

УДК 004.81:37

DOI <https://doi.org/10.32782/IT/2024-1-9>

### **Арсеній М'ЯКЕНЬКИЙ**

аспірант кафедри програмного забезпечення комп'ютерних систем, Національний технічний університет «Дніпровська політехніка», просп. Дмитра Яворницького, 19, м. Дніпро, Україна, 49005  
ORCID: 0000-0002-4141-001X

**Бібліографічний опис статті:** М'якенький, А. (2024). Аналіз методів розв'язання задачі ізоморфізму при моделюванні когнітивного процесу розцінювання. *Information Technology: Computer Science, Software Engineering and Cyber Security*, 1, 73–79, doi: <https://doi.org/10.32782/IT/2024-1-9>

## **АНАЛІЗ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ІЗОМОРФІЗМУ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ КОГНІТИВНОГО ПРОЦЕСУ РОЗУМІННЯ**

Когнітивним процесом розуміння називають процес діяльності мозку людини, що відповідає за ідентифікацію об'єктів, пов'язуючи його з поняттям на основі відомих знань. Однією з важливих задач під час моделювання цього процесу є вибір методу представлення візуальних даних попри їх розмір, контраст, розташування у просторі тощо.

**Мета роботи.** Метою роботи є підвищення ефективності моделювання когнітивного процесу розуміння за рахунок використання графових даних для представлення візуальної інформації. За допомогою графових структур можна представити семантичну інформацію візуальних даних процесу розуміння у вигляді графа сцени, а сам процес представити як пошук аналогій серед сцен графа за допомогою розв'язання задачі ізоморфізму.

**Методологія.** Концепція ізоморфізму графів полягає у тому, що два графи вважаються однаковими у випадку, якщо між ними існує схожість у взаємозв'язках між їх вершинами та ребрами. Сучасними методами для розв'язання цієї концепції є WL-Test, графові нейронні мережі GIN, а також алгоритм графового контрастного навчання graphCL. Під час аналізу основна увага приділялася здатності методів зберігати семантичну інформацію при перетворенні графових даних, а також їх часової оцінки при роботі з великими графами, з якими частіше відбувається робота при представленні даних когнітивного процесу розуміння.

**Наукова новизна.** Запропоновано підхід щодо моделювання когнітивного процесу розуміння за допомогою розв'язання задачі ізоморфізму на графових структурах. Сучасні дослідження не надають єдиної думки про те, які методи використовувати для представлення візуальних даних при моделюванні процесу розуміння. Головним недоліком робіт, у яких представлені моделі розуміння зображень, є відсутність явного представлення даних, що не дозволяє відстежити та проаналізувати систему у випадку збою.

**Висновки.** Результати дослідження виявили ефективність методу graphCL для використання при моделюванні процесу розуміння. Ефективність полягає у тому, що перетворення, які використовуються у методі дозволяють зберігати семантичну інформацію графових даних, що є ключовим фактором для точності моделювання.

**Ключові слова:** когнітивна наука, когнітивний процес, граф сцени, ізоморфізм, WL-test, GIN, graphCL, уточнення кольорів.

### **Arsenii MIAKENKYI**

Postgraduate Student, Dnipro University of Technology, 19, Dmytra Yavornytskoho ave., Dnipro, Ukraine, 49005, [arseniy.myak@gmail.com](mailto:arseniy.myak@gmail.com)

ORCID: 0000-0002-4141-001X

**To cite this article:** Miakenkyi, A. (2024). Analiz metodiv rozvyazannya zadachi izomorfizmu pry modelyuvanni kognitivnogo procesu rozuminnya [Analysis of methods for solving the isomorphism problem in modeling the cognitive process of recognition]. *Information Technology: Computer Science, Software Engineering and Cyber Security*, 1, 73–79, doi: <https://doi.org/10.32782/IT/2024-1-9>

## **ANALYSIS OF METHODS FOR SOLVING THE ISOMORPHISM PROBLEM IN MODELING THE COGNITIVE PROCESS OF RECOGNITION**

The cognitive process of understanding refers to the brain activity responsible for identifying objects, associating them with concepts based on existing knowledge. One of the important tasks in modeling this process is choosing a method for representing visual data regardless of their size, contrast, spatial arrangement, etc.

