



【第70回AIセミナー】グラフニューラルネットワークやグラフ表現学習の最前線
2023.10.17(火)

グラフニューラルネットワークによる構造データ機械学習

東京工業大学 村田剛志

<http://www.net.c.titech.ac.jp>

もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

もくじ

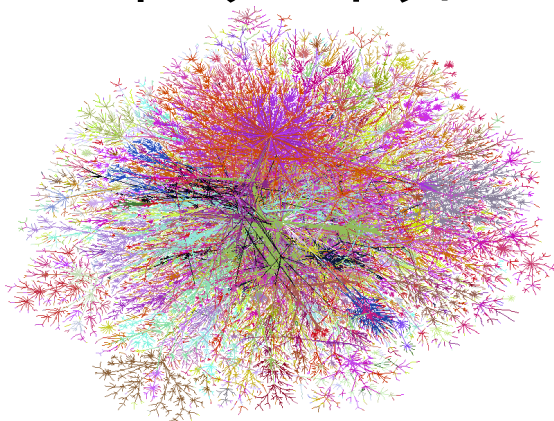
- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

世界はグラフ(ネットワーク)で表せる

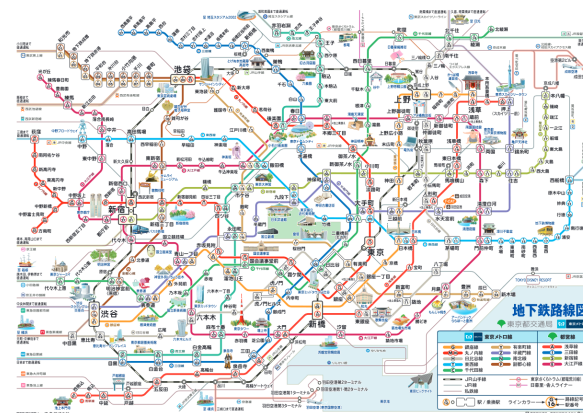
社会ネットワーク



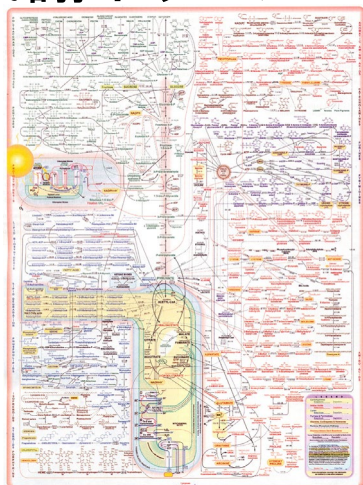
インターネット



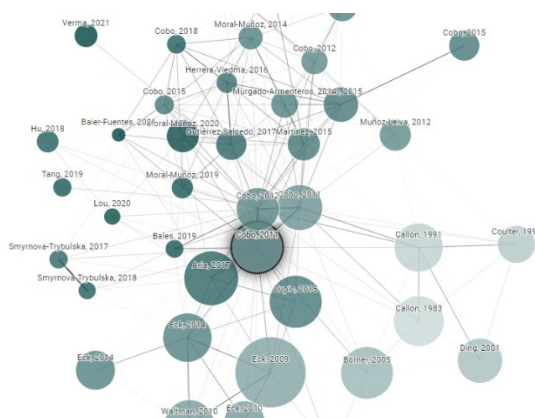
交通網



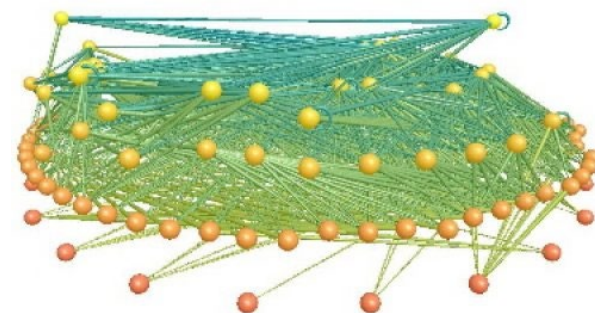
代謝ネットワーク



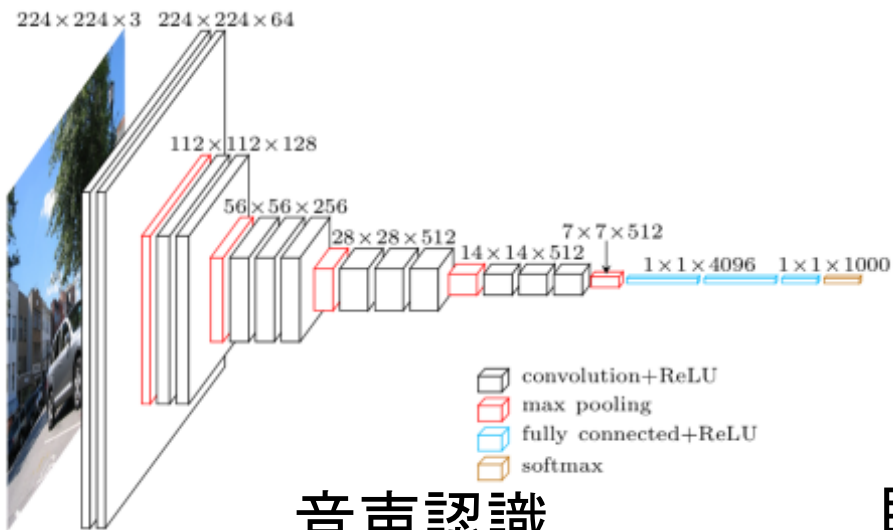
引用ネットワーク



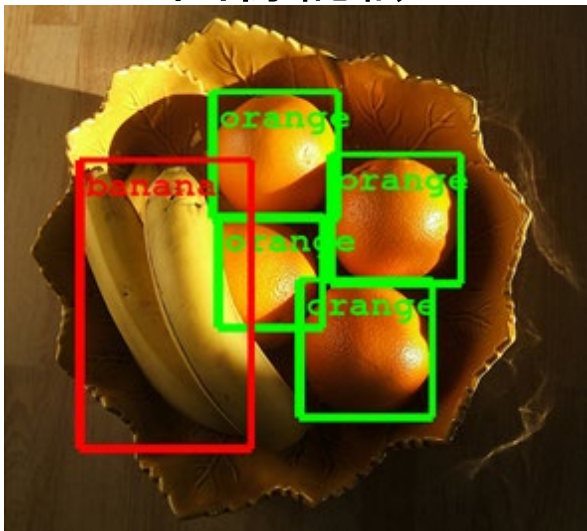
食物連鎖



深層学習



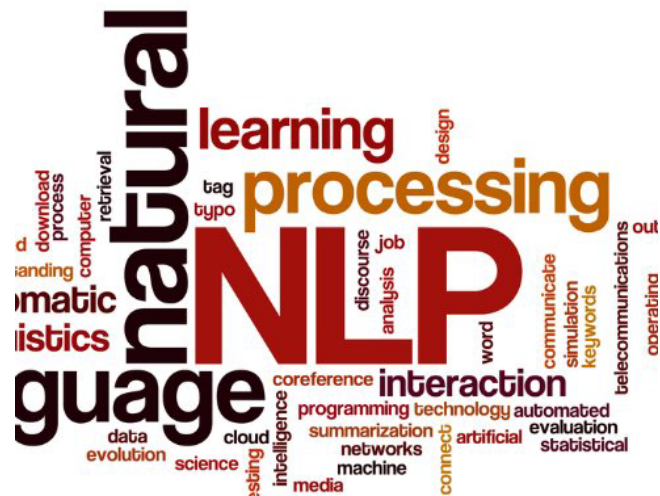
画像認識



音声認識

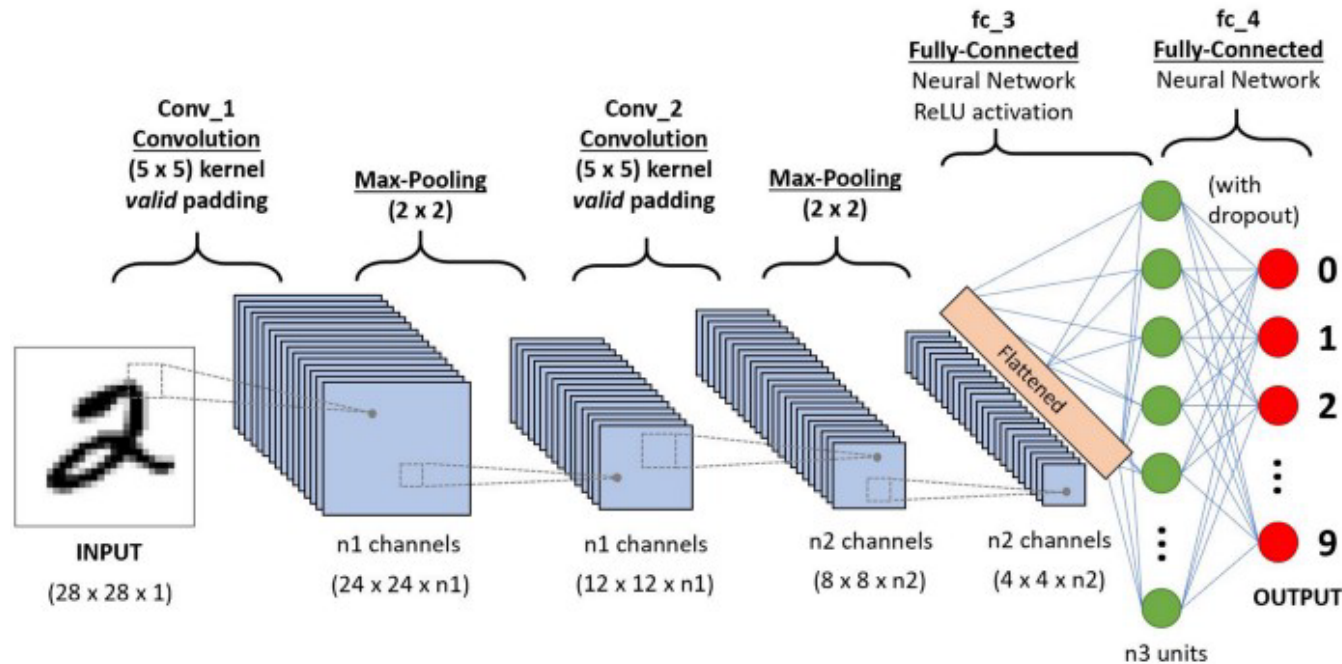


