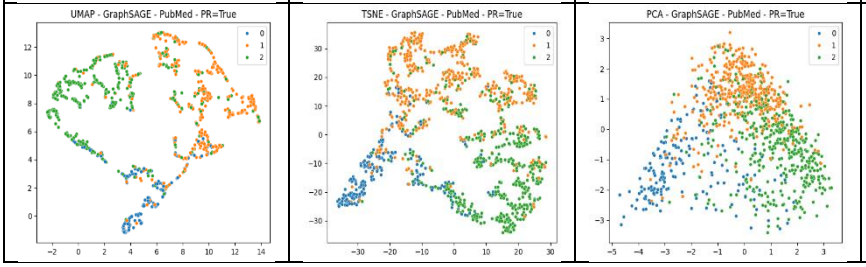
جدول (۴) مقایسه‌ای از کیفیت تعبیه‌سازی گره‌ها را با استفاده از سه روش کاهش بعد شامل روش تحلیل مؤلفه‌های اصلی، روش تعبیه همسایه‌های تصادفی با توزیع t و روش تقریب و تصویرسازی یکنواخت چندفرم نشان می‌دهد، در حالی که عملکرد این روش‌ها در دو حالت — با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank — مورد ارزیابی قرار گرفته است. تصاویر روش‌های نمایش داده‌های چندبعدی در فضایی با بعد کمتر از نمایش‌های گره‌های یادگرفته شده نشان می‌دهند که زمانی که PageRank در ویژگی‌ها وجود دارد، تفکیک‌پذیری کلاس‌ها بهتر می‌شود. خوشه‌های مربوط به کلاس‌های مختلف مشخص‌تر می‌شوند که نشان می‌دهد اطلاعات ساختاری اضافی قدرت تمایزی نمایش‌ها را افزایش داده است.

جدول (۴): مقایسه تعبیه‌سازی گره‌ها با الگوریتم‌های PCA، t-SNE و UMAP در شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank

مجموعه داده	مدل	PageRank	PCA	t-SNE	UMAP
Cora	GCN	بدون			

			با		
			بدون	GAT	
			با		
			بدون	GraphSAGE	
			با		
			بدون	GCN	CiteSeer

			با		
			بدون	GAT	
			با		
			بدون	GraphSAGE	
			با		
			بدون	GCN	PubMed

		با	
	GAT	بدون	
		با	
	GraphSAGE	بدون	
		با	

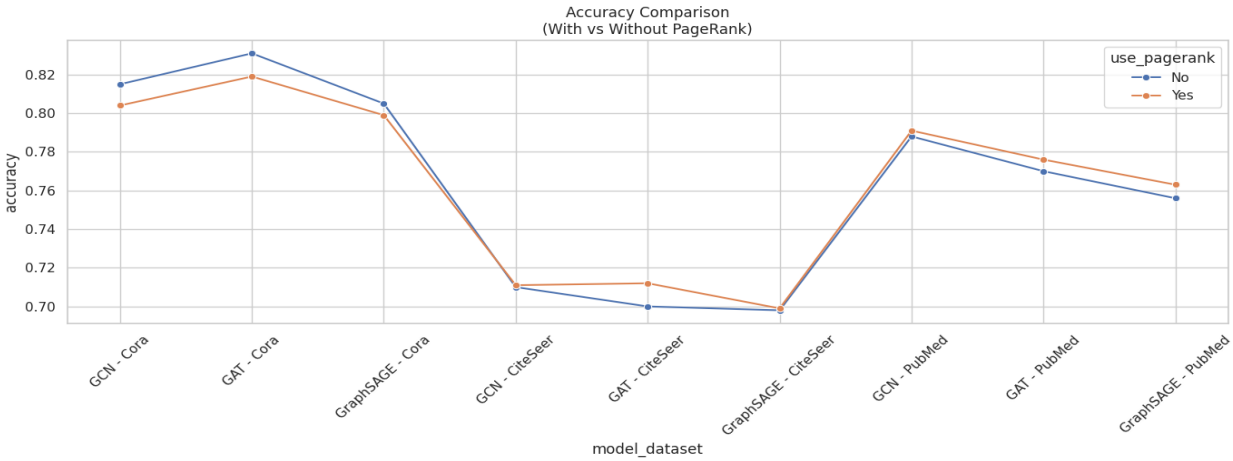
۵-۵ روندها در مجموعه داده‌ها

بهبود عملکرد در مجموعه داده‌هایی با تنوع ساختاری بیشتر مانند CiteSeerو PubMed برجسته‌تر است. در Coraکه توزیع کلاس‌ها یکنواخت‌تر است، بهبودها کوچک‌تر هستند اما همچنان مداوم.

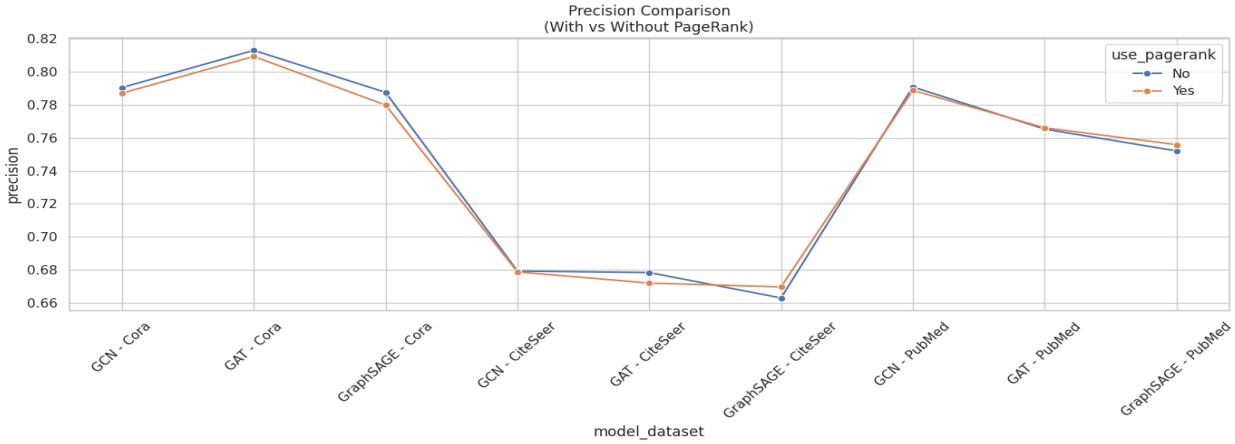
۵-۶ مقایسه با مدل‌های پایه

عملکرد شبکه‌های کانولوشنی گراف، شبکه‌های توجهی گراف و شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف را در هر سه مجموعه داده، همراه با افزونگی PageRank و بدون آن، مقایسه شده است. شکل (۱) نمودار خطی مقایسه صحت، شکل (۲) نمودار خطی مقایسه دقت، شکل (۳) نمودار خطی مقایسه