**The aim of the work.** The aim of the work is to increase the effectiveness of modeling the cognitive process of understanding through the use of graph data to represent visual information. With the help of graph structures, it is possible to present the semantic information of the visual data of the comprehension process in the form of a scene graph, and the process itself can be represented as a search for analogies among the scenes of the graph using the solution of the isomorphism problem.

**The methodology.** The concept of graph isomorphism implies that two graphs are considered identical if there is similarity in the relationships between their vertices and edges. Modern methods for addressing this concept include the WL-Test, graph neural networks GIN, and the graph contrastive learning algorithm graphCL. During the analysis, the main attention was paid to the ability of methods to preserve semantic information during the transformation of graph data, as well as their time estimation when working with large graphs, which are more common in data representation of the cognitive understanding process.

**The scientific novelty.** An approach to modeling the cognitive process of understanding by solving the problem of isomorphism on graph structures is proposed. Current research does not provide a single opinion about which methods to use for visual data presentation when modeling the process of understanding. The main drawback of the works that present models of image understanding is the lack of explicit representation of data, which does not allow to track and analyze the system in the event of a failure.

**The conclusions.** The research results revealed the effectiveness of the graphCL method for use in modeling the understanding process. The effectiveness lies in the fact that the augmentations used in the method allow preserving the semantic information of graph data, which is a key factor for modeling accuracy.

**Key words:** cognitive science, cognitive process, scene graph, isomorphism, WL-test, GIN, graphCL, color refinement.

**Актуальність теми.** Основним дослідницьким питанням сучасної когнітивної науки є дослідження того, як саме мозок людини обробляє інформацію. Моделювання когнітивних процесів мозку людини вважається основним інструментом представлень та досліджень теорій пізнання. Згідно з багаторівневою еталонною моделлю головного мозку людини когнітивний процес розуміння це процес на вищому когнітивному рівні який відповідає за ідентифікацію об'єкта, пов'язуючи його з поняттям або категорією, або визначає поняття за відомими знаннями (Wang et al., 2006). Розуміння об'єктів і слів є типовими процесами розпізнавання, пов'язаними з представленням знань, навчанням, сприйняттям і пам'яттю. Однією з головних проблем, яку необхідно вирішити під час моделювання процесу розуміння, є побудова представлення візуальної інформації, яка дозволяє моделювати розуміння незалежно від розміру, контрасту, просторового розташування, кута зору тощо. У даній статті досліджується можливість використання графових даних для представлення даної інформації.

Графові структури дозволяють ефективно візуалізувати та аналізувати взаємозв'язки між різними когнітивними аспектами, що є ключовим для розробки точних та комплексних моделей. Один з основних аспектів використання графових даних – це можливість моделювання мережевої структури когнітивних процесів. Крім того, графові дані можуть бути використані для аналізу взаємодії між різними факторами, що впливають на когнітивні процеси. Наприклад, вони можуть містити в собі взаємозв'язки між зовнішніми стимулами, внутрішніми станами

у мозку та різними когнітивними функціями під час процесу розуміння.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.**

