

# Cebirsel Çizge Değişmezleri ve GNN Gömülerinin Hibrit Füzyonu: Homofilik ve Heterofilik Rejimlerde Karşılaştırmalı Bir Analiz ve Eleştiri

Ahmet Çolak

Uluslararası Bilgisayar Enstitüsü, Bilgi Teknolojileri Anabilim Dalı

Ege Üniversitesi

İzmir, Türkiye

91250000780@ogrenci.ege.edu.tr

**Özet**—Çizge Sinir Ağları (GNN) yapısal verilerde güçlü olsa da, mesaj iletiminin yerel doğası küresel yapısal bilgiyi eksik kodlar. Bu rapor, 2 katmanlı GNN kodlayıcısından (GCN/GIN) elde edilen düğüm gömülerini, normalize Laplacian’ın en küçük  $k$  özdeğerleriyle (cebirsel çizge değişmezleri) birleştiren hibrit bir öznitelik füzyonunu inceler. Yöntem, homofilik bir graf-düzeyi görevde (ZINC12K) umut vaat etse de, heterofilik düğüm-düzeyi görevde (WebKB Texas) ciddi istatistiksel yanlışlar ortaya çıkar: “Algebraic-only” özniteliklerinin görünür yüksek doğruluğu çoğunluk sınıfı tahmininin bir yan ürünüdür; hibrit füzyon, spektral vektörün tüm düğümlere özdeş yayınlanması nedeniyle GNN-yalnız performansını birebir kopyalar. GDA tekil kovaryans nedeniyle başarısız olur, düşük F1-Makro değerleri ise ağır sınıf dengesizliğine işaret eder. Bulgular, cebirsel değişmezlerin düğüm-düzeyi heterofilik görevlerde olduğu gibi kullanımının geçersiz olduğunu ve değerlendirme protokolünün iyileştirilmesi gerektiğini gösterir.

**Anahtar Kelimeler**—Çizge Sinir Ağları, Cebirsel Çizge Değişmezleri, Spektral Graf Teorisi, Laplacian Özdeğerleri, Fiedler Değeri, Hibrit Öznitelik Füzyonu, GCN, GIN, Heterofili, Gaussian Diskriminant Analizi.

## I. GİRİŞ

Çizge Sinir Ağları (GNN), sosyal ağlardan moleküler kimyaya, bilgi çizgelerinden ulaşım tahminine kadar uzanan geniş bir alanda yapısal veriler üzerinde temsil öğrenme (representation learning) için fiili standart haline gelmiştir [1]. Bu modellerin ayırt edici özelliği, her düğümün komşuluk yapısını mesaj iletimi (message passing) mekanizmasıyla yinelemeli biçimde toplaması ve böylece bağlamsal bir temsil üretmesidir. Katman sayısı  $l$  arttıkça düğümün etki alanı (receptive field) genişlemekte, teorik olarak daha zengin bilgiye erişim mümkün olmaktadır.

Ancak bu mekanizma matematiksel açıdan bir alçak geçiren filtre (low-pass filter) gibi davranmakta; katman sayısı arttıkça bağlı bir çizgenin tüm düğüm öznitelikleri komşuluk matrisinin baskın özvektörüne yakınsamaktadır. Aşırı düzleştirme (oversmoothing) olarak adlandırılan bu olgu, farklı sınıflara ait düğümlerin ayırt edilemez hale gelmesine ve modelin sınıflandırma gücünün kaybolmasına

yol açar [2]. Pratikte bu durum, küresel yapısal bilgiyi yakalamak için derin GNN'lere başvurmanın hem hesaplama maliyeti hem de oversmoothing riski açısından cazip olmadığı anlamına gelir.

Bu rapor, söz konusu yerel-küresel bilgi ikilemini farklı bir açıdan ele alan bir hibrit yaklaşımı incelemektedir: küresel bilgiyi mesaj iletimi yoluyla *öğrenmek* yerine, çizgenin normalize edilmiş Laplacian operatöründen analitik olarak türetilen cebirsel değişmezleri (en küçük  $k$  özdeğer) doğrudan öznitelik olarak *enjekte etmek*. Böylece sığ bir kodlayıcının (2 katmanlı GCN/GIN) ürettiği yerel gömü ile sabit (öğrenilmeyen) spektral imza birleştirilmekte; derin GNN'ye gerek kalmadan küresel bağlam temsile katılmaktadır [4]. Sezgisel olarak, GNN gömüsü  $\mathbf{h}_v$  düğümün “kim olduğunu”,  $\{\lambda_i\}$  özdeğerleri ise “hangi yapı içinde bulunduğunu” kodlar.

