



2026, № 1

Журнал обчислювальної та  
прикладної математики  
*Заснований в 1965 році*



Journal of Numerical  
& Applied Mathematics

ISSN (Print): 2706-9680, ISSN (Online): 2706-9699

ЄДРПОУ видавця: 02070944

ROR: 02aaqv166

E-mail:  
jnameditorialteam@gmail.com

Головний редактор:  
Ляшко Сергій Іванович

Борисенко О.

---

# ГРАФОВО-НЕЙРОННИЙ МЕТОД ВИЯВЛЕННЯ КООРДИНАЦІЙНИХ СТРУКТУР У МЕРЕЖЕВИХ ДАНИХ

---

Адреса редакції:  
Кафедра обчислювальної математики,  
факультет комп'ютерних наук та кібернетики,  
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
Україна, 01601, Київ, вул. Володимирська, 64/13.

---

©Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 2026

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ 4246 від 26.05.2000  
Включено в Перелік наукових фахових видань у відповідності до Наказу МОН  
України № 409 від 17.03.2020

DOI: 10.17721/2706-9699.2026.1.01

УДК 004.932.2:004.89:519.7

MSC 68T07, 68R10

## GRAPH NEURAL NETWORK METHOD FOR DETECTING COORDINATION STRUCTURES IN NETWORK DATA

OLEKSANDR BORYSENKO

Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine, E-mail: borysenko@knu.ua,  
ORCID: 0009-0009-7852-3227

## ГРАФОВО-НЕЙРОННИЙ МЕТОД ВИЯВЛЕННЯ КООРДИНАЦІЙНИХ СТРУКТУР У МЕРЕЖЕВИХ ДАНИХ

ОЛЕКСАНДР БОРИСЕНКО

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна, E-mail:  
borysenko@knu.ua, ORCID: 0009-0009-7852-3227

**ABSTRACT.** The purpose of the article is to develop a graph neural network-based method for detecting coordination structures in network data based on graph topology analysis and machine learning techniques. The study is based on representing network data as an interaction graph, where vertices correspond to objects and edges represent their relationships. Structural representations of graph vertices are obtained using a GraphSAGE [4] graph neural network architecture, which aggregates information from the local neighborhood. The subsequent identification of coordination structures is performed using the density-based clustering algorithm DBSCAN [3] without an a priori specification of the number of clusters. The proposed method was evaluated on a synthetic network graph that reproduces key properties of real-world systems. Experimental results demonstrate high effectiveness of the approach: the average values of precision, recall, and F1-score for detecting coordination structures were 0.91, 0.98, and 0.94, respectively. The obtained results confirm the ability of the method to reliably identify dense coordination groups even in the absence of explicit individual anomalies. The proposed graph neural network-based method is universal, does not require fully labeled data, and can be integrated into large-scale network data analysis systems for detecting coordination structures in applied monitoring and information analytics tasks.

**KEYWORDS:** graph neural networks, network data, graph analysis, coordination structures, GraphSAGE, DBSCAN, clustering.

АНОТАЦІЯ. Метою статті є розробка графово-нейронного методу виявлення координаційних структур у мережевих даних на основі аналізу топології графів та методів машинного навчання. Дослідження ґрунтується на представленні мережевих даних у вигляді графа взаємодій, де вершини відповідають об'єктам, а ребра — їхнім зв'язкам. Для формування структурних представлень вершин використано графову нейронну мережу архітектури GraphSAGE [4], яка здійснює агрегацію інформації з локального оточення. Подальша ідентифікація координаційних структур виконується за допомогою алгоритму щільнісної кластеризації DBSCAN [3] без апріорного задання кількості кластерів. Запропонований метод перевірено на синтетичному мережевому графі, що відтворює характерні властивості реальних систем. Експериментальні результати показали високу ефективність підходу: середні значення precision, recall та F1-score для виявлення координаційних структур становили 0.91, 0.98 та 0.94 відповідно. Результати дослідження підтверджують здатність методу надійно ідентифікувати щільні координаційні групи навіть за відсутності явних індивідуальних аномалій. Запропонований графово-нейронний метод є універсальним, не потребує повної розмітки даних та може бути інтегрований у системи аналізу великих мережевих даних для виявлення координаційних структур у прикладних задачах моніторингу та інформаційної аналітики.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: графові нейронні мережі, мережеві дані, аналіз графів, координаційні структури, GraphSAGE, DBSCAN, кластеризація.