Аналіз останніх досліджень виявив тенденцію до використання графових моделей для аналізу візуальних даних, що є ключовим етапом моделювання когнітивного процесу розуміння. Так, у роботі Джонсона представлено використання графів сцен для опису зображень (Johnson et al., 2015), робота Янга запроваджує граматику для створення дерев діяльності для представлення дій людини (Yang et al., 2014), а робота Шустера пропонує алгоритм створення графів сцен з описів (Schuster et al., 2015). Однак ці репрезентації зображення не були розроблені з урахуванням їх використання в процесі міркування. Тому наступні дослідження з мали на меті вирішення цієї задачі. Наприклад Зітнік та Паріх у своїй роботі пропонують використання абстрактних зображень замість детальних з метою отримання семантичних даних та виявлення схожих сцен (Zitnick, Parikh, 2013). Робота Гао пропонує використання рекурентної мережі для розуміння зображення, кодування його у речення та відповіді на питання, що задається сценою (Gao et al., 2015). Але головним недоліком цих архітектур є відсутність явного представлення знань. Коли система дає неправильні результати, практично неможливо відстежити систему та проаналізувати випадок збою. Це зумовлює актуальність досліджень з розв'язання задачі представлення знань з подальшим їх використанням при моделюванні когнітивного процесу розуміння.

**Метою даної статті** є аналіз та вибір методів розв'язання проблеми ізоморфізму графів

для реалізації когнітивного процесу розуміння. У контексті моделювання когнітивного процесу розуміння дані можна представити як граф сцени, де вузлами є концепти, а зв'язки вказують на відносини між цими концептами. Графи сцени містять структуровану семантичну інформацію у візуальній сцені, і ця семантична інформація в основному відображається в представленнях об'єктів, атрибутів і парних зв'язків у зображеннях. Таким чином, процес розуміння може бути представлений, як пошук аналогій серед різних сцен графа, що є основною метою розв'язання задачі ізоморфізму.

**Викладення основного матеріалу.** У контексті роботи з графовими структурами, ізоморфізм означає концепцію, за якою два графи вважаються однаковими у випадку, якщо між ними існує схожість у взаємозв'язках між їх вершинами та ребрами (Grohe, Neuen, 2020). Це означає, що якщо можна знайти взаємно однозначне відображення між вершинами двох графів так, що структура графа зберігається, то ці графи є ізоморфними (рис. 1). Формально, два графи  $G_1$  і  $G_2$  є ізоморфними, якщо для кожної пари сусідніх вершин  $u$  і  $v$  у  $G_1$  існує відображення  $f$ , таке, що  $f(u)$  є сусідньою вершиною  $f(v)$  у  $G_2$ .

**Алгоритм WL-Test.** Найбільш популярним алгоритмом розв'язання задачі ізоморфізму є алгоритм Весфейлера-Лемана (Weisfeiler-Lehman Isomorphism Test або WL-Test), що використовує комбінаторну техніку для класифікації графів та інших реляційних структур (Weisfeiler, Lemman, 1968). Алгоритм також часто

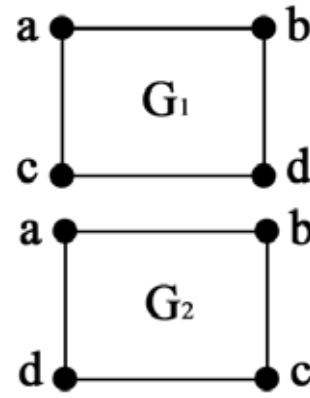


Рис. 1. Ізоморфні графи

називають процедурою уточнення кольорів, яка застосовується паралельно до двох вхідних графів з метою обчислення стійкого розфарбування множин їх вершин (рис. 2). Алгоритм виконується в ітеративний підхід та охоплює наступні кроки:

- На першому кроці кожній вершині графа присвоюється початковий колір.
- На кожній ітерації алгоритму кожна вершина отримує набір кольорів або міток її сусідів, які після цього порівнюються для кожної вершини.
- Якщо для вершини було знайдено два однакових набори, мітки цієї вершини оновлюються новим набором. Цей процес повторюється для всіх вершин.
- Останні два кроки повторюються з використанням попередніх результатів.