自然言語処理



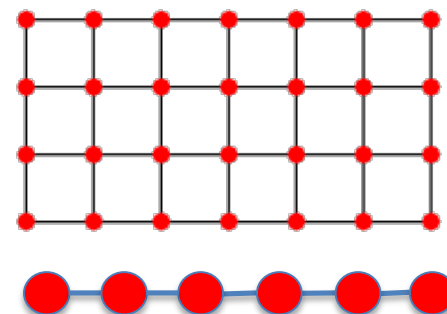
畳み込みニューラルネットワーク

- 入力の局所的な特徴→大局的な特徴を認識



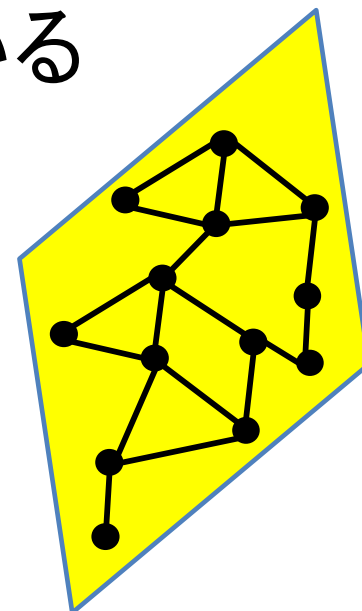
グラフを対象とした手法が必要

- 従来の深層学習は単純なグリッドや列を対象
 - 画像は画素の集まり
 - 文は単語列



- しかしグラフの結合は異なっている
 - 隣接頂点数が可変
 - 頂点が順序づけられていない

画像認識や自然言語処理での手法
をそのまま利用することはできない

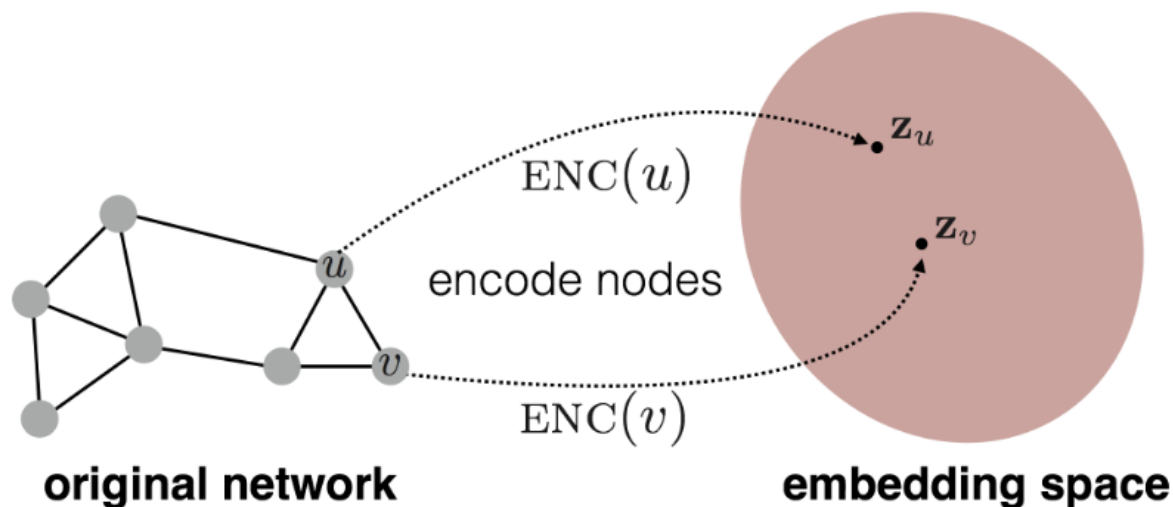


グラフの深層学習

- グラフエンベディング(表現学習)
 - グラフのノードを(距離等の特性を維持して)低次元ベクトルに変換
 - DeepWalk [Perozzi 2014], LINE [Tang 2015], ...
- グラフニューラルネットワーク
 - グラフ構造データ用の深層学習アーキテクチャ
 - GCN [Kipf 2017], GraphSAGE [Hamilton 2017], ...

グラフエンベディング(表現学習)

- グラフの頂点を(距離等の特性を維持して)低次元ベクトル表現に変換
 - 距離・近接性をどう定義するか
 - {符号つき、有向、多層、動的}グラフをどうするか

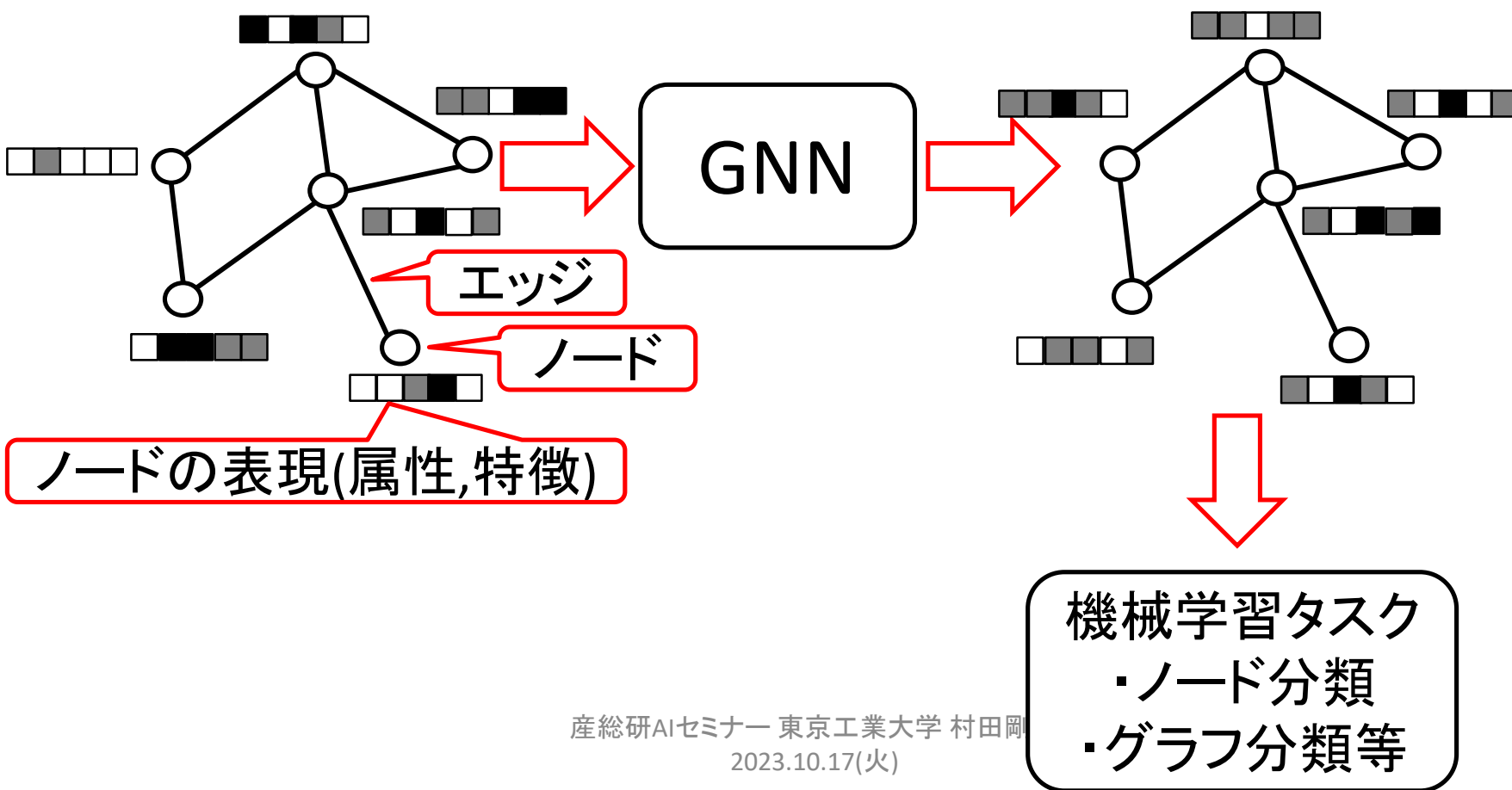


Representation Learning on Networks (WWW-18 Tutorial)