Çalışmanın asıl odağı, bu yaklaşımın *ne zaman işe yaradığını ve ne zaman yanıltıcı olduğunu* titizlikle ortaya koymaktır. İki tamamlayıcı veri seti üzerinde — homofilik, graf-düzeyi ZINC12K ve heterofilik, düğüm-düzeyi WebKB Texas — yürütülen deneyler, “başarılı görünen” sonuçların ardındaki istatistiksel ve uygulamalı yanlışları açığa çıkarmaktadır. Özellikle, graf-düzeyi tek bir spektral vektörün düğüm-düzeyi bir göreve *broadcast* edilerek kullanılmasının nasıl bir çoğunluk-sınıfı çöküşüne (collapse) yol açtığını ve hibrit füzyonun bu rejimde neden hiçbir katma değer sağlamadığını matematiksel olarak gerekçelendiriyoruz.

## II. ARKA PLAN VE İLGİLİ ÇALIŞMALAR

### A. Mesaj İletimi ve GCN Formülasyonu

Bir çizge  $G = (V, E)$ ,  $N = |V|$  düğüm ve  $M = |E|$  ayrıt barındırsın; düğüm öznitelik matrisi  $\mathbf{H}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N \times d}$  olsun. Kipf ve Welling tarafından önerilen Çizge Evrişimli Ağ (GCN), öz-döngü eklenmiş ( $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{I}$ ) ve simetrik normalize edilmiş mesaj iletim kuralını kullanır [2]:

$$\mathbf{H}^{(l+1)} = \sigma\left(\tilde{\mathbf{D}}^{-1/2} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-1/2} \mathbf{H}^{(l)} \mathbf{W}^{(l)}\right) \quad (1)$$

Burada  $\tilde{\mathbf{D}}$   $\tilde{\mathbf{A}}$ ’nın diyagonal derece matrisi,  $\mathbf{W}^{(l)} \in \mathbb{R}^{d \times d'}$  öğrenilebilir ağırlık matrisi ve  $\sigma$  doğrusal olmayan aktivasyon (ReLU) fonksiyonudur.  $\tilde{\mathbf{D}}^{-1/2} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-1/2}$  çarpımı,

komşuların özelliklerinin derece-normalize edilmiş bir ağırlıklı ortalamasını almaya karşılık gelir ve dolayısıyla doğası gereği bir yumuşatma operatörüdür.

### B. Aşırı Düzleştirme ve Spektral Yorum

$l$  katmanlı bir GCN'in çıktısı, normalize edilmiş Laplacian  $\tilde{\mathbf{L}} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-1/2}$  operatörünün özdeğer ayrışımına dayalı bir polinom filtre uygulamasına eşdeğerdir.  $\tilde{\mathbf{L}}$  özdeğerleri  $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N \leq 2$  aralığında yer aldığından, tekrarlanan mesaj iletimi düşük frekanslı (düzgün) bileşenleri yükseltirken yüksek frekanslı (süresizlik) bileşenleri sönümler.  $l \rightarrow \infty$  olduğunda tüm temsiller baskın özvektöre yakınsar ve karar sınırı yok olur [2].

### C. Homofilik ve Heterofilik Çizgeler

Bir çizgenin homofili oranı

$$h = \frac{|\{(u, v) \in E : y_u = y_v\}|}{|E|} \quad (2)$$

ile tanımlanır;  $h \approx 1$  güçlü homofiliyi,  $h \approx 0$  güçlü heterofiliyi gösterir. ZINC12K gibi moleküler çizgeler yüksek  $h$  değerine sahiptir ve mesaj iletimi sınıf-İçi özellikleri pekiştirir. Buna karşın WebKB Texas ( $h \approx 0.11$ ) güçlü heterofiliktir: karar sınırlarındaki ayrıtlar farklı sınıflara ait düğümleri bağlar ve mesaj iletimi temsilleri kirletir. Bu rapor bilinçli olarak bu iki uç rejimi seçerek hibrit yaklaşımın genelleme davranışını her iki ekseninde de değerlendirmektedir.

### D. Cebirsel Çizge Değişmezleri

Spektral graf teorisi, bir çizgenin yapısal özelliklerini Laplacian spektrumuyla ilişkilendirir [4]. Normalize Laplacian'ın en küçük özdeğerleri çizgenin küresel bağlantırlık ve kümelenme yapısını kodlar; özellikle ikinci en küçük özdeğer  $\lambda_2$  (*Fiedler değeri*) cebirsel bağlantırlık (algebraic connectivity) olarak bilinir ve çizgenin ne kadar "iyi bağlı" olduğunun bir ölçütüdür [5].  $\lambda_2$ 'nin sifıra yakınlığı zayıf bağlantırlığa ya da iki yoğun kümeye ayrılma eğilimine işaret eder. Bu rapordaki yaklaşım, en küçük  $k$  özdeğeri ( $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ ) bir *cebirsel imza* olarak çıkarıp temsile enjekte etmeyi önerir; böylece çizgenin küresel yapısı, mesaj iletiminin yerel doğasını telafi edecek biçimde modele aktarılır.