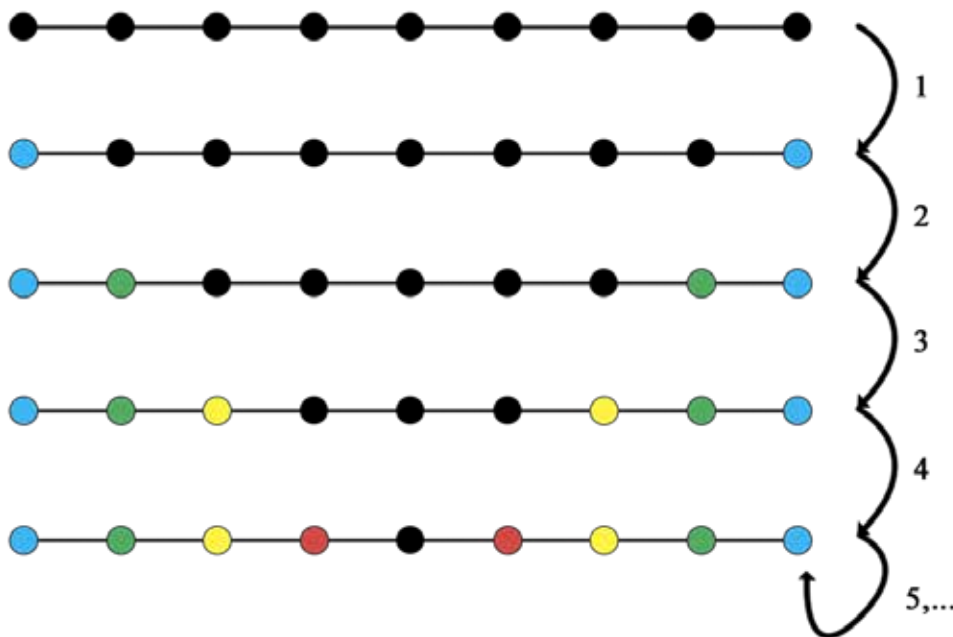


Рис. 2. Алгоритм уточнення кольорів

Для визначення ізоморфізму двох графів отримані результати порівнюються між собою. Якщо виявлені відмінності між наборами кольорів вершин графів, то такі графи вважаються неізоморфними.

Незважаючи на простоту реалізації алгоритму, головним недоліком алгоритму можна вважати залежність часу його виконання від розмірів вхідних графів. Для невеликих за розмірами графів час виконання алгоритму стає близьким до лінійного. Але для графів з великою кількістю вершин та складною структурою, з якими частіше відбувається робота при представленні даних когнітивного процесу розуміння зі складними зв'язками між ними, час виконання може зростати експоненційно (Huang, Villar, 2022). Таким чином даний алгоритм може виявитись не практичним при моделюванні процесу розуміння.

**Графова нейронна мережа GIN.** Розвиток графових нейронних мереж зумовив появу архітектур графових нейронних мереж, що використовують та покращують традиційні методи роботи з графовими даними (Zhou et al., 2020). Однією з таких архітектур є мережа ізоморфізму графів або GIN. Алгоритм роботи мережі заснований на концепції WL-test, дозволяючи застосовувати його для аналізу великих та складних наборів даних. Особливістю архітектури є використання процесу вбудовування вершин графа під час якого кожна вершина графа отримує векторне представлення, що зберігає її структурні та контекстуальні властивості (Xu et al., 2018). Для отримання вбудованих представлень, у графових нейронних мережах зазвичай використовують інші архітектури нейронних мереж, такі як згорткові або рекурентні мережі, які агрегують інформацію про вершину та її сусідів для генерації вбудовування вузла.

Надалі отримані агрегації використовуються для розпізнавання структурних властивостей вершин. Можна виділити наступні кроки роботи мережі GIN:

– На першому кроці кожен вузол на графі ініціалізується вектором функції.

– За допомогою алгоритму вбудовування, мережа обчислює векторні представлення вузлів, де кожен вузол об'єднує вектори ознак своїх сусідів.