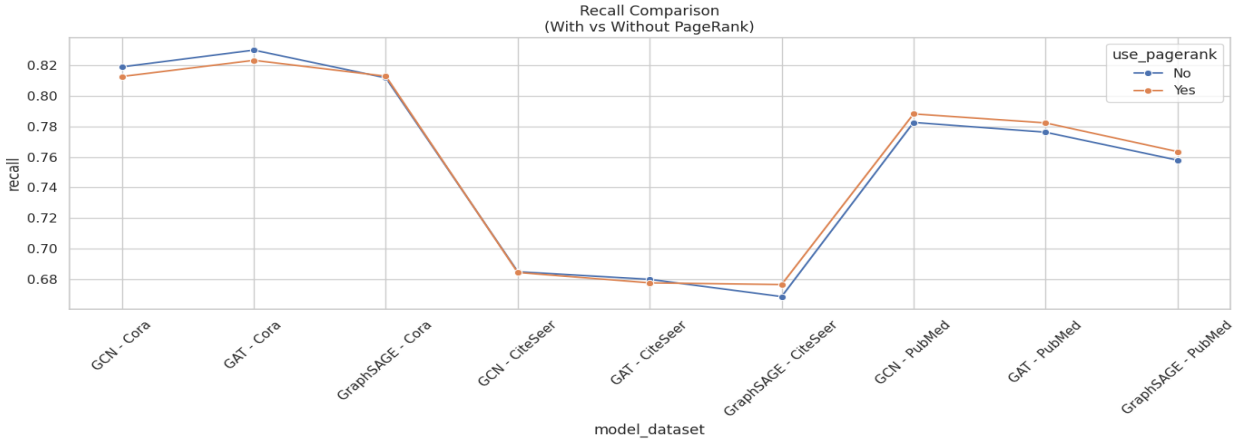
فراخوانی، شکل (٤) نمودار خطی مقایسه نمره F1، شکل (٥) نمودار حرارتی مقایسه معیارهای عملکرد شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank را نشان می‌دهد. این نمودارها به بررسی تأثیر الگوریتم PageRank بر پایداری و همگرایی مدل کمک می‌کند.



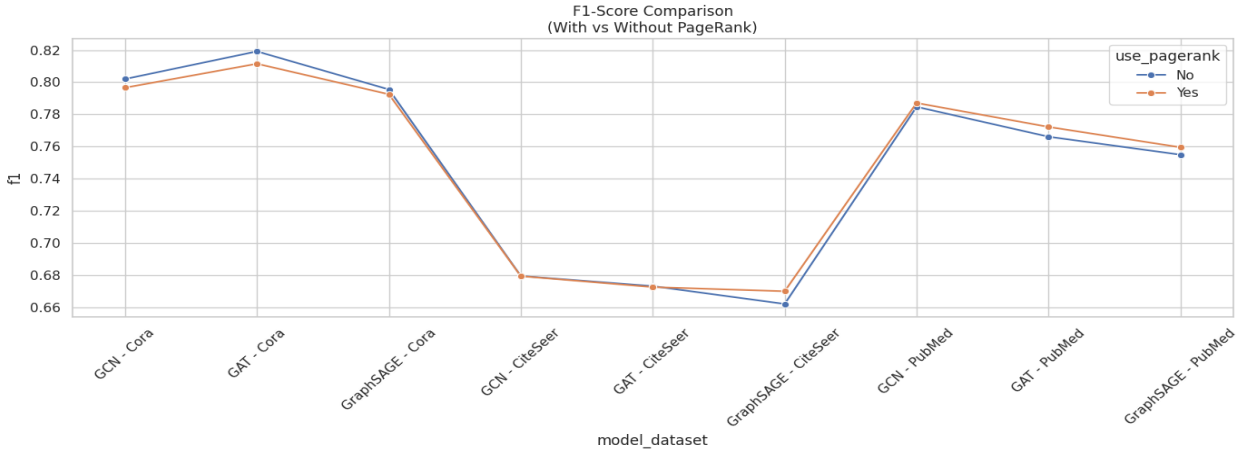
شکل (۱): نمودار خطی مقایسه صحت شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank



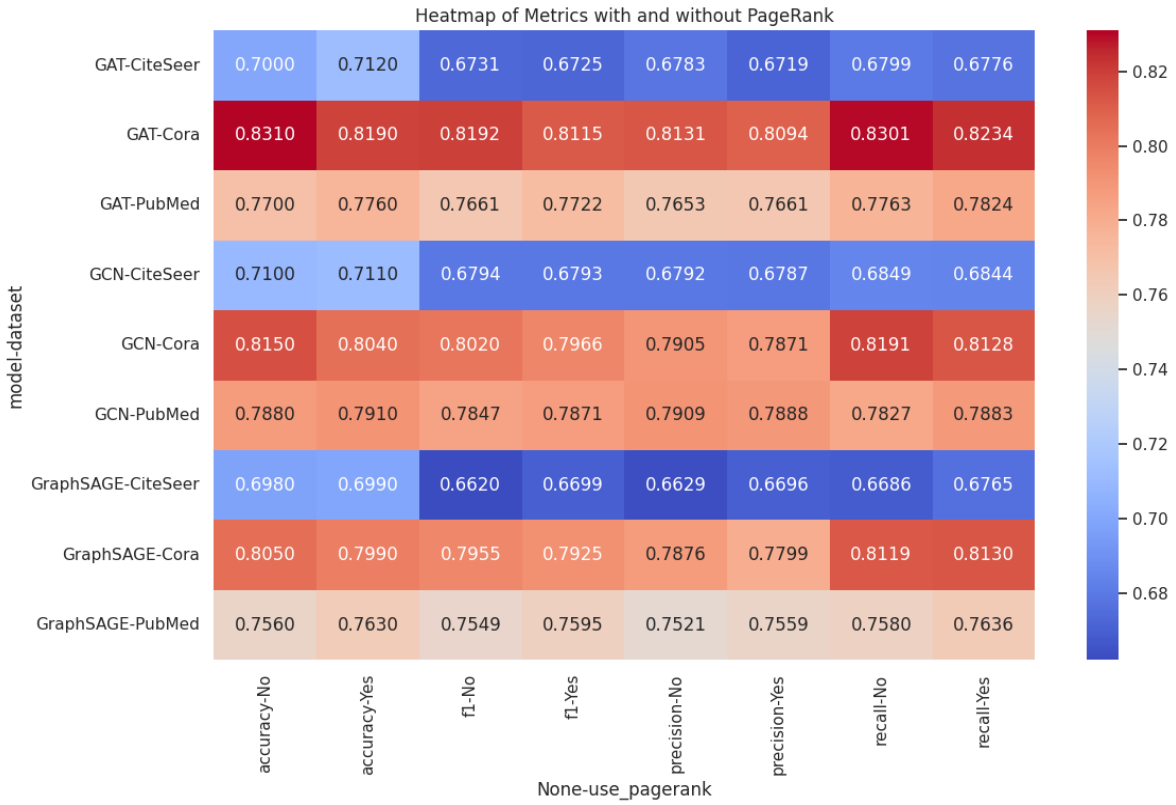
شکل (۲): نمودار خطی مقایسه دقت شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank



شکل (۳): نمودار خطی مقایسه فراخوانی شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank



شکل (٤): نمودار خطی مقایسه نمره F1 شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank



شکل (٥): نمودار حرارتی مقایسه معیارهای عملکرد شبکه‌های عصبی گراف با و بدون استفاده از الگوریتم PageRank

٥-٧ صحت و نمره F1

شبکه‌های توجهی گراف بیشترین بهبود را در صحت و نمره F1 نشان می‌دهد، سپس شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف و شبکه‌های کانولوشنی گراف. این نتایج نشان می‌دهند که مکانیسم توجه در شبکه‌های توجهی گراف به خوبی می‌تواند از زمینه جهانی فراهم شده توسط PageRank استفاده کند.

٥-٨ مشاهدات خاص برای هر مدل

شبکه‌های کانولوشنی گراف: از ویژگی اضافی بهره می‌برد اما به دلیل تکیه بر تجمیع ثابت همسایه‌ها، محدود است.

شبکه‌های توجهی گراف: از مکانیسم توجه برای تمرکز بر گره‌های مهم ساختاری استفاده کرده و تأثیر PageRank را تقویت می‌کند. شبکه‌های نمونه‌گیری و تجمیع از روی گراف: بهبودها محدود است، احتمالاً به دلیل طبیعت تصادفی نمونه‌برداری از همسایه‌ها.

۵-۹ مشاهدات خاص برای هر مجموعه داده

CiteSeer و PubMed: بیشترین بهبود را نشان می‌دهند که احتمالاً به دلیل وجود گره‌های مرکزی و گره‌های با ساختار متنوع است.
Cora: بهبودها کوچک‌تر هستند که به ساختار یکنواخت‌تر گراف مرتبط است.