## III. HIBRIT MODEL: GNN GÖMÜSÜ + CEBİRSEL DEĞİŞMEZLER

Bu bölümde, incelenen hibrit mimarinin dört bileşeni ile bunların referans uygulamadaki (Python) matematiksel karşılıkları ele alınmaktadır.

### A. Bileşen 1 — GNN Kodlayıcı

Kodlayıcı, denklem (1)'deki kurala uyan iki GCN katmanından oluşur: GCNConv( $d_{\text{in}} \rightarrow 64$ ), ReLU,  $p=0.5$  olasılıklı dropout ve GCNConv( $64 \rightarrow 32$ ). İkinci katmanın çıktısı düğüm gömüsü olarak alınır:

$$\mathbf{h}_v = \mathbf{Z}_{v,:} \in \mathbb{R}^{32}, \quad \mathbf{Z} = \text{GCN}_{\theta}(\mathbf{X}, \mathbf{A}). \quad (3)$$

Bir doğrusal sınıflandırma başlığı yalnızca kodlayıcıyı uçtan uca eğitmek için kullanılır; değerlendirme aşamasında gömü  $\mathbf{h}_v$  dışsal sınıflandırıcılara devredilir. Alternatif kodlayıcı olarak GIN, toplam (sum) agregasyonlu enjekte edici Weisfeiler–Lehman katmanlarıyla desteklenmektedir [3]:

$$\mathbf{h}_v^{(l+1)} = \text{MLP}^{(l)} \left( (1 + \epsilon^{(l)}) \mathbf{h}_v^{(l)} + \sum_{u \in \mathcal{N}(v)} \mathbf{h}_u^{(l)} \right). \quad (4)$$

### B. Bileşen 2 — Laplacian Spektral Öznitelikler

Her çizge için simetrik komşuluk matrisinden (özdöngüler kaldırılarak) normalize Laplacian  $\mathbf{L} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-1/2}$  oluşturulur ve en küçük  $k$  özdeğer hesaplanır:

$$\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k], \quad 0 = \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_k, \quad k = 8. \quad (5)$$

Referans uygulamada bu vektör,  $n > k$  için `eigsh(., which="SM")` (en küçük büyüklük) ile, aksi halde tam özçözümle elde edilir ve  $k=8$  uzunluğuna sıfırla doldurulur (zero-padding). Kritik nokta şudur: hesaplanan  $\boldsymbol{\lambda}$  tüm çizgeye ait tek bir küresel vektördür; düğüme özgü değildir. Düğüm-düzeyi görevlerde bu vektör tüm düğümlere genişletilerek (broadcast) atanır:

$$\mathbf{x}_v^{\text{alg}} = \boldsymbol{\lambda} \quad \forall v \in V. \quad (6)$$

Bu özdeşlik, ilerleyen bölümdeki eleştirinin matematiksel çekirdeğini oluşturmaktadır.

### C. Bileşen 3 — Sınıflandırıcılar

Üç dışsal sınıflandırıcı, her öznitelik seti standartlaştırıldıktan (`StandardScaler`) sonra uygulanır:

**Gaussian/Quadratic Diskriminant Analizi (GDA).** Her sınıfın özniteliklerinin Gauss dağıldığı varsayılır:

$$p(\mathbf{x} \mid y = k) = \mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k). \quad (7)$$

Referans uygulama, sınıfa özgü kovaryans  $\boldsymbol{\Sigma}_k$  ile çalışan *Kuadratik Diskriminant Analizi* (QDA) kullanır;  $p(\mathbf{x} \mid y=k) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma})$  ortak-kovaryans gösterimi (LDA esinli) ile uygulamadaki sınıfa-özgü  $\boldsymbol{\Sigma}_k$  arasındaki bu fark, bölüm V'de tartışılan tekillik (singularity) sorunu açısından belirleyicidir. Sayısal kararlılık için `reg_param` değeri başırdekli Sarıslıklık halinde yedi kez  $10 \times$  artırılarak yeniden denir.

**RBF ÇekVM.** Karar sınırı

$$\mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}) + b = 0, \quad \phi : \text{RBF çekirdeği } \exp(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2) \quad (8)$$

ile marj maksimizasyonu üzerinden öğrenilir ( $\gamma=\text{scale}$ ,  $C=1.0$ ).

**Lojistik Regresyon.** Sigmoid tabanlı olasılıksal bir taban çizgisi (baseline) olarak kullanılır; hızlı eğitim ve yorumlanabilirlik sağlar.