– Агрегований вектор ознак перетворюється, як правило, з використанням лінійної трансформації з наступною нелінійною функцією активації. Перетворення містить параметр оптимізації, який дозволяє моделі контролювати важливість функцій вузла порівняно з функціями його сусідів.

– Останні два кроки повторюються для певної кількості шарів. З кожним шаром вузли об'єднують і перетворюють об'єкти з дедалі більшої околиці.

– Наприкінці, мережа використовує функцію зчитування для агрегування векторів ознак усіх вузлів на графі для отримання результату на рівні графа.

Використовуючи отримані представлення, модель виконує подальші порівняння, наприклад, за допомогою класифікатора, щоб визначити, чи є графи ізоморфними.

Як було зазначено вище головною перевагою GIN на відміну від WL тесту, на якому вона базується, є ефективна робота з графами, що містять велику кількість вузлів зі складною структурою завдяки здатності використовувати механізми швидкого та ефективного агрегування інформації про сусідні вузли. Недоліком використання цієї мережі для моделювання процесу розуміння може бути те, що отримані вбудовування вузлів можуть не завжди ефективно узагальнювати складні візуальні сцени або враховувати їх деталізацію та контекст. Це може призвести до втрати важливої інформації та зниження точності моделі.

**Графове контрастне навчання GraphCL.** Ще одним підходом до розв'язання задачі ізоморфізму є алгоритм графового контрастного навчання з перетвореннями для класифікації