## 1. ВСТУП

Аналіз мережевих даних є однією з ключових задач сучасної обчислювальної математики, що виникає у широкому колі прикладних областей, зокрема при дослідженні складних взаємодіючих систем.

У таких системах об'єкти рідко функціонують ізольовано, натомість формують групи з узгодженими патернами взаємодії, які проявляються на структурному рівні мережі.

Виявлення подібних координаційних структур має принципове значення для задач моніторингу, аналізу аномалій та дослідження колективної поведінки у великих мережах.

У прикладних мережевих системах, зокрема соціальних платформах, координаційна поведінка часто реалізується через групи об'єктів, які демонструють синхронізовані або структурно узгоджені взаємодії. Такі групи не завжди можуть бути коректно ідентифіковані за індивідуальними характеристиками окремих вершин, оскільки їхня аномальність проявляється переважно у топології зв'язків та колективних патернах активності.

Це зумовлює необхідність переходу від індивідуальної класифікації об'єктів до аналізу мережевих структур як цілісних утворень.

Існуючі підходи до аналізу мережевих даних здебільшого ґрунтуються на використанні фіксованих ознак вершин або класичних методів аналізу графів. Хоча такі методи є обчислювально ефективними та добре інтерпретованими, їх можливості обмежені при виявленні складних нелінійних залежностей та латентних координаційних патернів у великих графах. Зокрема, більшість із них орієнтовані на локальні характеристики або потребують апріорного задання ознак і не забезпечують достатньої гнучкості для аналізу структурно неоднорідних мереж.

У цьому контексті перспективним є використання графових нейронних мереж — класу моделей машинного навчання, спеціалізованих для роботи з графовими даними. Такі моделі дозволяють автоматично формувати структурні представлення вершин шляхом агрегації інформації з їхнього оточення та виявляти складні залежності у топології графа. Проте більшість існуючих рішень із використанням графових нейронних мереж зосереджені на задачах класифікації окремих вершин і не повною мірою враховують проблему ідентифікації координаційних груп як структурних підграфів.

Отже, у сучасних дослідженнях наявний методологічний пробіл між можливостями графових нейронних мереж щодо екстракції структурних ознак та необхідністю автоматичного виявлення координаційних структур у мережевих даних без апріорного задання їх кількості. Усунення цього пробілу є актуальним і своєчасним завданням, що має як теоретичне, так і прикладне значення.

Метою даної роботи є розробка графово-нейронного методу виявлення координаційних структур у мережевих даних шляхом поєднання архітектури GraphSAGE [4] для формування структурних embedding-представлень вершин та алгоритму щільнісної кластеризації DBSCAN [3] для ідентифікації щільних груп.

У роботі подано формалізацію запропонованого підходу, проведено експериментальне дослідження його ефективності та окреслено можливості застосування методу в задачах аналізу великих мережевих систем.

## 2. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Аналіз аномальної та узгодженої поведінки у мережевих даних є важливим напрямом сучасних досліджень у галузі аналізу складних мереж. Узагальнені підходи до виявлення аномалій у графових структурах розглянуто в [1], де показано, що аномальні явища часто проявляються у вигляді структурних патернів, пов'язаних із топологією мережі.

Класичні методи аналізу графів та виявлення спільнот дозволяють ідентифікувати щільні підструктури, які відображають узгоджену поведінку груп вершин [2]. Проте більшість таких методів потребують апріорного задання кількості спільнот або ґрунтуються на фіксованих критеріях, що обмежує їх застосування для аналізу складних та неоднорідних мереж.

Окремий клас підходів становлять методи щільнісної кластеризації, зокрема алгоритм DBSCAN [3], який дозволяє виявляти кластери довільної

форми та відокремлювати шумові елементи без попереднього задання кількості кластерів. Це робить такі методи придатними для аналізу багатовимірних представлень мережевих об'єктів.

Подальший розвиток досліджень пов'язаний із застосуванням графових нейронних мереж, які забезпечують автоматичну екстракцію структурних ознак із топології графа.

Архітектура GraphSAGE [4] дозволяє формувати масштабовані embedding-представлення вершин, а узагальнений огляд сучасних графових нейронних мереж наведено у [5].