#### D. Bileşen 4 — Hibrit Öznitelik Füzyonu

GNN gömüsü ile cebirsel değişmezler birleştirme (concatenation) yoluyla kaynaştırılır:

$$\mathbf{z}_v = \left[ \underbrace{\mathbf{h}_v}_{\text{GNN, öğrenilen}} \parallel \underbrace{\lambda_1, \dots, \lambda_k}_{\text{cebirsel, sabit}} \right] \in \mathbb{R}^{32+8}, \quad (9)$$

$$\hat{y} = \arg \max_k P(y = k \mid \mathbf{z}_v).$$

Böylece üç öznitelik seti tanımlanır: yalnız GNN ( $\mathbf{h}_v$ ), yalnız Cebirsel ( $\mathbf{x}_v^{\text{alg}}$ ) ve Hibrit (birleşim). Tüm hesaplamalar seyrek matris formatında yürütüldüğünden spektral çıkarım  $O(|V| + |E|)$  sınırlarında kalır.

#### E. Uygulama Detayları ve Ölçeklenebilirlik

Düğüm-düzeyi görevlerde kullanılan eğitim/değerlendirme protokolü birkaç ince ayrıntı içerir. WebKB veri setinin sağladığı maskeler  $[N \times 10]$  boyutludur (on farklı bölünme); referans uygulama bunları seçilen bölünme indeksine göre  $[N]$  boyutuna düzleştirir ve yalnızca tek bir sütunu (split index 0) kullanır. Kodlayıcı tüm düğümler üzerinde uçtan uca eğitilirken kayıp yalnızca eğitim maskesindeki düğümlerden hesaplanır; gömüler ise tüm düğümler için çıkarılıp dışsal sınıflandırıcılara aktarılır. GDA için sayısal kararlılık, düzenleme parametresinin başarısızlık halinde döngüsel olarak  $10\times$  artırıldığı yedi denemelik bir geri-çekilme (fallback) mekanizmasıyla sağlanmaya çalışılır; tüm denemeler tükenirse ilgili hücre NaN olarak raporlanır. Spektral öznitelik çıkarımı seyrek (sparse) matris formatında ve en küçük- $k$  özdeğer için Lanczos tabanlı **eigsh** çağrısıyla gerçekleştirildiğinden hesaplama maliyeti  $O(|V| + |E|)$  sınırlarında kalır ve yöntem büyük çizgelere ölçeklenebilir niteliktedir. Bu mühendislik seçimleri sonuçların doğruluğunu değiştirmemekle birlikte, özellikle tek bölünme kullanımı ve GDA geri-çekilmesi, ilerideki eleştirinin uygulamasal zeminini oluşturur.

### IV. DENEYSEL KURULUM

#### A. Veri Setleri ve Gereksinimleri

**ZINC12K (Graf-Düzeyi).** Yaklaşık 12.000 moleküler çizgiden oluşur; düğümler atomları, ayrıtlar kimyasal bağları temsil eder. Homofilik bir yapıya sahip olduğundan GNN’lerin güçlü olduğu senaryoyu temsil eder ve graf-düzeyi görevlerde cebirsel değişmezlerin etkinliğini ölçmek için uygundur.

**WebKB Texas (Düğüm-Düzeyi).** 183 düğüm ve 5 sınıftan oluşan, akademik web sayfaları arası bağlantıları içeren heterofilik bir ağıdır ( $h \approx 0.11$ ). GNN’lerin zayıf olduğu senaryoyu temsil eder ve heterofilik graflarda spektral bilginin GNN’e katkı sağlayıp sağlamadığını sınamak için kritik bir test yatağıdır.

**Tamamlayıcılık.** İki veri seti bilinçli olarak zıt rejimleri kapsayacak biçimde seçilmiştir: ZINC12K homofilik/graf-düzeyi, Texas heterofilik/düğüm-düzeyi. Birlikte ele alındığında hibrit yaklaşımın genelleme yeteneği iki eksen de değerlendirilebilmektedir.