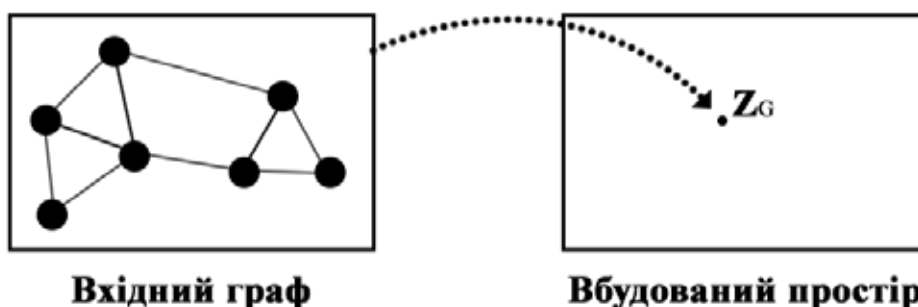


Рис. 3. Вбудовування вузлів

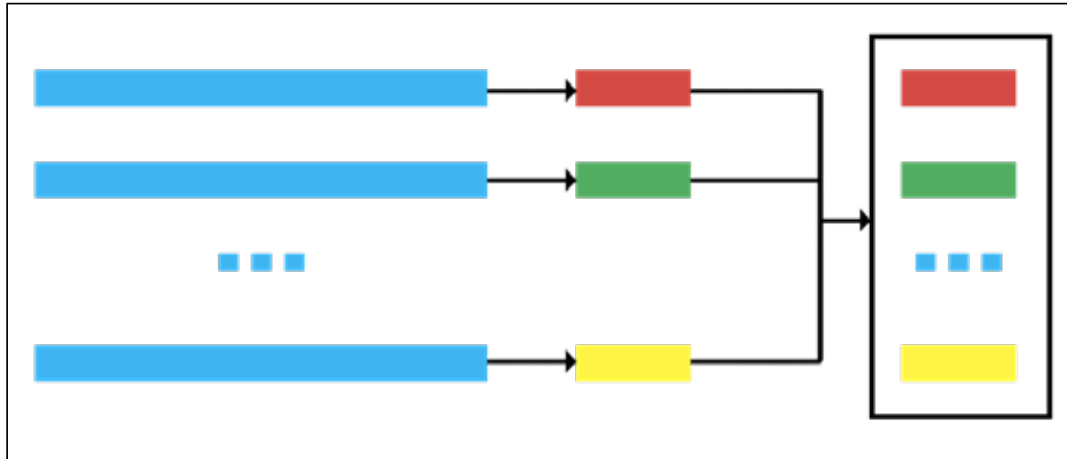


Рис. 4. Архітектура GIN

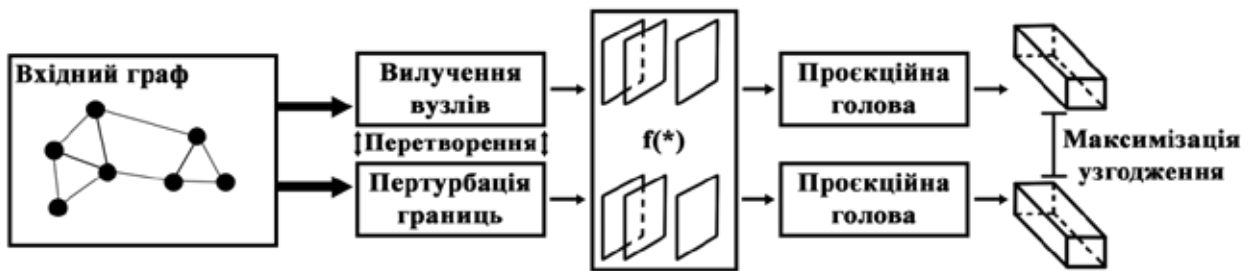


Рис. 5. Алгоритм GraphCL

графів. Алгоритм базується на ідеї використання контрастних механізмів, що використовуються при обробці зображень, та їх застосування на графових даних. Основна ідея алгоритму полягає у можливості розрізнити зв'язки в узгоджених представленнях графа, отриманих після належних перетворень (You et al., 2020).

У процесі перетворення графових даних отримуються нові представлення без впливу на семантику графа за аналогією перетворень при обробці зображень, коли при обрізанні або обертанні на виході отримуються однакові семантичні знання з повернутого зображення або його локальних фрагментів. Однак графові дані на відміну від зображень не мають однорідної структури, що зумовлює наявність декількох методів перетворень, що можуть бути ефективними за різних умов та задач використання.

Загалом при графовому контрастному навчанні використовують чотири типи перетворень: вилучення вузлів, пертурбація границь, маскування атрибутів та будівництво підграфу. При вилученні вузла графа випадково відкидається певна частина вершин разом із їхніми зв'язками з урахуванням незмінності семантики отриманого представлення. Пертурбація границь пов'язана зі зміною зв'язків у графі

через додавання або вилучення певного співвідношення ребер. Маскування атрибутів полягає у вилученні атрибутів вершин, спонукаючи моделі до їх відновлення, використовуючи їх контекстну інформацію, тобто атрибути, що залишилися.

Отримані представлення графів використовуються у алгоритмі контрастного навчання, який полягає в максимізації узгодженості між двома перетвореними представленнями одного графа через контрастні втрати в латентному просторі (рис. 5). Основними кроками алгоритму є:

- Отримання представлень графа, використовуючи один з типів перетворень.
- Виділення за допомогою кодеру векторних представлень отриманих графів з попереднього кроку. Кодер може використовувати будь-яку архітектуру GNN для побудови.
- Після цього отримані векторні репрезентації за допомогою проєкційної голови – алгоритму нелінійного перетворення відображаються в інший латентний простір для обчислення контрастних втрат пари представлень.
- Отримані втрати передаються до функції контрастних втрат, яка забезпечує максимальну узгодженість між позитивними парами

порівняно з негативними. Негативні пари генеруються з інших  $N - 1$  перетворених графів у межах тієї ж вибірки. Після цього обчислюється загальна функція втрат для всіх позитивних пар з вибірки. Прикладом такої функції може бути функція нормалізованої перехресної втрати ентропії з температурним масштабом (NT-Xent).