<http://snap.stanford.edu/proj/embeddings-www/>

グラフニューラルネットワーク

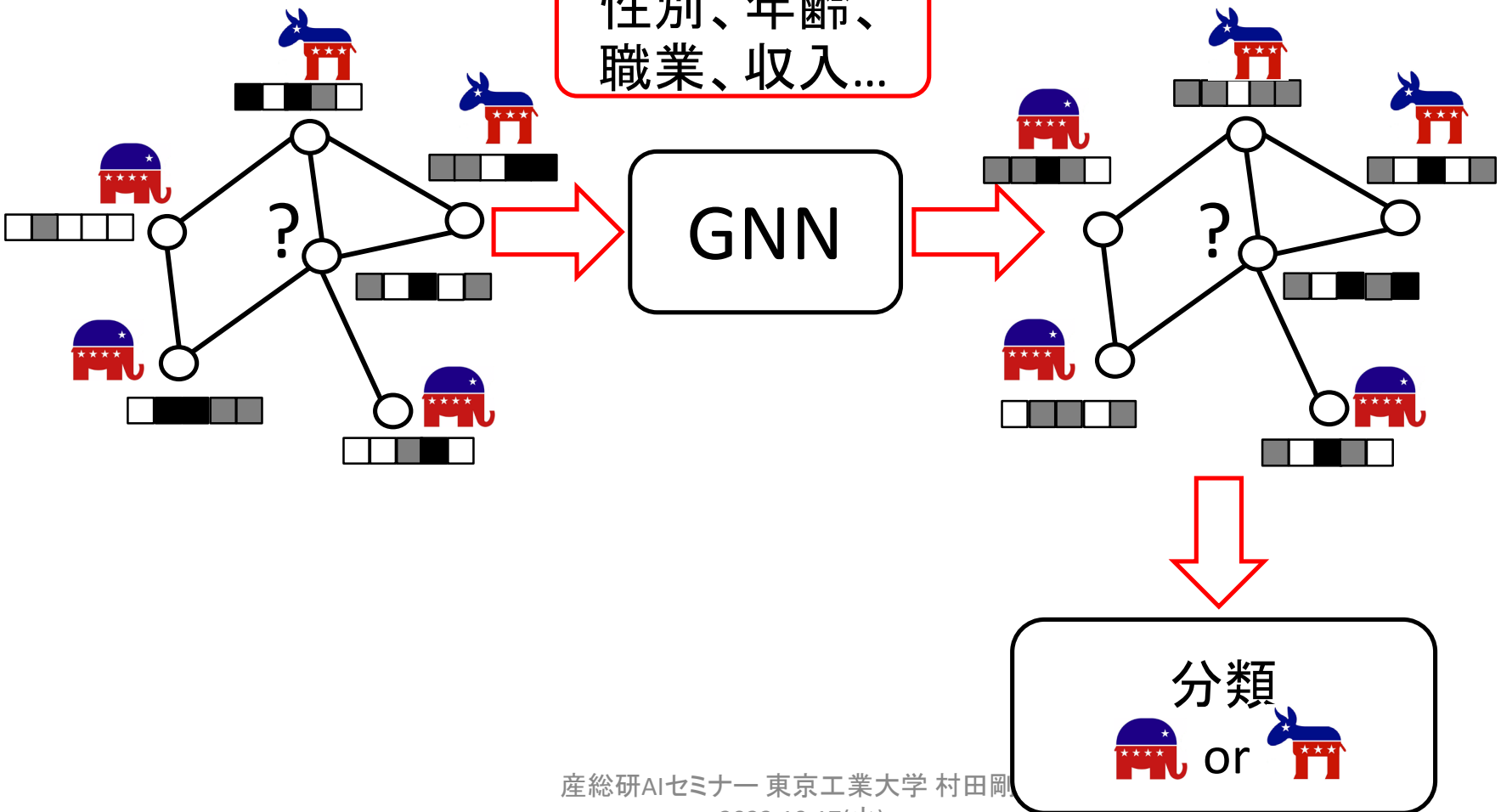
- ノードの表現を学習→分類等のタスクに利用



ノード分類

- ノードの表現(属性)を周囲も加味して学習

性別、年齢、
職業、収入...

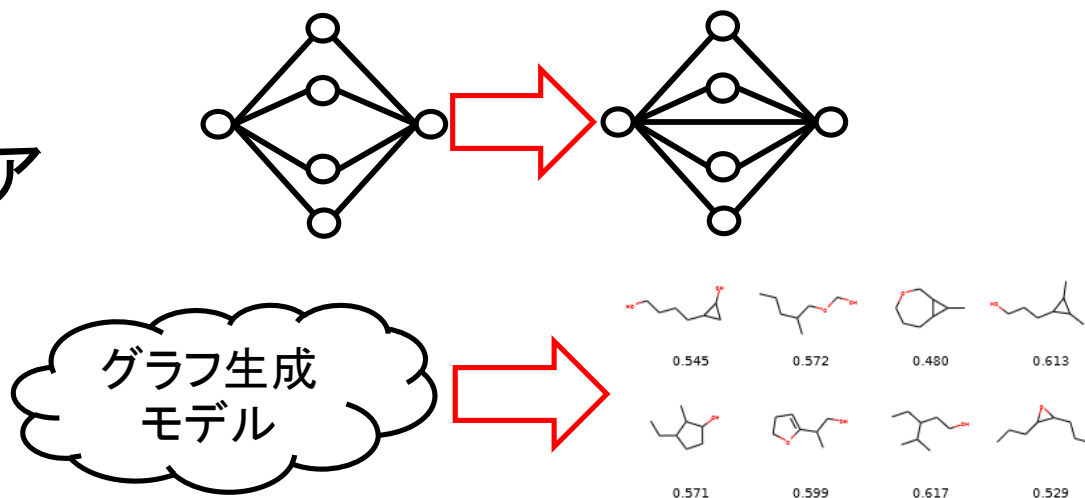


- グラフ全体の表現(属性)を学習



グラフを対象としたタスク

- ノード分類
 - 出力: ノードのラベル
- グラフ分類
 - 出力: グラフのラベル
- リンク予測
 - 出力: ノードのペア
- グラフ生成
 - 出力: グラフ



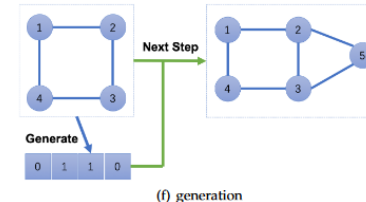
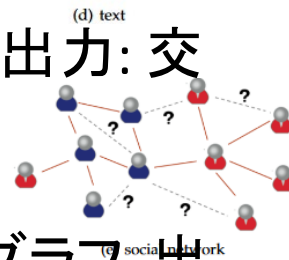
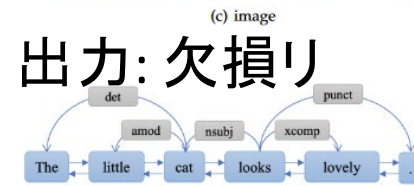
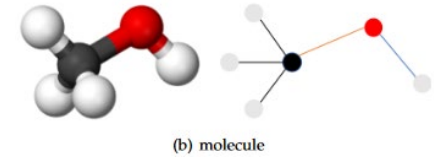
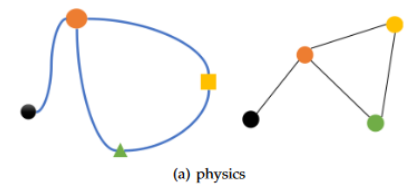
GNN研究のチャレンジ

- 他分野の手法をグラフにどう応用するか?
 - 画像処理や自然言語処理の手法の発展形
 - attention, GAN, XAI, ...
- グラフ固有の問題にどう対処するか?
 - 「deeper is better」ではない
 - グラフのバリエーション(符号つき、有向、多層、動的...)をどうするか?

もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

グラフニューラルネットワーク の応用

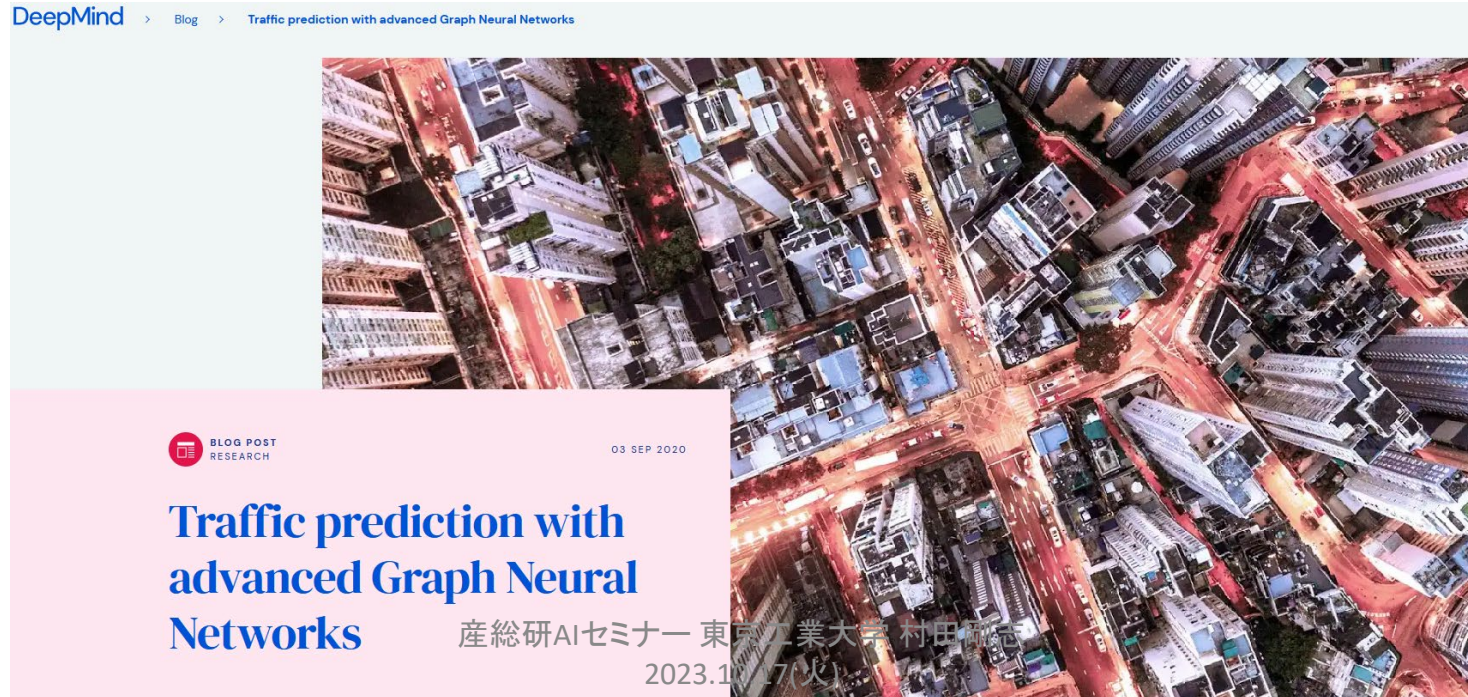


- 画像認識
 - シーングラフ生成 (入力: 画像, 出力: オブジェクトと意味的關係)
 - リアルな画像生成 (入力: シーングラフ, 出力: 画像)
- 推薦システム
 - リンク予測としての推薦 (入力: アイテムとユーザ, 出力: 欠損リンク)
- 交通量予測
 - 交通スピードの予測 (入力: 道路設置のセンサと距離, 出力: 交通量とスピード)
- 化合物分類
 - 分子グラフ(原子=ノード, 結合=辺)の分類 (入力: 分子グラフ, 出力: 毒性, 水溶性など)