۶- نتیجه‌گیری

این مطالعه نشان می‌دهد که افزونگی ویژگی‌های گره با استفاده از نمرات PageRank یک استراتژی ساده اما مؤثر برای بهبود صحت طبقه‌بندی گره در شبکه‌های عصبی گرافی است. آزمایش‌های ما در سه مجموعه داده معروف و با استفاده از سه معماری شبکه‌های عصبی گراف کلاسیک، بهبود مداوم عملکرد را نشان داده‌اند که بیشترین بهبود مربوط به شبکه توجهی گرافی است. افزودن PageRankقدرت تمایزی نمایش‌های گره‌ها را با تزریق اطلاعات ساختاری جهانی افزایش می‌دهد و مکانیسم‌های تجمیع محلی شبکه‌های عصبی گراف را کامل می‌کند.

اگرچه این روش آسان برای پیاده‌سازی است و هزینه محاسباتی ناچیزی دارد، اما بدون محدودیت نیست. مؤثر بودن افزونگی PageRankممکن است به خواص ساختاری گراف و انتخاب معماری شبکه‌های عصبی گراف بستگی داشته باشد. همچنین، این روش در گراف‌هایی که مرکزیت جهانی کمتر اطلاعات‌دهنده است یا ویژگی‌های گره از قبل بسیار تمایزی هستند، کمتر مؤثر خواهد بود.

کارهای آینده باید تلفیق سایر معیارهای مرکزیت، کاربرد در گراف‌های بزرگ‌تر یا ناهمگن، و ترکیب چندین ویژگی ساختاری را بررسی کنند. گونه‌های نیمه-ناظری و بدون ناظر، همراه با توسعه مکانیسم‌های انتخاب ویژگی تطبیقی، جهت‌های امیدوارکننده‌ای برای تحقیقات آینده هستند.

۷- کارهای آینده

بر اساس یافته‌های این مطالعه، چندین مسیر تحقیقاتی برای کارهای آینده پیشنهاد می‌شود:

۱- تلفیق معیارهای مرکزیت دیگر: افزودن معیارهایی مانند مرکزیت بینیت و مرکزیت بردار ویژه ممکن است اطلاعاتی مکمل نسبت به PageRank فراهم کند و عملکرد طبقه‌بندی گره را بهبود بخشد.

۲- کاربرد در گراف‌های بزرگ‌تر یا ناهمگن: اعمال این روش بر روی گراف‌های بزرگ‌مقیاس یا گراف‌های ناهمگن مانند گراف‌های دانش یا شبکه‌های اجتماعی با انواع مختلف گره و یال می‌تواند مقیاس‌پذیری و قابلیت تعمیم آن را آزمایش کند.

۳- ترکیب چندین ویژگی ساختاری: ترکیب چندین ویژگی ساختاری — احتمالاً از طریق انتخاب ویژگی یا مکانیسم‌های توجه — می‌تواند به مدل‌ها اجازه دهد تا به‌صورت تطبیقی از مهم‌ترین سیگنال‌ها برای هر وظیفه استفاده کنند.

۴- گونه‌های نیمه-ناظری یا بدون ناظر: بررسی گونه‌های نیمه-ناظری یا بدون ناظر این روش می‌تواند کاربرد آن را در شرایطی که داده‌های برچسب‌دار محدود است گسترش دهد.

۵- تحلیل نظری: بررسی بنیادین‌تری افزونگی ویژگی‌های ساختاری در شبکه‌های عصبی گراف می‌تواند بینشی نسبت به تعامل بین اطلاعات محلی و جهانی در یادگیری گراف فراهم کند.

References

[1] S. Zhang et al., "The combination of a graph neural network technique and brain imaging to diagnose neurological disorders: a review and outlook," Brain Sciences, vol. 13, no. 10, p. 1462, 2023.

[2] A. Sharma, S. Singh, and S. Ratna, "Graph neural network operators: a review," Multimedia Tools and Applications, vol. 83, no. 8, pp. 23413-23436, 2024.