Незважаючи на ефективність графових нейронних мереж, більшість існуючих підходів орієнтовані на задачі класифікації окремих вершин.

Питання використання отриманих представлень для автоматичного виявлення координаційних структур як цілих підграфів залишається недостатньо дослідженим, що зумовлює доцільність комбінування графових нейронних мереж із методами щільної кластеризації.

### 3. МЕТА

Метою даного дослідження є розробка та обґрунтування графово-нейронного методу виявлення координаційних структур у мережевих даних на основі аналізу топології графа та методів машинного навчання.

### 4. МЕТОДИКА

**4.1. Формалізація задачі.** У межах дослідження мережеві дані розглядаються як складна система взаємодій, що формально моделюється у вигляді скінченного графа  $G = (V, E)$ , де  $V$  — множина вершин, що відповідають об'єктам мережі, а  $E \subseteq V \times V$  — множина ребер, які відображають факти взаємодії між ними. Під координаційною структурою розуміється підмножина вершин  $C \subset V$ , для якої характерна узгоджена поведінка, що проявляється у топології графа у вигляді підвищеної щільності зв'язків та структурної однорідності. Задача дослідження формулюється як задача виявлення таких підмножин без апріорного задання їх кількості.

**4.2. Побудова графової моделі та ознаки вершин.** На основі вихідних даних формується граф взаємодій, у якому ребра можуть бути зваженими, а їх вага відображає частоту або інтенсивність взаємодій між відповідними вершинами за заданий часовий інтервал. Для зменшення впливу випадкових подій допускається агрегація взаємодій у фіксовані часові вікна.

Для кожної вершини  $v_i \in V$  формується вектор початкових ознак  $x_i$ , що включає локальні топологічні характеристики (ступінь вершини, коефіцієнт кластеризації), а також агреговані показники активності. Ознаки нормалізуються для забезпечення порівнюваності між вершинами та використовуються як вхідні дані для графової нейронної мережі.

**4.3. Формування структурних представлень за допомогою архітектури GraphSAGE.** Для екстракції структурних ознак використовується графова нейронна мережа архітектури GraphSAGE [4], яка належить до класу індуктивних моделей. На кожному шарі мережі здійснюється агрегація інформації з локального оточення вершини  $v_i$ , що дозволяє враховувати багатокроковий мережевий контекст:

$$h_{\mathcal{N}(i)}^{(k)} = \text{AGGREGATE}^{(k)} \left( \left\{ h_j^{(k-1)} \mid j \in \mathcal{N}(i) \right\} \right),$$

де  $\mathcal{N}(i)$  позначає множину сусідів вершини  $v_i$ , а  $\text{AGGREGATE}^{(k)}(\cdot)$  — агрегуювальну функцію  $k$ -го шару.

Отримане агреговане представлення поєднується з власним представленням вершини та передається через нелінійну трансформацію:

$$h_i^{(k)} = \sigma \left( W^{(k)} \cdot \left[ h_i^{(k-1)} \parallel h_{\mathcal{N}(i)}^{(k)} \right] \right),$$

де  $\sigma(\cdot)$  — нелінійна функція активації,  $W^{(k)}$  — матриця параметрів шару, а  $\parallel$  позначає операцію конкатенації. Тут  $W^{(k)} \in \mathbb{R}^{d_k \times 2d_{k-1}}$  є матрицею параметрів  $k$ -го шару, а операція множення відповідає стандартному матричному множенню.

Після  $K$  шарів агрегації формується фінальне embedding-представлення вершини

$$z_i = h_i^{(K)},$$

яке кодує її структурний контекст та багатоступеневе оточення у графі. Навчання графової нейронної мережі здійснювалося у self-supervised режимі з використанням контрастивної функції втрат, у якій позитивні пари формуються виключно на основі сильних ребер графа (вага  $\geq 0.75$ ), а негативні пари — шляхом випадкового семплінгу вершин. Такий підхід дозволяє навчати модель без використання апріорної розмітки та орієнтуватися на структурні властивості мережі.

**4.4. виявлення координативних структур методом щільнісної кластеризації.** Embedding-представлення розглядаються як точки у багатовимірному евклідовому просторі. Для виявлення щільних груп застосовується алгоритм DBSCAN [3], який дозволяє ідентифікувати кластери довільної форми та відокремлювати шумові елементи.