Jie Zhou et al., "Graph neural networks: A review of methods and applications", AI Open, Vol.1, pp.57-81 (2020) <https://doi.org/10.1016/j.aiopen.2021.01.001>

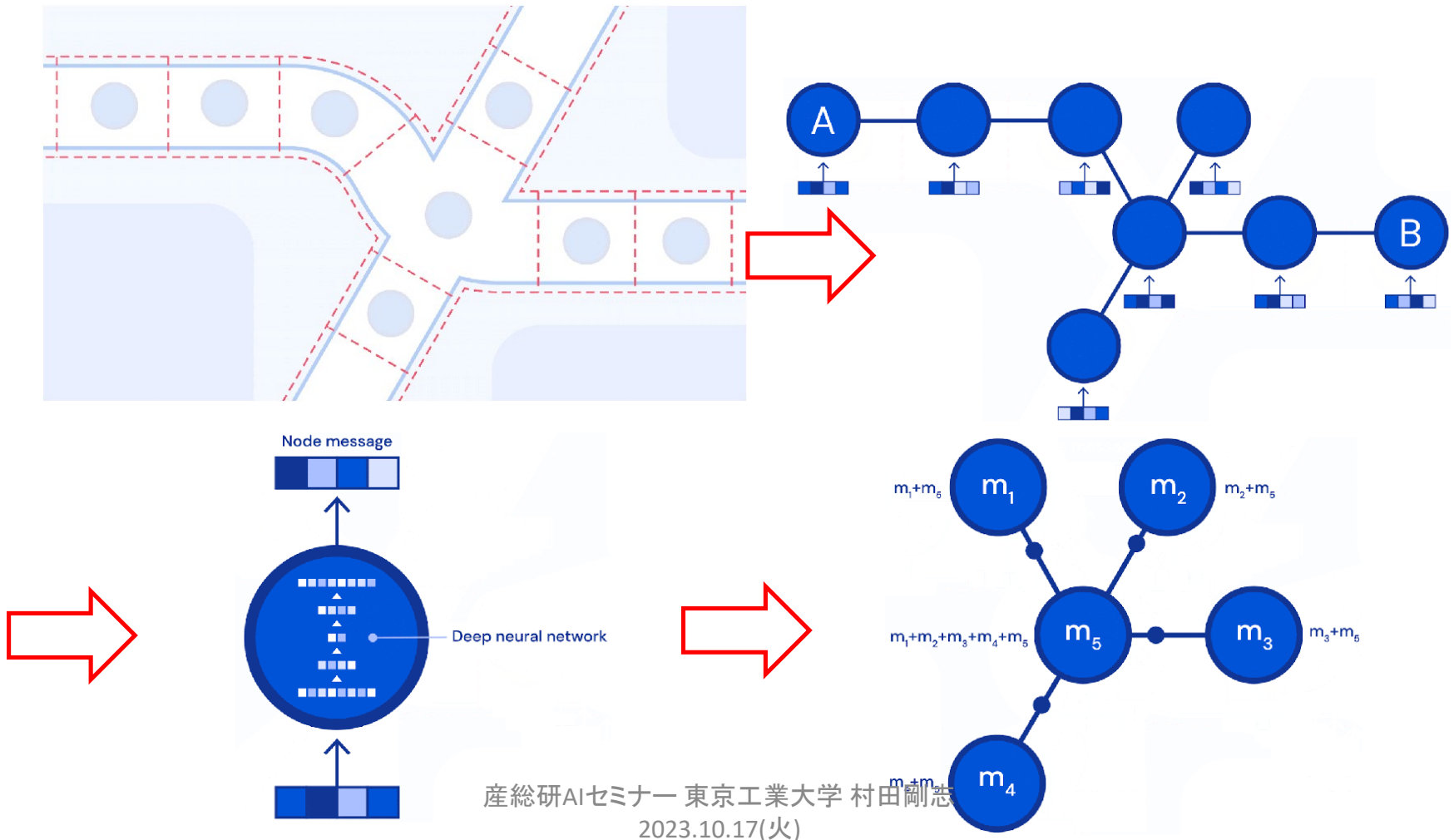
DeepMindの事例

- Traffic prediction with advanced Graph Neural Networks (2020)
 - <https://www.deepmind.com/blog/traffic-prediction-with-advanced-graph-neural-networks>



GNNをどう使うか

- 道路をセグメントに分割してグラフで表現



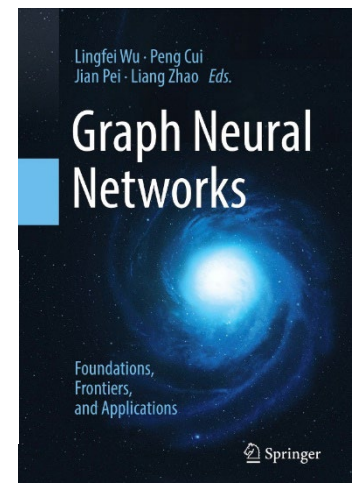
GNNの幅広い応用

- Chapter 19: GNNs in Modern Recommender Systems
- Chapter 20: GNNs in Computer Vision
- Chapter 21: GNNs in Natural Language Processing
- Chapter 22: GNNs in Program Analysis
- Chapter 23: GNNs in Software Mining
- Chapter 24: GNN-based Biomedical Knowledge Graph Mining in Drug Development
- Chapter 25: GNNs in Predicting Protein Function and Interactions
- Chapter 26: GNNs in Anomaly Detection
- Chapter 27: GNNs in Urban Intelligence

"Graph Neural Networks: Foundations, Frontiers, and Applications",
Lingfei Wu, Peng Cui, Jian Pei, Liang Zhao, Springer, 725 pages, 2022.

<https://graph-neural-networks.github.io/>

2023.10.17(火)



さまざまな学問分野と関連

本日は扱いません

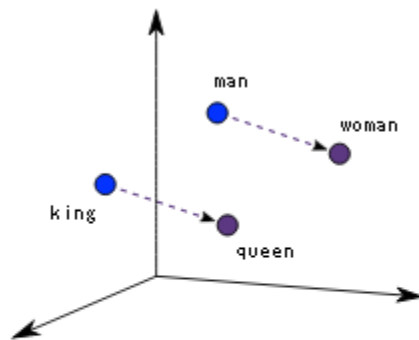
- Graph Neural Networks for Traffic Forecasting : A Survey
 - <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2022.117921>
- Graph Neural Networks for Natural Language Processing : A Survey
 - <https://arxiv.org/abs/2106.06090>
- A Generalization of Transformer Networks to Graphs
 - <https://arxiv.org/abs/2012.09699v2>
- Quantum Graph Neural Networks
 - <https://paperswithcode.com/paper/quantum-graph-neural-networks-1>

もくじ

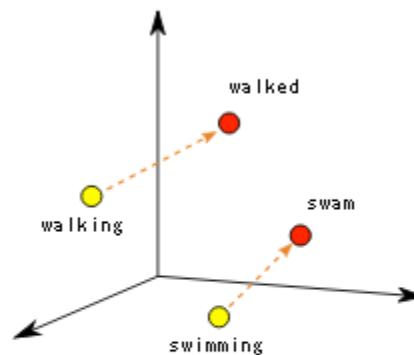
- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- **グラフエンベディング**
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

Word embedding

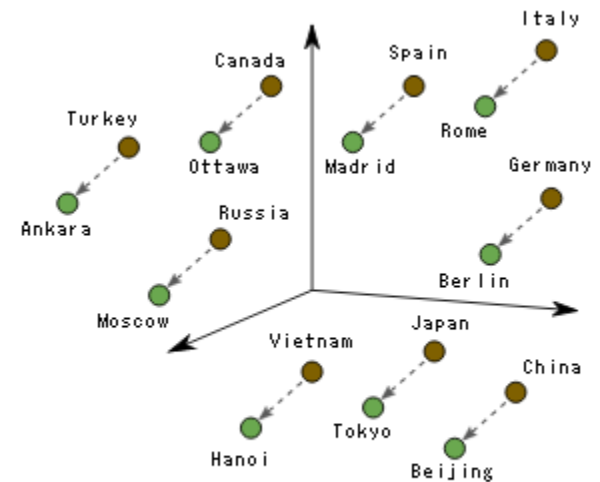
- 各単語をベクトルで表現→ベクトルの演算で単語の意味を類推
- Word2Vec, GloVe などのアルゴリズム



