

УДК 004.89

Сравнительный анализ методов построения векторных представлений для подграфов больших графов

Балтаева Мадина^{1(*)}

madina_bltv@vk.com

Вишняков Игорь Эдуардович²

vishnyakov@bmstu.ru

SPIN-код: 5500-1834

Белова Наталья Сергеевна²

n.virtseva@bmstu.ru

SPIN-код: 3582-3061

¹ МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия² МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Аннотация. Рассмотрена задача эффективного построения векторных представлений для вершин неориентированных графов на основе их локальных подграфов. Представлено сравнение трех подходов: точного комбинаторного алгоритма PGD, нейросетевой модели ESC-GNN, использующей структурные признаки, и подграфовой нейронной сети (Subgraph-GNN) с развернутой архитектурой. Для тестирования использованы синтетические графы различных топологий. Представлено время работы и пиковое потребление памяти. Сделаны выводы о применимости каждого метода.

Ключевые слова: графы, локальные подграфы, векторные представления вершины, графовые и подграфовые нейронные сети, подсчет графлетов, вычислительная эффективность

Введение. Задача сравнения структурных характеристик графов является ключевой для многих областей. Одним из подходов к ее решению является построение для каждой вершины вектора признаков, описывающего ее локальную окрестность. Традиционные методы основаны на точном подсчете малых индуцированных подграфов (графлетов), однако они вычислительно затратны для больших графов. Перспективной альтернативой являются графовые нейронные сети. Цель работы — сравнительный анализ вычислительной эффективности трех методов построения векторных признаков.

Материалы и методы; результаты. Рассмотрим простой неориентированный граф $G = (V, E)$ фиксированный радиус h . Для каждой вершины $v \in V$ строится ее индуцированный подграф

$$S_v = G[N_h(v)], N_h(v) = \{u \in V : \text{dist}_G(u, v) \leq h\}.$$

Задача состоит в том, чтобы для каждого подграфа S_v получить его вектор признаков $f(S_v) \in \mathbb{R}^d$.

Первый метод формирования вектора признаков — точный комбинаторный алгоритм, сочетающий подсчет 3–5-вершинных графлетов алгоритмом PGD [1]. Второй метод, ESC-GNN [2], — гибридный подход, в котором графовая нейросеть предсказывает вектор графлетов на основе предварительно

вычисленных структурных векторных признаков ребер подграфа. Третий метод, Subgraph-GNN [3], использует архитектуру, вычислительный граф которой динамически строится на основе топологии подграфа S_v . Основные результаты замеров времени выполнения T (с) и пикового потребления памяти M (МБ) представлены в таблице.

Сравнение времени выполнения программы и пикового потребления памяти

Граф	V	E	Subgraph-GNN		PGD		ESC-GNN	
			T, с	M, МБ	T, с	M, МБ	T, с	M, МБ
Неплотный	458	457	1,9	187,43	4,05	29,7	8,7	1,5
Плотный	993	2574	32,9	203,31	46,98	32,13	165,64	3,65
Большой	88573	88572	296,5	352,92	798,56	217,5	>24 ч	—

Заключение. Нейросетевая модель Subgraph-GNN показывает минимальное время работы, но требует значительно больше памяти. Модель ESC-GNN, напротив, имеет минимальное потребление памяти, но уступает по скорости работы. Алгоритм PGD демонстрирует баланс характеристик при отсутствии этапа обучения.

Дополнительно проведено тестирование корректности модели Subgraph-GNN: косинусное сходство векторных признаков исходного и аугментированного графа составило 0,9945, тогда как для случайного графа — 0,2118. Это подтверждает устойчивость модели к незначительным изменениям структуры и ее чувствительность к топологическим различиям.

Список источников

- [1] Ahmed N.K., Neville J., Rossi R.A., Duffield N. Efficient graphlet counting for large networks. IEEE International Conference on Data Mining: conference proceedings. Atlantic City, NJ, USA, IEEE, 2015, <https://doi.org/10.1109/ICDM.2015.141>
- [2] Yan Z., Zhou J., Gao L., Tang Z., Zhang M. An Efficient Subgraph GNN with Provable Substructure Counting Power. Proceedings of the 30th ACM SIGKDD Conference on knowledge discovery and data mining. Barcelona, Spain, ACM, 2024. URL: <https://arxiv.org/pdf/2303.10576> (accessed 15.09.2025).
- [3] Frasca F., Bevilacqua B., Bronstein M.M., Maron H. Understanding and extending subgraph GNNs by rethinking their symmetries. 36th Conference on Neural Information Processing Systems: conference proceedings. New Orleans, Curran Associates, Inc., 2022. URL: <https://arxiv.org/pdf/2206.11140> (accessed 15.09.2025).