Вибір DBSCAN [3] зумовлений відсутністю необхідності задавати кількість кластерів наперед, а також його стійкістю до нерівномірної щільності даних.

Параметри алгоритму підбираються на основі аналізу відстаней між embedding-представленнями та внутрішніх характеристик кластеризації.

Виявлені кластери інтерпретуються як потенційні координативні структури.

Серед виявлених кластерів додатково відбираються кандидати координативних структур за сукупністю критеріїв, що включають внутрішню щільність зв'язків, середню вагу ребер та розмір кластера. Кластери надмірно великого розміру, що не відповідають припущенню про локальну координативність, виключаються з подальшого аналізу.

**4.5. Постановка обчислювального експерименту.** Для експериментальної перевірки запропонованого підходу використано синтетичний мережевий граф, структура якого відтворює характерні властивості реальних мережевих систем. Обчислювальні експерименти проводилися серіями незалежних запусків з метою оцінювання стабільності результатів.

Якість виявлення координаційних структур оцінювалася з використанням метрик precision, recall та F1-score. Додатково застосовувалися методи візуалізації embedding-простору для аналізу просторового розподілу виявлених кластерів.

## 5. РЕЗУЛЬТАТИ

У результаті застосування запропонованого графово-нейронного методу було отримано структурні векторні представлення вершин мережевого графа, які відображають їхній мережевий контекст та локальну топологію взаємодій. Для кожної вершини сформовано embedding-представлення фіксованої розмірності, що використовувались для подальшого аналізу.

Застосування алгоритму щільнісної кластеризації DBSCAN [3] до embedding-простору дозволило автоматично виявити множину щільних кластерів без попереднього задання їх кількості.

У результаті кластеризації було ідентифіковано групи вершин з підвищеною внутрішньою щільністю, а також виділено значну кількість вершин, віднесених до шуму.

Проекція embedding-представлень у двовимірний простір за допомогою методу головних компонент (PCA) продемонструвала формування компактних та відносно ізольованих областей, що відповідають виявленим кластерам. Просторове розділення таких областей узгоджується з результатами кластеризації у багатовимірному просторі. Для кількісного оцінювання результатів виявлення координаційних структур використано метрики precision, recall та F1-score.

За результатами серії з п'яти незалежних запусків обчислювального експерименту середні значення метрик становили: precision — 0.91, recall — 0.98, F1-score — 0.94. Стандартне відхилення значень F1-score не перевищувало 0.06.

Отримані значення метрик свідчать про стабільність запропонованого підходу щодо виявлення координаційних структур у мережевих даних за різних реалізацій експериментальної постановки.

Зведені значення метрик якості наведено в Таблиці 1.

ТАБЛ. 1. Зведені результати якості виявлення координаційних структур

Метрика	Значення (mean $\pm$ std)
Precision	0.91 $\pm$ 0.11
Recall	0.98 $\pm$ 0.02
F1-score	0.94 $\pm$ 0.06

Результати візуалізації embedding-простору та кластеризації вершин подано на Рисунку 1, де показано розподіл вершин у просторі головних компонент та відповідність між виявленими кластерами і вихідними групами у синтетичному графі.

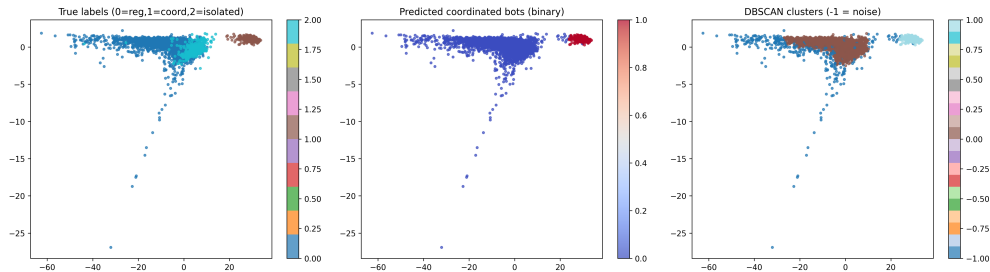


РИС. 1. Візуалізація embedding-простору та результатів кластеризації вершин

## 6. ОБГОВОРЕННЯ

У роботі запропоновано графово-нейронний підхід до виявлення координаційних структур у мережевих даних, що поєднує екстракцію структурних ознак за допомогою графової нейронної мережі та подальшу ідентифікацію щільних груп методом кластеризації. Експериментальні результати підтверджують можливість виявлення координаційних структур на основі топологічних властивостей мережі без необхідності апріорного задання кількості груп або повної розмітки даних.