Male-Female



Verb Tense



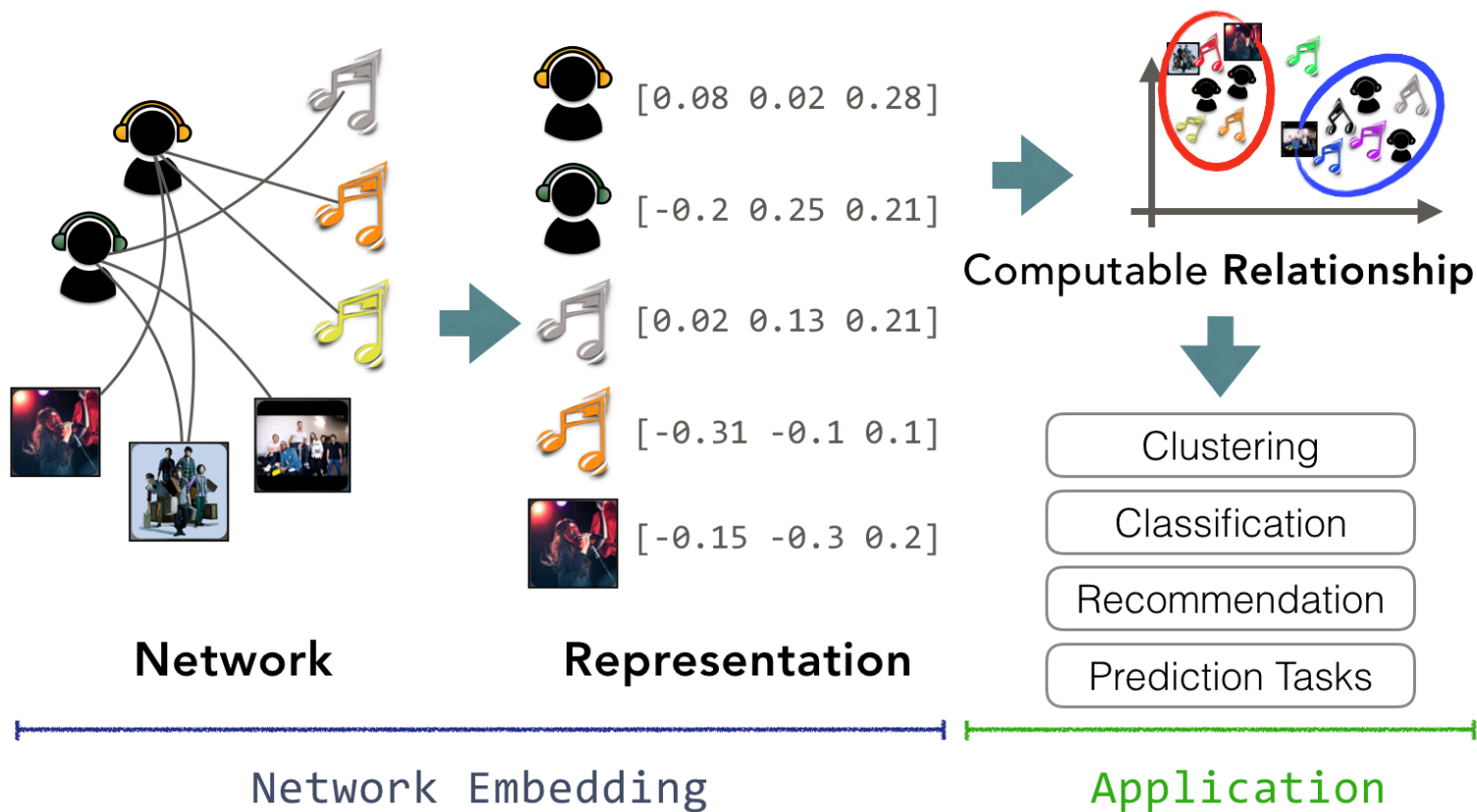
Country-Capital

Embeddings: Translating to a Lower-Dimensional Space

<https://developers.google.com/machine-learning/crash-course/embeddings/translating-to-a-lower-dimensional-space>

グラフエンベディング(表現学習)

- グラフをベクトル表現に変換



"awesome-network-embedding", <https://github.com/chihming/awesome-network-embedding>

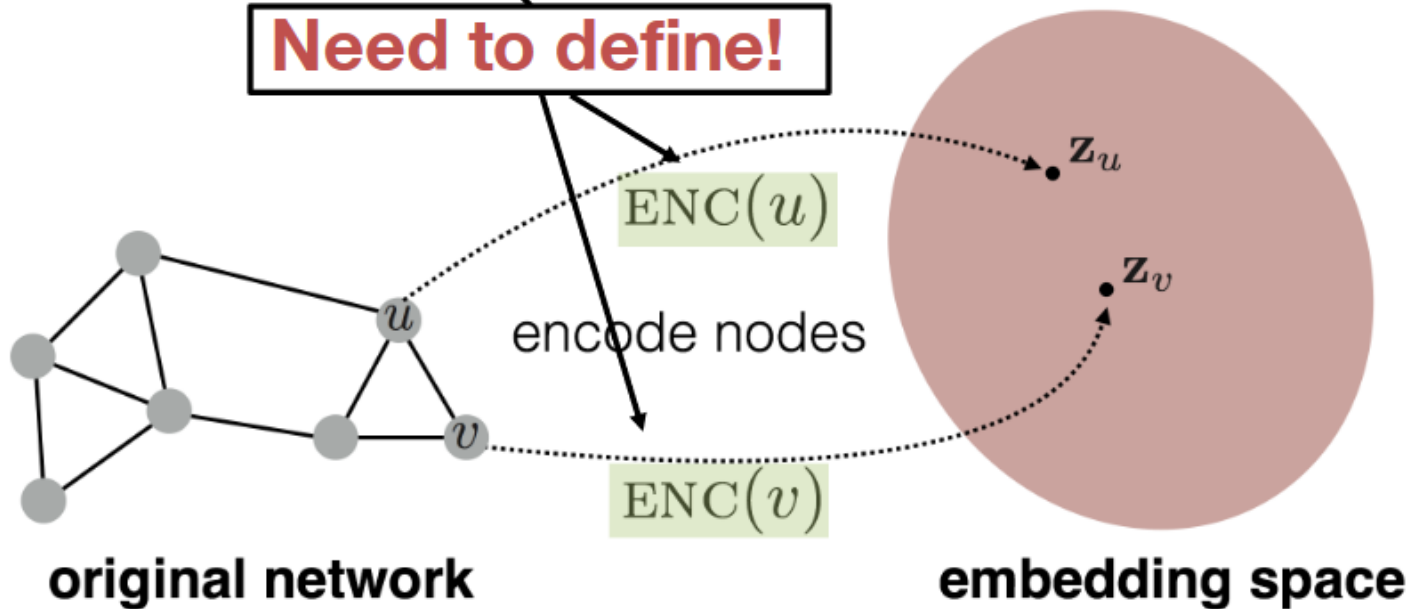
望ましいエンベディング

- “類似した”ノードが近くに来るようにしたい

Goal: $\text{similarity}(u, v) \approx \mathbf{z}_v^\top \mathbf{z}_u$

Need to define!

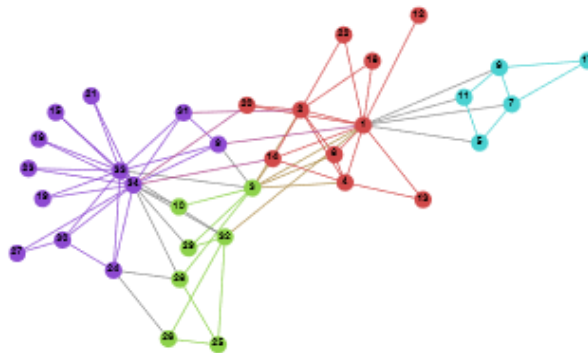
どう定義するか
・ノードの属性を
 どうか?
・グラフのバリ
 エーション(符号
 つき、有向、多
 層、動的...)をど
 うするか?



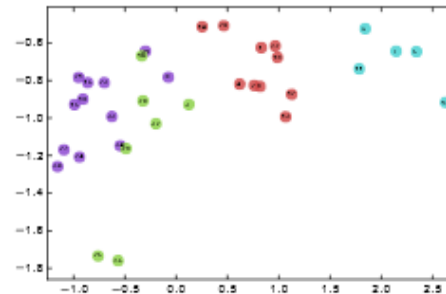
"Representation Learning on Networks" WWW-18 Tutorial
<http://snap.stanford.edu/proj/embeddings-www/>

DeepWalk [Perozzi, KDD'14]

- 自然言語処理におけるエンベディング手法 (Skip-gram) をグラフに応用
 - 自然言語: 単語の列 → 単語のベクトル表現を学習
 - グラフ: ランダムウォーク → ノードの列 → ノードのベクトル表現を学習



(a) Input: Karate Graph



(b) Output: Representation

Bryan Perozzi, Rami Al-Rfou, Steven Skiena, "DeepWalk: online learning of social representations", Proceedings of the 20th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining (KDD'14) pp.701–710 (2014)

<https://doi.org/10.1145/2623330.2623732> <http://www.perozzi.net/projects/deepwalk/>

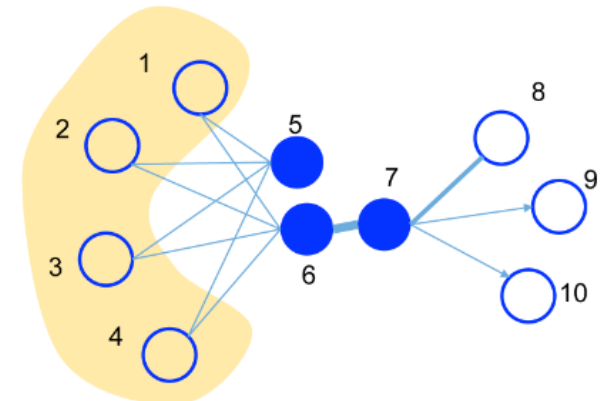
産総研AIセミナー 東京工業大学 村田剛志

2023.10.17(火)

LINE [Tang, WWW'15]

- DeepWalkは直接つながったノードだけを考慮
- LINEは間接的につながったノードも考慮
 - ノード6と7は近いベクトル表現になるべき
 - ノード5と6も近いベクトル表現になるべき
 - 多くの隣接ノード(1,2,3,4)を共有
- 1次近接性・2次近接性を保持

Jian Tang, Meng Qu, Mingzhe Wang, Ming Zhang, Jun Yan, Qiaozhu Mei, "LINE: Large-scale Information Network Embedding", Proceedings of the 24th International Conference on World Wide Web (WWW'15) pp.1067–1077 (2015)
<https://doi.org/10.1145/2736277.2741093>

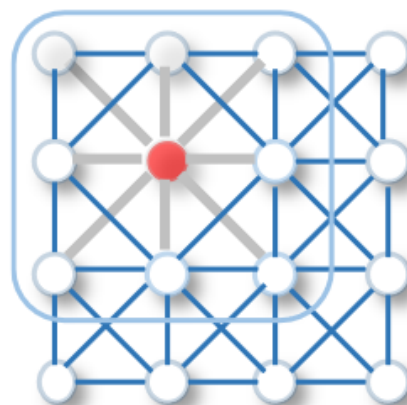


もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- **グラフ畳み込みの2つのアプローチ**
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

グラフ畳み込みのチャレンジ

- 画像:画素は規則的、隣接ノード数は一定
- グラフ:隣接ノード数は可変
- 畳み込みをどう定義するか



(a) 2D Convolution. Analogous to a graph, each pixel in an image is taken as a node where neighbors are determined by the filter size. The 2D convolution takes the weighted average of pixel values of the red node along with its neighbors. The neighbors of a node are ordered and have a fixed size.