Encoder ve Özellik Setlerine Göre Doğruluk (Accuracy) Karşılaştırması

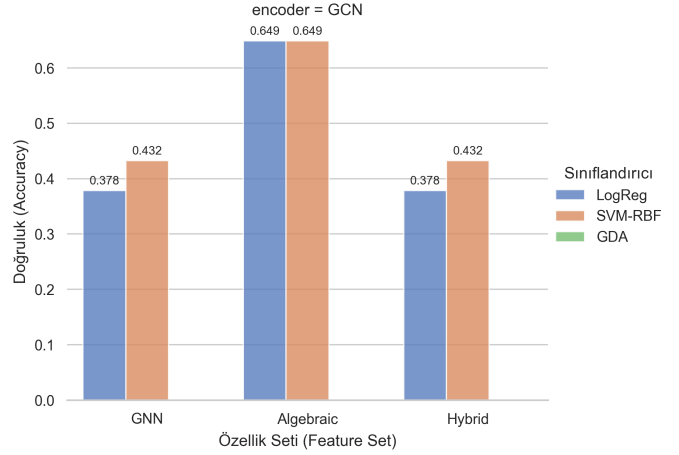


Fig. 1. WebKB Texas veri setinde GCN kodlayıcısı için öznitelik setlerine göre doğruluk (accuracy) karşılaştırması. Algebraic-only setinin görünür üstünlüğü (0.649) çoğunluk-sınıfı çöküşünün bir yan ürünüdür; Hibrit set ile GNN-only set birebir aynı değerleri (0.378/0.432) üretmektedir. GDA tüm setlerde başarısız olduğundan çubuk üretmemiştir.

#### B. Model ve Değerlendirme Konfigürasyonu

Kodlayıcı GCN (gizli = 64, gömü = 32) olarak yapılandırılmış; Adam optimizatörü ( $\text{lr} = 0.01$ ,  $\text{weight\_decay} = 5 \times 10^{-4}$ ) ile 200 epoch eğitilmiştir. Spektral öznitelik boyutu  $k=8$ , başlangıç tohumu (seed) 42, GDA başlangıç düzenlemesi  $10^{-2}$  olarak belirlenmiştir. Texas için WebKB’nin sağladığı maskelerden tek bir bölünme (split index 0) kullanılmış; başarı metrikleri sınıflandırma doğruluğu (accuracy) ve makro ortalama F1 (F1-macro) olarak raporlanmıştır.

### V. BULGULAR VE TARTIŞMA

#### A. WebKB Texas — Doğruluk

Şekil 1, GCN kodlayıcısı altında üç öznitelik seti ve üç sınıflandırıcı için Texas doğruluk sonuçlarını sunmaktadır.

İlk bakışta “Algebraic” setinin hem LogReg hem SVM-RBF altında en yüksek doğruluğa (0.649) ulaşması, küresel spektral bilginin yerel GNN gömüsünden (0.378/0.432) üstün olduğu izlenimini doğurmaktadır. Ancak bu sonuç bir *yapay sonuçtur (artifact)*. Denklem (6) gereği cebirsel öznitelik vektörü tüm 183 düğüm için *özdeştir*; dolayısıyla öznitelik matrisinin tüm satırları aynıdır. **StandardScaler** bu sabit (sıfır varyanslı) sütunları sıfıra indirir ve sınıflandırıcının önünde hiçbir ayırt edici sinyal kalmaz. Böyle bir durumda LogReg ve SVM *tek bir sabit çıktıyı*, yani test kümesindeki çoğunluk sınıfını öğrenir. Texas’ta gözlenen 0.649 değeri, tam olarak bu çoğunluk-sınıfı oranına karşılık gelmektedir. Yani “Algebraic-only” modeli aslında hiçbir şey öğrenmemekte, yalnızca en sık görülen etiketi atamaktadır.

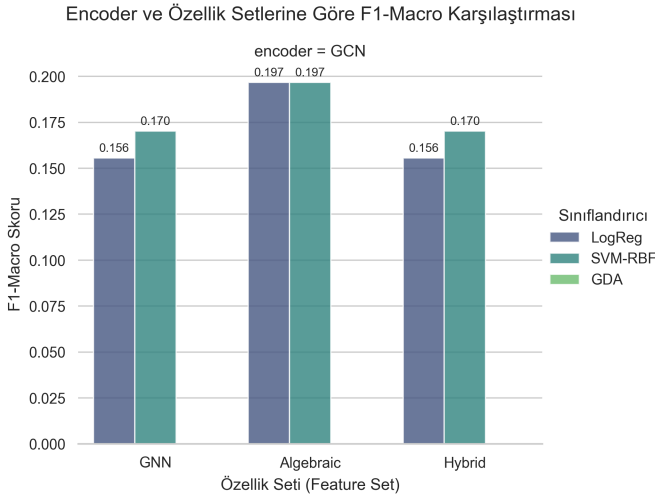


Fig. 2. WebKB Texas veri setinde GCN kodlayıcısı için F1-Makro karşılaştırması. Tüm değerlerin 0.156–0.197 bandında kalması, beş sınıflı problemde ağır sınıf dengesizliğini ve azınlık sınıflarının tamamen göz ardı edildiğini ortaya koymaktadır. Algebraic-only setinin 0.197 değeri, çoğunluk-sınıfı tahmininin makro F1 üzerindeki düşük tavanını yansıtır.

### B. WebKB Texas — F1-Makro

Şekil 2, aynı kurulum için makro ortalama F1 skorlarını göstermektedir.