Перетворення графів є ключовим кроком при графовому контрастному навчанні. За відсутності перетворень обчислені втрати позитивних пар представлень будуть нульовими, що призведе до рівномірного віддалення всіх представлень графів одне від одного, зробивши неможливим класифікацію. З метою покращення продуктивності алгоритму рекомендовано використання комбінованих типів перетворень, що зумовлює уповільнення спадання функції втрат у порівнянні з парами того самого типу, коли процедура оптимізації залишається незмінною. Це дозволяє отримувати більш узагальнені представлення для класифікації.

Вибір типів перетворень безпосередньо залежить від структури графових даних. У дослідженнях графового контрастного навчання у соціальних мережах ефективні результати показали використання пертурбації границь, тоді як у дослідженні з біологічними мережами це призвело до погіршення продуктивності. Це пов'язано з тим, що сполуки молекул дуже чутливі до зміни зв'язків. Так видалення або додавання ковалентних зв'язків хімічної сполуки може різко змінити ідентичність і навіть дійсність сполуки, що робить метод пертурбації границь концептуально

несумісним для використання у даній предметній області (Zügner et al, 2018).

Графове контрастивне навчання є ефективним методом у сфері аналізу та класифікації графових даних. Однак ефективність та часова оцінка даного алгоритму безпосередньо залежить від обраних перетворень, а також розмірів оброблюваної графової інформації. У контексті моделювання когнітивного процесу розуміння алгоритм може бути ефективним порівнянні подібних концептів або сцен, що не є однаковими через використання перетворень, що дозволяють зберігати семантику сцен та концептів для порівняння.

**Висновки та перспективи подальших досліджень.** У даній статті був проведений аналіз перспектив використання графового підходу для моделювання когнітивного процесу розуміння. Аналіз предметної області дозволив виявити інтерес до використання графових даних, а саме графів сцен, для представлення знань при розв'язанні задач розуміння зображень. Було запропоновано моделювання процесу розуміння як розв'язання задачі ізоморфізму графових представлень різних сцен. З порівняння методів розв'язання задачі ізоморфізму був зроблений висновок про ефективність використання алгоритму графового контрастного навчання через наявність методів перетворення графових даних зі збереженням семантичної інформації. Наукова новизна отриманих результатів полягає у тому, що подібний підхід до моделювання процесу розуміння запропоновано вперше, що обумовлює перспективи подальшого дослідження у даній області.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. A layered reference model of the brain (LRMB) / Yingxu Wang et al. *IEEE transactions on systems, man and cybernetics, part C (applications and reviews)*. 2006. Vol. 36, no. 2. P. 124–133.
2. Image retrieval using scene graphs / J. Johnson et al. *2015 IEEE conference on computer vision and pattern recognition (CVPR)*, Boston, MA, USA, 7–12 June 2015. 2015.
3. A cognitive system for understanding human manipulation actions / Y. Yang et al. *Advances in cognitive systems* 3. 2014. Vol. 2. P. 67–86.
4. Generating semantically precise scene graphs from textual descriptions for improved image retrieval / S. Schuster et al. *Proceedings of the fourth workshop on vision and language*, Lisbon, Portugal. Stroudsburg, PA, USA, 2015.
5. Zitnick C. L., Parikh D. Bringing semantics into focus using visual abstraction. *2013 IEEE conference on computer vision and pattern recognition (CVPR)*, Portland, OR, USA, 23–28 June 2013. 2013.
6. Are you talking to a machine? Dataset and methods for multilingual image question answering / H. Gao et al. *Advances in neural information processing systems 28 : 29th Annual Conference on Neural Information Processing Systems 2015*, Montreal, 7–12 December 2015. 2015. P. 2296–2304.
7. Grohe M., Neuen D. Recent advances on the graph isomorphism problem. *Surveys in combinatorics 2021*. 2021. P. 187–234.
8. Weisfeiler B., Leman A. A reduction of a graph to a canonical form and an algebra arising during this reduction. *Nti*. 1968. Vol. 2, no. 9. P. 12–16.