(b) Graph Convolution. To get a hidden representation of the red node, one simple solution of the graph convolutional operation is to take the average value of the node features of the red node along with its neighbors. Different from image data, the neighbors of a node are unordered and variable in size.

Wu et al., "A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks", IEEE Transaction on Neural Network and Learning Systems, Vol.32, No.1, pp.4-24 (2021)

<https://doi.org/10.1109/TNNLS.2020.2978386>

グラフ畳み込みの2つのアプローチ

- Spectral-based
 - グラフ信号処理の立場からフィルタを導入してグラフ畳み込みを定義
 - 長所・短所:理論的な裏付け・行列の固有値分解が計算量大
- Spatial-based
 - 近傍のノードから特徴情報を集める処理としてグラフ畳み込みを定義
 - 長所・短所:直感的に理解しやすい・非常に多くのバリエーション

グラフ畳み込みの2つのアプローチ

- Spectral-based
 - グラフ信号処理の立場からフィルタを導入してグラフ畳み込みを定義
 - 長所・短所:理論的な裏付け・行列の固有値分解が計算量大
- Spatial-based
 - 近傍のノードから特徴情報を集める処理としてグラフ畳み込みを定義
 - 長所・短所:直感的に理解しやすい・非常に多くのバリエーション

Spectral Convolution

- 信号処理:
 - フーリエ変換で関数を周波数表現に分解
 - その上でノイズ除去などをしてから逆変換
- グラフ畳み込み:
 - graph Laplacianの固有ベクトル成分に変換
 - その上でフィルタリングをしてから逆変換
- $u_1 *_{\mathcal{G}} u_2 = Q((Q^T u_1) \odot (Q^T u_2))$

頂点に対して定義された信号

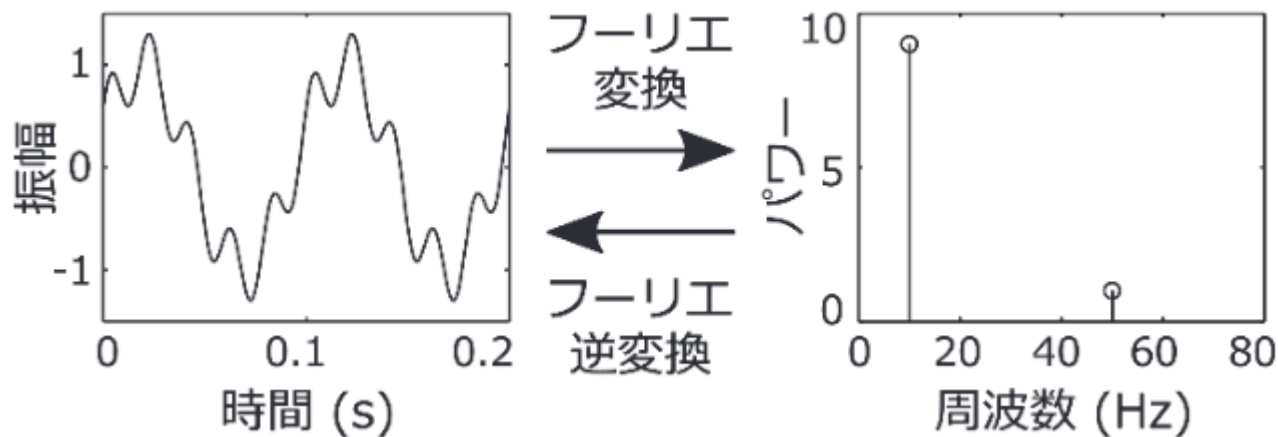
逆変換

変換

内積

フーリエ変換

- 時系列データを周波数空間に変換して、ノイズ除去などの処理をして逆変換

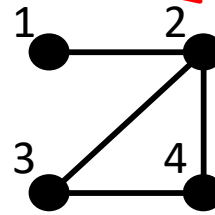


小野弓絵「いまさら聞けない信号処理」生体医工学 Vol.57, No.2-3, pp.75-80 (2019)

https://www.jstage.jst.go.jp/article/jsmbe/57/2-3/57_75/_pdf/-char/ja

グラフラプラシアン

グラフ



隣接行列

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- A : 隣接行列
- L : グラフラプラシアン
- D : 次数行列

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

次数行列

グラフラプラシアン

$$L = D - A$$

$$L_{ij} = \begin{cases} k_i & \text{if } i = j, \\ -1 & \text{if } i \neq j \text{ and there is an edge } (i, j), \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

次数

$$L = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & -1 & \dots \\ 0 & k_2 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & k_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

辺

$$L_{ij} = \delta_{ij} k_i - A_{ij} \quad \text{正規化グラフラプラシアン } L = I - D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}$$

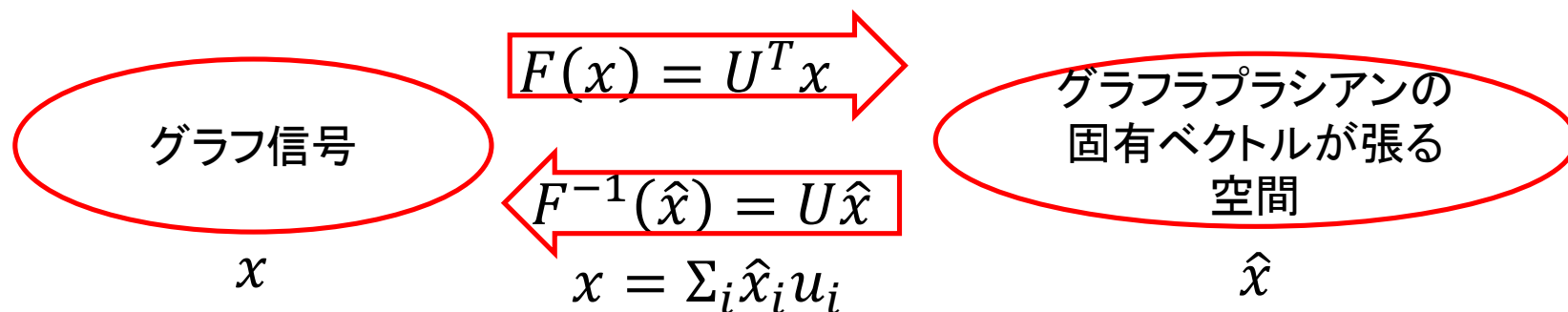
グラフラプラシアン の 性質

$D^{-1/2}$: 次数の平方根の対角行列

- $L = I - D^{-1/2} A D^{-1/2}$ は実対称半正定値行列
- $L = U \Lambda U^T$ と分解できる U^T : 転置行列
 - $U = [u_0, u_1, \dots, u_{n-1}]$ は L の固有ベクトルからなる行列
 - Λ は対応する固有値の対角行列 ($\Lambda_{ii} = \lambda_i$) $Lu_i = \lambda_i u_i$
- 正規化ラプラシアン行列の固有ベクトルは直交 ($U^T U = I$)
- グラフ信号処理: $x \in R^N$ はノードの特徴ベクトル
- グラフフーリエ変換: $F(x) = U^T x$
- 逆グラフフーリエ変換: $F^{-1}(\hat{x}) = U \hat{x}$

グラフフーリエ変換

- 信号処理
 - 入力信号をフーリエ変換で周波数空間に変換
 - 周波数空間でフィルタリング→復号でノイズ除去
- グラフフーリエ変換
 - 入力グラフ信号を直交空間に射影
 - 基底は正規化グラフラプラシアン固有ベクトル



グラフ畳み込み

ノードに対して定義された信号

一部を切り出す

パラメータ
 $\theta \in R^N$

- 入力グラフ信号 $x \in R^N$ のフィルタ $g_\theta = \text{diag}(\theta)$ による畳み込み

対角行列

$$g_\theta * x = U g_\theta(\Lambda) U^T x$$

$L = U \Lambda U^T$ の Λ が
フィルタ $g_\theta(\Lambda)$ に

- U は正規化グラフラプラシアン $L = I - D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} = U \Lambda U^T$ の固有ベクトルからなる行列
- Λ は固有値の対角行列
- D は次数行列
- A はグラフの隣接行列

→ フィルタ g_θ の違いによってさまざまな手法

ChebNet [Defferrard, NIPS 2016]

- フィルタ $g_\theta(\Lambda)$ として k 次までのチェビシェフ多項式 $T_k(x)$ を用いる
- $g_\theta * x \approx \sum_{k=0}^K \theta_k T_k(\tilde{L})x$
 - $\tilde{L} = \frac{2}{\lambda_{\max}} L - I$
 - $\lambda_{\max}$ は L の最大固有値
 - $\theta \in R^K$ はチェビシェフ多項式の係数のベクトル
 - $T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x)$,
 - $T_0(x) = 1, T_1(x) = x$
- (k 次の多項式なので) k -localized な畳み込み $\rightarrow L$ の固有ベクトル計算が不要