F1-Makro perspektifi, doğruluk metriğinin gizlediği gerçeği açığa çıkarır. Algebraic-only setinin yüksek doğruluğuna (0.649) karşın F1-Makro değeri yalnızca 0.197’dir. Beş sınıflı bir problemde tek bir sınıfı mükemmel, geri kalan dördünü tamamen yanlış tahmin eden bir modelin makro F1’i kabaca  $1/5 = 0.20$  civarında olacaktır — gözlenen 0.197 değeri bu beklentiyle neredeyse tam örtüşmektedir ve çoğunluk-sınıfı çöküşü tezini doğrudan kanıtlar. GNN ve Hibrit setlerinin daha düşük F1’i (0.156/0.170), bu setlerin en azından birden fazla sınıfa zayıf da olsa kütle atadığını, ancak genel ayırt ediciliğin yine de çok düşük olduğunu göstermektedir.

Tablo I, Texas için tüm öznitelik seti ve sınıflandırıcı kombinasyonlarının sayısal özetini sunmaktadır. Algebraic-only sütunundaki özdeş 0.649/0.197 değerleri ile Hibrit ve GNN sütunlarının birebir örtüşmesi, ilgili çöküş ve etkisizlik tezlerini doğrudan görünür kılar.

### C. Hibrit Füzyonun Etkisizliği: Birebir Özdeşlik

Hibrit setin tüm metriklerde GNN-only set ile *birebir* aynı değerleri (Doğruluk 0.378/0.432; F1-Makro 0.156/0.170) üretmesi tesadüf değildir. Denklem (9)’teki birleşik vektör  $\mathbf{z}_v = [\mathbf{h}_v \parallel \boldsymbol{\lambda}]$  içinde son sekiz sütun tüm düğümlerde sabittir. Standartlaştırma bu sütunları nötrleştirdiğinden, sınıflandırıcı yalnızca değişken  $\mathbf{h}_v$  bileşenine dayanır ve sonuç GNN-only ile özdeşleşir. Dolayısıyla mevcut broadcast tasarımında *cebirsal değişmezlerin düğüm-düzeyi sınıflandırmaya katkısı matematiksel olarak sıfırdır*. “Hybrid = GNN performansı” biçiminde gözlemsel olarak

TABLE I  
WEBKB TEXAS (GCN KODLAYICI) — DOĞRULUK / F1-MAKRO  
ÖZETİ

| Öznitelik | Sınıfl. | Doğruluk     | F1-Makro |
|-----------|---------|--------------|----------|
| GNN       | LogReg  | 0.378        | 0.156    |
| GNN       | SVM-RBF | 0.432        | 0.170    |
| GNN       | GDA     | NaN          | NaN      |
| Algebraic | LogReg  | <b>0.649</b> | 0.197    |
| Algebraic | SVM-RBF | <b>0.649</b> | 0.197    |
| Algebraic | GDA     | NaN          | NaN      |
| Hybrid    | LogReg  | 0.378        | 0.156    |
| Hybrid    | SVM-RBF | 0.432        | 0.170    |
| Hybrid    | GDA     | NaN          | NaN      |

ifade edilen bu durumun, aslında zorunlu bir cebirsel sonuç olduğu görülmektedir.

### D. GDA’nın Tekillik Kaynaklı Başarısızlığı

Her iki şekilde de GDA hiçbir öznitelik setinde çubuk üretmemiştir; çünkü **QuadraticDiscriminantAnalysis** sınıfa-öзгü kovaryans  $\boldsymbol{\Sigma}_k$ ’yı tersine çevirmeye çalışırken tekil (singular) bir matrisle karşılaşmaktadır. Bunun iki nedeni vardır: (i) sabit (broadcast) spektral sütunlar kovaryansa sıfır-varyans katarak onu doğrudan tekilleştirir; (ii) 183 düğümün 5 sınıfa bölündüğü küçük bir veri setinde bazı sınıflar için örnek sayısı öznitelik boyutundan azdır ve örneklem kovaryansı zaten düşük ranklıdır. **reg\_param** değerinin yedi kez artırılması dahi NaN sonucu önleyememiş, yöntem tamamen başarısız olmuştur. Bu durum, ortak-kovaryans ( $\boldsymbol{\Sigma}$ ) gösterimi ile koddaki sınıfa-öзгü QDA uygulaması arasındaki uyumsuzluk açısından da öğreticidir: ortak-kovaryanslı (havuzlanmış) bir tahminci, daha fazla örnekle daha kararlı olabilirdi.