[3] D. Klepl, M. Wu, and F. He, "Graph neural network-based eeg classification: A survey," IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering, vol. 32, pp. 493-503, 2024.

[4] J.-Y. Ryu, E. Elala, and J.-K. K. Rhee, "Quantum graph neural network models for materials search," Materials, vol. 16, no. 12, p. 4300, 2023.
[5] E. Chien, J. Peng, P. Li, and O. Milenkovic, "Adaptive universal generalized pagerank graph neural network," arXiv preprint arXiv:2006.07988, 2020.
[6] A. Roth and T. Liebig, "Transforming pagerank into an infinite-depth graph neural network," in Joint European conference on machine learning and knowledge discovery in databases, 2022: Springer, pp. 469-484.
[7] J. Gasteiger, A. Bojchevski, and S. Günnemann, "Predict then propagate: Graph neural networks meet personalized pagerank," arXiv preprint arXiv:1810.05997, 2018.
[8] A. Bojchevski et al., "Scaling graph neural networks with approximate pagerank," in Proceedings of the 26th ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery & data mining, 2020, pp. 2464-2473.
[9] S. Zhang, C. Wang, and J. Zhu, "A Dual Adaptive PageRank Graph Neural Network with Structural Augmentation," in 2024 9th International Conference on Computer and Communication Systems (ICCCS), 2024: IEEE, pp. 1356-1362.
[10] Q. Ma, Z. Fan, C. Wang, and H. Tan, "Graph mixed random network based on pagerank," Symmetry, vol. 14, no. 8, p. 1678, 2022.
[11] J. Choi, "Personalized pagerank graph attention networks," in ICASSP 2022-2022 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP), 2022: IEEE, pp. 3578-3582.
[12] S. Zhang et al., "A survey on graph neural network acceleration: Algorithms, systems, and customized hardware," arXiv preprint arXiv:2306.14052, 2023.

Journal of Applied And Basic Machine Intelligence Research (ABMIR)

Applied and Basic Machine Intelligence Research

Vol. 3, No. 1, Spring & Summer 2025, pp. 127 - 144

Improving Node Classification Accuracy in Graph Neural Networks Using PageRank as an Additional Node Feature

Hossein Hosseini [1*], Mehdi Naghavi [2]

[1] PhD's student in artificial intelligence and robotics, Faculty of artificial intelligence and cognitive sciences, Imam Hossein Comprehensive University, Tehran, Iran

[2]Assistant Professor, Faculty of artificial intelligence and cognitive sciences, Imam Hossein Comprehensive University, Tehran, Iran

Article Information

Original Research Paper

Received:
2025 May 27

Accepted:
2025 October 8

Keywords:
Graph Neural Networks, Node Classification, PageRank Score, Graph Convolutional Networks, Graph Attention Networks, GraphSAGE.

Corresponding Author*:
hosseinhosseini@ihu.ac.ir

Abstract

This paper presents a simple yet effective approach to enhance the performance of Graph Neural Networks (GNNs) in node classification tasks. The proposed method involves incorporating the PageRank score—a global centrality metric—into node feature vectors to integrate broader contextual information beyond local neighborhoods. To evaluate the approach, three well-known GNN architectures—Graph Convolutional Networks (GCNs), Graph Attention Networks (GATs), and GraphSAGE—are tested on the Cora, CiteSeer, and PubMed citation network datasets. Model performance is assessed using standard metrics such as accuracy, precision, recall, F1 score, along with visual analyses based on Principal Component Analysis (PCA), t-distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE), and Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP). Experimental results demonstrate that adding the PageRank score leads to a significant improvement in classification accuracy, particularly in GATs, which benefit more from the additional global information. Despite its simplicity, the proposed method incurs minimal computational overhead and delivers consistent and reliable performance across datasets. Finally, the paper discusses the potential extension of this strategy through the integration of other centrality measures and its application to larger or heterogeneous graphs.

: 10.22034/ABMIR.2025.23200.1130

E-ISSN: 2821-2037 /The Author 2025. Published by Yazd University This is an open access article under the CC BY 4.0 License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).