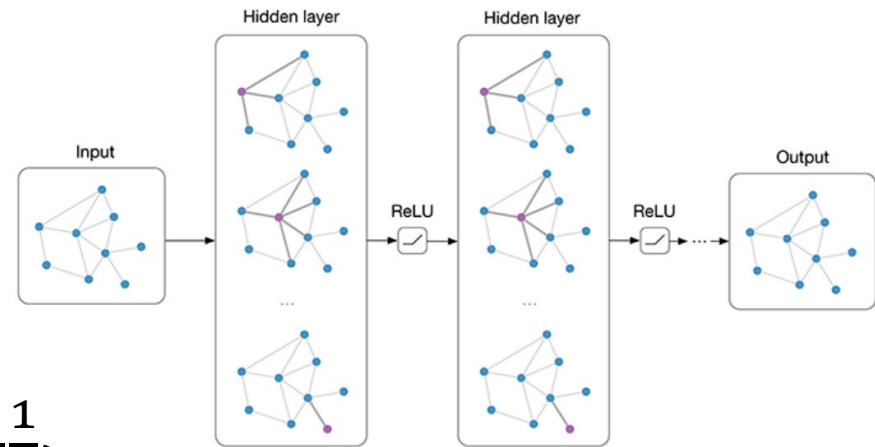
Michael Defferrard, Xavier Bresson, Pierre Vandergheynst, "Convolutional Neural Networks on Graphs with Fast Localized Spectral Filtering", Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS 2016), pp.3844-3852 (2016) <https://dl.acm.org/doi/10.5555/3157382.3157527>

チェビシェフ多項式

- $\cos n\theta$ は $\cos \theta$ の多項式で表せる。そのような n 次多項式をチェビシェフ多項式 $T_n(x)$ と呼ぶ。
- $\cos 2\theta = 2 \cos^2 \theta - 1$ より $T_2(x) = 2x^2 - 1$
- $\cos 3\theta = 4 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta$ より $T_3(x) = 4x^3 - 3x$
- $T_{n+2}(x) = 2xT_{n+1}(x) - T_n(x)$

GCN [Kipf, ICLR 2017]

- ChebNetにおいて $K = 1$ として、次数分布が大きいグラフでの過適合を回避
- さらに $\lambda_{max} \approx 2$ として単純化
- $g_{\theta'} * x \approx \theta'_0 x + \theta'_1 (L - I)x = \theta'_0 x - \theta'_1 D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} x$
 $-L = I - D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}$
- $\theta = \theta'_0 = -\theta'_1$ とすると
- $g_{\theta'} * x \approx \theta (I + D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}) x$



Thomas N. Kipf, Max Welling, "Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks", The 5th International Conference on Learning Representations (ICLR 2017) (2017)

<https://arxiv.org/abs/1609.02907> <https://tkipf.github.io/graph-convolutional-networks/>

GCN [Kipf, ICLR 2017]

- $g_{\theta'} * x \approx \theta(I + D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})x$
- この演算を繰り返すと勾配消失により不安定
→renormalization trick

- $I + D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}} \rightarrow \tilde{D}^{-\frac{1}{2}}\tilde{A}\tilde{D}^{-\frac{1}{2}}$

- $\tilde{A} = A + I$

- $\tilde{D}_{ii} = \sum_j \tilde{A}_{ij}$

チャンネル(属性数)

- さらに信号 X を $X \in R^{N \times C}$ に一般化

- $Z = \tilde{D}^{-\frac{1}{2}}\tilde{A}\tilde{D}^{-\frac{1}{2}}X\Theta$

フィルタ行列

- $\Theta \in R^{C \times F}$

フィルタサイズ

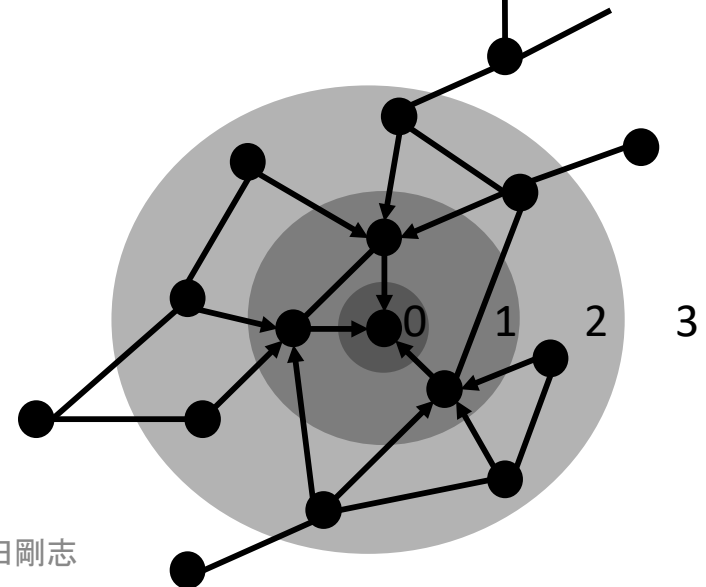
畳み込み
信号行列

グラフ畳み込みの2つのアプローチ

- Spectral-based
 - グラフ信号処理の立場からフィルタを導入してグラフ畳み込みを定義
 - 長所・短所:理論的な裏付け・行列の固有値分解が計算量大
- Spatial-based
 - 近傍のノードから特徴情報を集める処理としてグラフ畳み込みを定義
 - 長所・短所:直感的に理解しやすい・非常に多くのバリエーション

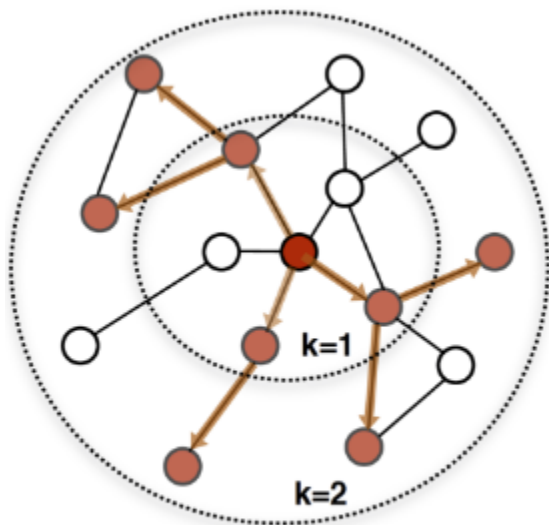
Spatial Convolution

- 近接ノードへの作用として畳み込みをグラフ上で直接定義
 - グラフラプラシアンは別のグラフには利用不可
- チャレンジ
 - 近接ノード数が大きく変化するグラフでの畳み込みの定義
 - 畳み込みの局所性の維持

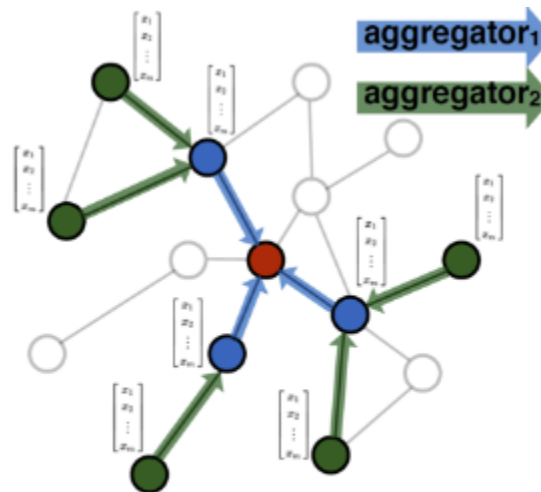


GraphSAGE [Hamilton, NIPS 2017]

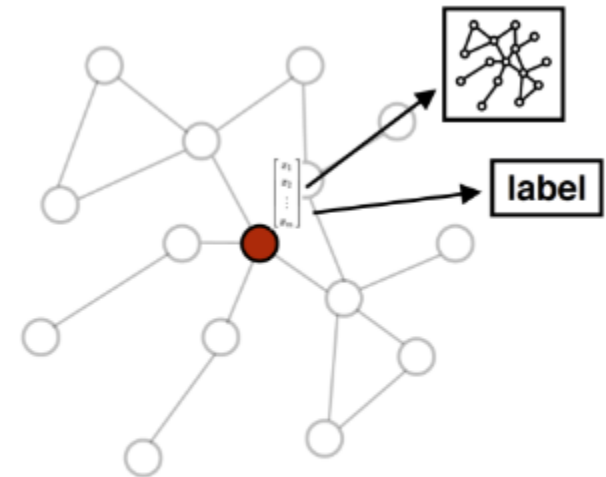
- 近傍のノードをサンプリングして特徴情報を集める→ノードのラベルを予測



1. Sample neighborhood



2. Aggregate feature information from neighbors



3. Predict graph context and label using aggregated information

William L. Hamilton, Rex Ying, Jure Leskovec, "Inductive Representation Learning on Large Graphs", Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS 2017), pp.1025-1035 (2017)

<https://dl.acm.org/doi/10.5555/3294771.3294869> <http://snap.stanford.edu/graphsage/>

GraphSAGE [Hamilton, NIPS 2017]

