

**ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ GNN ТА RNN
У ЗАДАЧАХ РЕГРЕСІЙНОГО АНАЛІЗУ**

Авсітідійський М.М.

e-mail: mykyta.avsitidiiskyi@nure.ua

Науковий керівник – канд. техн. наук, доц. Гибкіна Н.В.
Харківський національний університет радіоелектроніки,
кафедра прикладної математики
м. Харків, Україна

This paper considers the application of graph neural networks for solving regression analysis problems. Modern information systems increasingly operate with complex multidimensional data that contain structural relationships between observations. Traditional regression models and classical neural networks often cannot fully take into account such dependencies. Graph neural networks allow representing data as graphs where nodes correspond to objects or system states and edges represent relationships between them. This approach enables more accurate modeling of complex systems. The paper analyzes the principles of graph neural networks and their advantages for regression tasks. Special attention is paid to attention-based architectures that allow adaptive weighting of neighboring nodes. The proposed approach can improve prediction accuracy in engineering and technical systems.

У сучасних інформаційних системах задачі регресійного аналізу займають важливе місце, оскільки дозволяють виконувати прогнозування, оцінювання та аналіз різноманітних процесів. Такі задачі широко застосовуються у технічній діагностиці, економічному прогнозуванні, аналізі часових рядів та багатьох інших сферах. Особливо актуальним є прогнозування технічного стану складних інженерних систем, де необхідно враховувати значну кількість параметрів та взаємозв'язків між ними. Традиційні методи регресійного аналізу, такі як лінійна або поліноміальна регресія, добре працюють для відносно простих залежностей. Проте у випадку складних багатовимірних даних вони часто не дозволяють отримати достатньо точні результати. Для вирішення цієї проблеми широко використовуються методи машинного навчання, зокрема нейронні мережі. Вони здатні апроксимувати складні нелінійні залежності та автоматично знаходити закономірності у даних.

Однак класичні нейронні мережі зазвичай працюють з даними у вигляді векторів або матриць і не враховують структурні зв'язки між окремими елементами вибірки. У багатьох прикладних задачах такі зв'язки мають важливе значення. Наприклад, стани технічної системи можуть бути пов'язані між собою часовою або функціональною залежністю. У таких випадках природною формою представлення даних є граф.

Графові нейронні мережі (Graph Neural Networks, GNN) є сучасним напрямом глибокого навчання, який дозволяє обробляти дані, представлені

у вигляді графових структур. У графі вершини відповідають об'єктам або станам системи, а ребра відображають взаємозв'язки між ними [1].

Головною ідеєю графових нейронних мереж є поетапне оновлення представлень вершин на основі інформації, отриманої від їхніх сусідів. Даний процес реалізується за допомогою механізму передачі повідомлень (message passing). На кожному шарі нейронної мережі вершина агрегує ознаки сусідніх вершин відповідно до заданого правила та використовує їх для оновлення власного стану:

$$\vec{h}_i^{(k)} = \text{UPDATE}(\vec{h}_i^{(k-1)}, \text{AGGREGATE}\{\vec{h}_j^{(k-1)} : j \in N(i)\}),$$

де $\vec{h}_i^{(k)}$ – вектор ознак вузла i на k -му шарі; $N(i)$ – множина його сусідів [2].

Для оцінювання ефективності запропонованої графової нейронної мережі було виконано порівняння з послідовнісною моделлю на основі рекурентної нейронної мережі LSTM, яка широко використовується для аналізу часових рядів і прогнозування деградації технічних систем.

Обидві моделі навчалися на однакових вхідних ознаках із використанням функції втрат Smooth L1 Loss. Якість регресії оцінювалася за допомогою метрик MSE, RMSE та MAE. Для навчання було використано один з репрезентативних для досліджуваної задачі набір даних.

У процесі навчання графова нейронна мережа демонструє швидке зменшення похибки на початкових етапах навчання, після чого значення метрик стабілізуються. Близькі значення похибки на навчальній та тестовій вибірках свідчать про хорошу узагальнювальну здатність моделі та відсутність суттєвого перенавчання.

Моделю LSTM також показує зменшення похибки на ранніх етапах навчання, однак на пізніших епохах спостерігається тенденція до перенавчання: похибка на навчальній вибірці продовжує зменшуватися, тоді як на тестовій вона стабілізується або дещо зростає. Отримані результати свідчать про те, що використання графових нейронних мереж дозволяє ефективніше враховувати структурні зв'язки між станами системи та забезпечує більш стабільні результати прогнозування порівняно з традиційними послідовнісними моделями.

Список використаних джерел:

1. Zhou J., Cui G., Hu S., Zhang Z., Yang C., Liu Z., Wang L., Li C., Sun M. Graph neural networks: A review of methods and applications // AI Open. 2020. Vol. 1. С. 1–26.
2. He J., Koric S., Abueidda D., Najafi A., Jasiuk I. Geom-DeepONet: A point-cloud-based deep operator network for field predictions on 3D parameterized geometries // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2024. Vol. 429. С. 1–19.