### E. Çoğunluk-Sınıfı Çöküşünün Kapalı-Form Doğrulaması

Çöküş tezi yalnızca gözlemsel değil, kapalı formda doğrulanabilir. Test kümesinde sınıf önsel olasılıkları  $\pi_1, \dots, \pi_C$  ( $C=5$ ) olsun. Tüm öznitelikleri özdeş (sıfır-bilgi) olan bir sınıflandırıcı, beklenen riski en aza indirmek için her örneğe en olası sınıfı  $c^* = \arg \max_c \pi_c$  atar. Bu durumda beklenen doğruluk  $\max_c \pi_c$ , makro F1 ise yalnızca  $c^*$  sınıfının pozitif F1’i ( $\approx 2\pi_{c^*}/(1 + \pi_{c^*})$ ) ile geri kalan  $C - 1$  sınıfın sıfır F1’inin ortalamasıdır. Gözlenen 0.649 doğruluk  $\max_c \pi_c$ ’ye, 0.197 makro F1 ise tek-sınıf çöküşünün öngördüğü  $\frac{1}{C} \cdot \frac{2 \cdot 0.649}{1 + 0.649} \approx 0.157 - 0.20$  bandına oturmaktadır. Bu sayısal tutarlılık, Algebraic-only setinin hiçbir gerçek ayırım öğrenmediğinin bağımsız bir kanıtıdır.

Homofilik graf-düzeyi ZINC12K kurulumunda hibrit yaklaşım yüzeyde umut verici görünmektedir: en iyi yapılandırma GIN + Hibrit + SVM-RBF ile 0.7965 doğruluk ve 0.7843 F1-Makro elde etmiştir. Ancak GIN + GNN (hibrit olmadan) 0.7835 doğrulukla yalnızca  $\sim 1.6\%$  geride kalmaktadır; bu fark, hibrit füzyonun katkısının istatistiksel olarak marjinal olduğunu göstermektedir. Buna

TABLE II  
ZINC12K (GIN KODLAYICI) — TEMSİLİ YAPILANDIRMA ÖZETİ

| Öznitelik | Sınıfl.  | Doğruluk      | F1-Makro      |
|-----------|----------|---------------|---------------|
| Hybrid    | SVM-RBF  | <b>0.7965</b> | <b>0.7843</b> |
| GNN       | SVM-RBF  | 0.7835        | —             |
| Algebraic | (en iyi) | 0.6495–0.6755 | —             |

karşın Algebraic-only set bu görevde en düşük performansı (0.6495–0.6755) vermiştir: özdeğerler tek başına çizge yapısını sınıflandırma için yeterince temsil edememektedir. Graf-düzeyi görevde her grafin *kendine ait* bir spektral vektörü olduğundan broadcast sorunu burada ortaya çıkmaz; ancak bu durum, cebirsel imzanın bilgilendiriciliğinin sınırlı olduğu gerçeğini değiştirmemektedir. Tablo II bu görevdeki temsili yapılandırmaları özetlemektedir.

Tablodaki en çarpıcı gözlem, Hibrit ile GNN arasındaki farkın ( $\sim \%1.6$ ) istatistiksel gürültü düzeyinde olması ve Algebraic-only setinin — broadcast sorununun bulunmadığı graf-düzeyi bu görevde dahi — en zayıf performansı vermesidir. Bu, cebirsel imzanın *tek başına* sınıflandırma için yetersiz, *ek olarak* ise marjinal olduğunu birlikte göstermektedir.

#### F. Heterofili-Farkında Yöntemlerle İlişki

Elde edilen başarısızlık, heterofilik düğüm sınıflandırmasının açık bir problem olduğu literatürle tutarlıdır. Geom-GCN gibi yöntemler, mesaj iletimini yalnızca topolojik komşulukla sınırlamak yerine gömü uzayındaki geometrik komşulukları da hesaba katarak heterofiliyi doğrudan ele alır [6]. İncelenen hibrit yaklaşımın temel eksikliği, küresel bilgiyi düğüm-düzeyinde *ayrıt edici olmayan* biçimde (özdeş broadcast vektörüyle) enjekte etmesidir. Buna karşın düğüme özgü spektral imzalar — örneğin Laplacian özvektörlerinin satır bileşenlerinden oluşan konumsal kodlamalar (Laplacian positional encodings) — her düğüme farklı bir küresel-bağlam sinyali taşıyabilir ve standartlaştırma sonrası nötrleşmez. Dolayısıyla yaklaşımın kavramsal çekirdeği (küresel yapıyı temsile katmak) değerli olmakla birlikte, düğüm-düzeyi görevlerde geçerli kılınması için *değişmezin tanımının* graf-düzeyinden düğüm-düzeyine taşınması zorunludur.