Порівняння запропонованого підходу з існуючими методами аналізу мережевих даних свідчить, що класичні алгоритми виявлення спільнот та аномалій ефективні для задач із чітко вираженими структурними патернами, однак їх застосування ускладнюється у випадках складних та маскованих координаційних взаємодій. На відміну від них, графові нейронні мережі дозволяють автоматично формувати багатовимірні структурні представлення, що узгоджується з результатами попередніх досліджень у галузі аналізу графів і машинного навчання. Водночас запропонована стратегія має низку обмежень. По-перше, ефективність методу залежить від якості побудови графової моделі та вибору початкових ознак вершин. По-друге, параметри алгоритму щільної кластеризації можуть впливати на результати виявлення структур, що потребує додаткових процедур автоматичного налаштування. Крім того, використання синтетичних даних не дозволяє повною мірою оцінити поведінку методу в умовах реальних, шумових мереж.

Зазначені обмеження окреслюють напрями подальших досліджень. Перспективним є розширення запропонованого підходу на динамічні графи з урахуванням часової еволюції зв'язків, а також дослідження методів адаптивного вибору параметрів кластеризації.

Окрему увагу доцільно приділити інтеграції запропонованого методу з напівконтрольованими або самоорганізованими підходами для підвищення

стійкості до шуму та неоднорідності даних. З теоретичної точки зору отримані результати демонструють ефективність поєднання графових нейронних мереж із методами щільнісної кластеризації для аналізу структурних властивостей мережевих даних. З практичної точки зору запропонований підхід може бути використаний як універсальний інструмент для виявлення координаційних структур у задачах моніторингу, інформаційної аналітики та аналізу складних мережевих систем.

## 7. Висновки

У роботі розроблено графово-нейронний метод виявлення координаційних структур у мережевих даних, що поєднує екстракцію структурних ознак за допомогою архітектури GraphSAGE [4] та щільнісну кластеризацію embedding-представлень методом DBSCAN [3]. Запропонований підхід орієнтований на аналіз топології графа та не потребує апріорного задання кількості координаційних груп або повної розмітки даних.

У межах обчислювального експерименту на синтетичному мережевому графі продемонстровано здатність методу ефективно виявляти щільні координаційні структури. Значення метрик precision, recall та F1-score підтверджують стабільність і відтворюваність результатів, а також доцільність використання запропонованого підходу для аналізу мережевих даних. Отримані результати свідчать про перспективність використання графових нейронних мереж у поєднанні з методами кластеризації для дослідження координаційних патернів у складних мережах та можуть слугувати основою для подальших теоретичних і прикладних досліджень у цій галузі.

Автор заявляє про відсутність конфлікту інтересів щодо публікації цієї статті.

## ЛІТЕРАТУРА

1. Akoglu L., Tong H., Koutra D. Graph-based anomaly detection and description: a survey. *Data Mining and Knowledge Discovery*. 2015. 29. P. 626–688. <https://doi.org/10.1007/s10618-014-0365-y>
2. Fortunato S. Community Detection in Graphs. *Physics Reports*. Volume 486, Issues 3–5, February 2010, Pages 75–174. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2009.11.002>
3. Ester M., Kriegel H.-P., Sander J., Xu X. A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise. *KDD'96: Proc. of the Second Inter. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining*. 1996. P. 226–231.
4. Hamilton W. L., Ying Z., Leskovec J. Inductive Representation Learning on Large Graphs. arXiv:1706.02216. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1706.02216>
5. Wu Z., Pan S., Chen F., Long G., Zhang C., Yu P.S. A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*. Vol. 32. No. 1. P. 4–24, Jan. 2021.

Надійшла: 20.01.2026 / Переглянута: 23.02.2026 /  
Прийнята: 10.04.2026 / Опублікована: 24.04.2026