9. Huang N. T., Villar S. A short tutorial on the weisfeiler-lehman test and its variants. *ICASSP 2021 – 2021 IEEE international conference on acoustics, speech and signal processing (ICASSP)*, Toronto, ON, Canada, 6–11 June 2021. 2021.
10. Graph neural networks: a review of methods and applications / J. Zhou et al. *AI open*. 2020. Vol. 1. P. 57–81.
11. How powerful are graph neural networks? / K. Xu et al. *ICLR 2019 : International Conference on Learning Representations*, New Orleans, 6–9 May 2019. 2019. P. 1–17.
12. Graph contrastive learning with augmentations / Y. You et al. *Advances in neural information processing systems*. 2020. Vol. 33. P. 5812–5823.
13. Adversarial attacks on graph neural networks / D. Zügner et al. *ACM transactions on knowledge discovery from data*. 2020. Vol. 14, no. 5. P. 1–31.

#### REFERENCES:

1. Yingxu, Wang, Ying Wang, Patel, S. & Patel, D. (2006). A layered reference model of the brain (LRMB). *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, Part C (Applications and Reviews)*, 36(2), 124–133.
2. Johnson, J., Krishna, R., Stark, M., Li, L.-J., Shamma, D. A., Bernstein, M. S. & Fei-Fei, L. (2015). Image retrieval using scene graphs. *Y 2015 IEEE conference on computer vision and pattern recognition (CVPR)*. IEEE.
3. Yang, Y., Aloimonos, Y., Guha, A. & Fermüller, C. (2014). A cognitive system for understanding human manipulation actions. *Advances in Cognitive Systems* 3, 2, 67–86.
4. Schuster, S., Krishna, R., Chang, A., Fei-Fei, L. & Manning, C. D. (2015). Generating semantically precise scene graphs from textual descriptions for improved image retrieval. *Y Proceedings of the fourth workshop on vision and language*. Association for Computational Linguistics.
5. Zitnick, C. L. & Parikh, D. (2013). Bringing semantics into focus using visual abstraction. *Y 2013 IEEE conference on computer vision and pattern recognition (CVPR)*. IEEE.
6. Gao, H., Mao, J., Zhou, J., & Huang, Z. (2015). Are you talking to a machine? Dataset and methods for multilingual image question answering. *Y Advances in neural information processing systems 28* (p. 2296–2304).
7. Grohe, M. & Neuen, D. (2021). Recent advances on the graph isomorphism problem. In *Surveys in combinatorics 2021* (p. 187–234). Cambridge University Press.
8. Weisfeiler, B. & Leman, A. (1968). A reduction of a graph to a canonical form and an algebra arising during this reduction. *Nti*, 2(9), 12–16.
9. Huang, N. T. & Villar, S. (2021). A short tutorial on the weisfeiler-lehman test and its variants. *Y ICASSP 2021 – 2021 IEEE international conference on acoustics, speech and signal processing (ICASSP)*. IEEE.
10. Zhou, J., Cui, G., Hu, S., Zhang, Z., Yang, C., Liu, Z., Wang, L., Li, C. & Sun, M. (2020). Graph neural networks: A review of methods and applications. *AI Open*, 1, 57–81.
11. Xu, K., Hu, W., Leskovec, J. & Jegelka, S. (2019). How powerful are graph neural networks? In *ICLR 2019* (p. 1–17).
12. You, Y., Chen, T., Sui, Y., Chen, T., Wang, Z. & Shen, Y. (2020). Graph contrastive learning with augmentations. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 33, 5812–5823.
13. Zügner, D., Borchert, O., Akbarnejad, A. & Günnemann, S. (2020). Adversarial attacks on graph neural networks. *ACM Transactions on Knowledge Discovery From Data*, 14(5), 1–31.