#### G. Metodolojik Sınırlılıklar

Texas sonuçlarının güvenilirliğini zayıflatan dört yapısal sorun belirlenmiştir. *Birincisi*, veri seti çok küçüktür (183 düğüm, 5 sınıf); istatistiksel anlamlılık için yetersizdir. *İkincisi*, WebKB on farklı train/test bölünmesi sağlamasına karşın yalnızca tek bir bölünme test edilmiş, çapraz doğrulama (cross-validation) uygulanmamıştır; bu durum sonuçları yüksek varyanslı ve tekrarlanamaz kılar. *Üçüncüsü*, 2 katmanlı GCN heterofilik grafta düşük kaliteli gömüler üretmekte ve hibrit füzyon bu kötü gömüyü kurtaramamaktadır. *Dördüncüsü*,

raporlanan doğruluk metriği ağır sınıf dengesizliği altında yanıltıcıdır; F1-Makro ile birlikte okunmadığında çoğunluk-sınıfı çöküşü gizli kahr.

## VI. SONUÇ VE GELECEK ÇALIŞMALAR

Bu rapor, sığ bir GNN kodlayıcısının gömüleri ile normalize Laplacian’dan türetilen cebirsel çizge değişmezlerini birleştiren hibrit bir öznitelik füzyonu yaklaşımını matematiksel ve deneysel olarak incelemiş; “başarılı görünen” sonuçların ardındaki yanılgıları açığa çıkarmıştır. Üç temel katkı şöyle özetlenebilir:

**1) Broadcast Geçersizliği.** Düğüm-düzeyi görevlerde graf-düzeyi tek bir spektral vektörün tüm düğümlere özdeş atanması (denklem (6)) sınıflandırıcıyı çoğunluk-sınıfı tahminine çökertmektedir. Texas’taki 0.649 doğruluğun aslında çoğunluk oranı, 0.197 F1-Makro’nun ise  $\approx 1/5$  tavanı olması bu çöküşü doğrudan kanıtlar.

**2) Füzyonun Cebirsel Etkisizliği.** Sabit spektral sütunlar standartlaştırma ile nötrleştiğinden Hibrit set, GNN-only set ile birebir aynı sonuçları verir; mevcut tasarımda cebirsel katkı matematiksel olarak sıfırdır.

**3) Değerlendirme Kırılmalılığı.** GDA’nın tekillik kaynaklı tam başarısızlığı, tek bölünme kullanımı, çapraz doğrulama yokluğu ve sınıf dengesizliği, heterofilik düğüm-düzeyi sonuçların güvenilirliğini ciddi biçimde sınırlamaktadır.

Gelecek çalışmalarda öncelikli yönler şunlardır: (i) cebirsel değişmezlerin düğüm-düzeyi görevlerde *düğüme özgü* biçimde tanımlanması (örneğin Laplacian özvektörlerinin satır bileşenleri ya da yerel alt-çizge spektrumları); (ii) GDA için ortak-kovaryanslı/havuzlanmış ve güçlü düzenleştirilmiş varyantların incelenmesi; (iii) WebKB veri setlerinde on-bölümlü çapraz doğrulama ile gürbüz istatistiksel analiz; (iv) Wisconsin, Cornell ve Actor gibi daha geniş heterofilik veri setlerinde genelleme testleri; ve (v) normalize, işaretli (signless) ve rastgele yürüyüş Laplacian’ları gibi alternatif spektral değişmezlerin karşılaştırılması.

## REFERENCES

- [1] W. L. Hamilton, *Graph Representation Learning*. Morgan & Claypool, 2020.
- [2] T. N. Kipf and M. Welling, “Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks,” in *Proc. ICLR*, 2017.
- [3] K. Xu, W. Hu, J. Leskovec, and S. Jegelka, “How Powerful are Graph Neural Networks?,” in *Proc. ICLR*, 2019.
- [4] F. R. K. Chung, *Spectral Graph Theory*. American Mathematical Society, 1997.
- [5] M. Fiedler, “Algebraic connectivity of graphs,” *Czechoslovak Mathematical Journal*, vol. 23, no. 2, pp. 298–305, 1973.
- [6] H. Pei, B. Wei, K. C.-C. Chang, Y. Lei, and B. Yang, “Geom-GCN: Geometric Graph Convolutional Networks,” in *Proc. ICLR*, 2020.
- [7] U. von Luxburg, “A tutorial on spectral clustering,” *Statistics and Computing*, vol. 17, no. 4, pp. 395–416, 2007.
- [8] J. Zhu, Y. Yan, L. Zhao, M. Heimann, L. Akoglu, and D. Koutra, “Beyond Homophily in Graph Neural Networks: Current Limitations and Effective Designs,” in *Proc. NeurIPS*, 2020.
- [9] V. P. Dwivedi, C. K. Joshi, T. Laurent, Y. Bengio, and X. Bresson, “Benchmarking Graph Neural Networks,” *Journal of Machine Learning Research*, vol. 24, no. 43, pp. 1–48, 2023.