サンプリングでサイズ固定

- 各ノード v の近傍 $N(v)$ について

v の近傍の u の
表現を集める

- $h_{N(v)}^k = AGGREGATE(\{h_u^{k-1}, \forall u \in N(v)\})$

- $h_v^k = \sigma(W^k \cdot [h_v^{k-1} || h_{N(v)}^k])$

活性化関数

重み

v 自身の表現と
近傍の表現の結合

- 3つのaggregator関数

- Mean aggregator

- LSTM aggregator

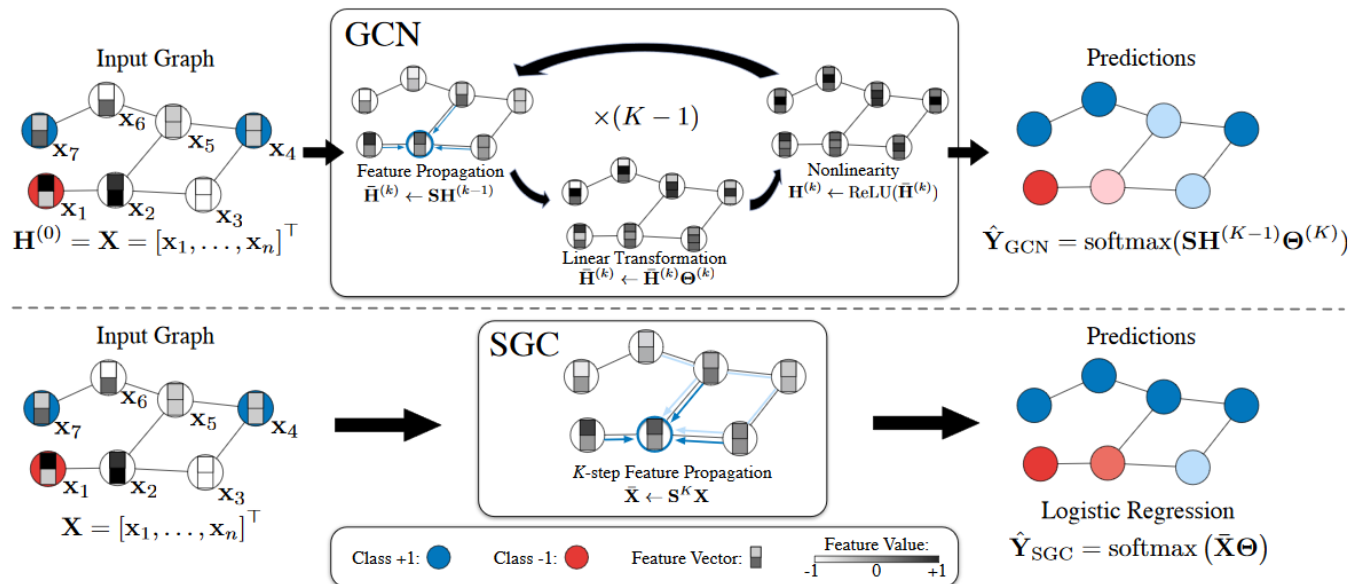
- Pooling aggregator

もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

Simplifying Graph Convolutional Networks [Wu, ICML 2019]

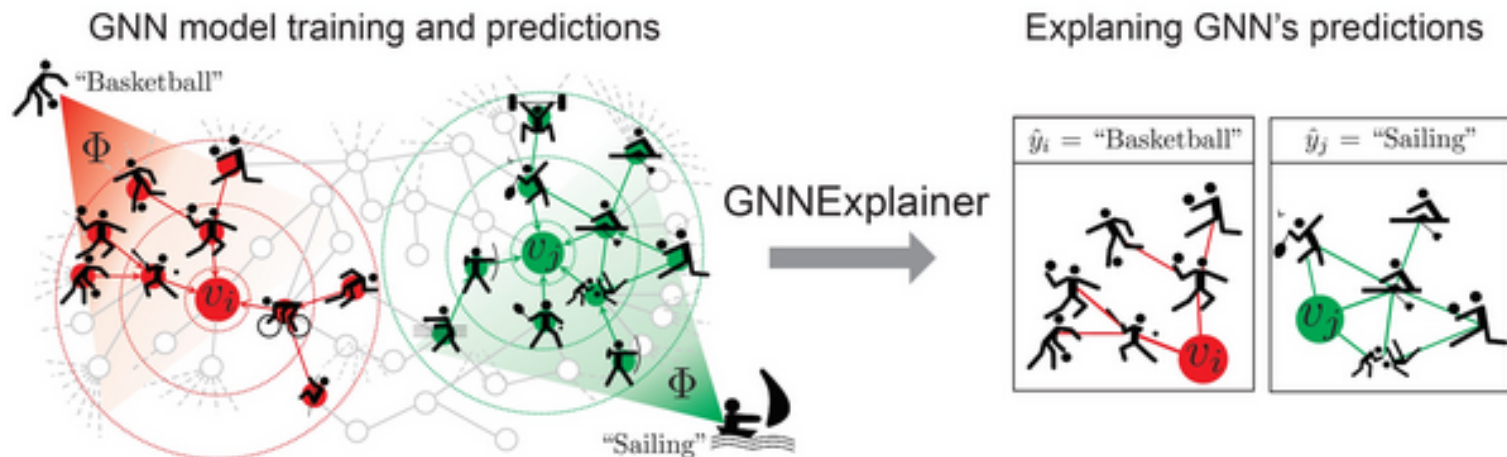
- GCNの(ReLUなどの)非線形関数を除去し、隣接層の重み行列をつぶす
- ローパスフィルタ＋線形分類器 に対応
- 単純化で高速化、解釈可能、精度悪化せず



Felix Wu, Tianyi Zhang, Amauri Holanda de Souza Jr., Christopher Fifty, Tao Yu, Kilian Q. Weinberger, "Simplifying Graph Convolutional Networks", Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning (ICML 2019) (2019) <https://arxiv.org/abs/1902.07153>

GNNExplainer: Generating Explanations for Graph Neural Networks [Ying, NeurIPS 2019]

- どのノードの特徴が予測に寄与したかを説明
- GCN, GraphSAGE, GAT, SGC等でのノード分類、グラフ分類、リンク予測に利用可



Rex Ying, Dylan Bourgeois, Jiaxuan You, Marinka Zitnik, Jure Leskovec, "GNNExplainer: Generating Explanations for Graph Neural Networks", Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2019), pp.9244–9255 (2019) <https://dl.acm.org/doi/10.5555/3454287.3455116>
<http://snap.stanford.edu/gnnexplainer/>

GNNの説明可能性

- Hao Yuan, Haiyang Yu, Shurui Gui, Shuiwang Ji, “Explainability in Graph Neural Networks: A Taxonomic Survey”, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol.45, pp.5782-5799 (2023)

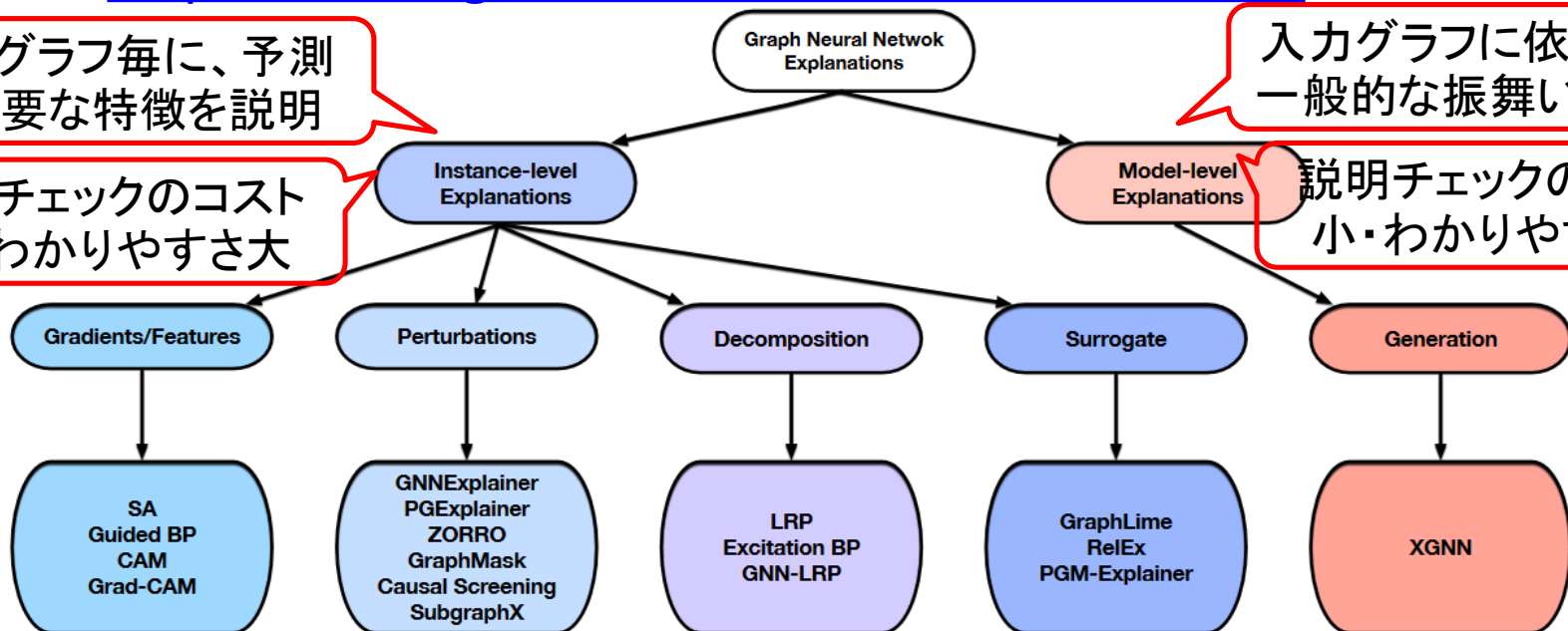
– <https://doi.org/10.1109/TPAMI.2022.3204236>

入力グラフ毎に、予測に重要な特徴を説明

説明チェックのコスト大・わかりやすさ大

入力グラフに依存せず一般的な振舞いを説明

説明チェックのコスト小・わかりやすさ小

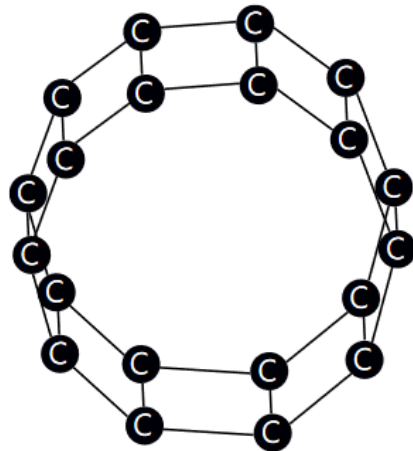


GNNの限界

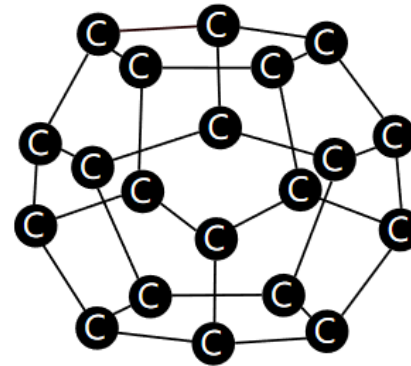
- グラフの中には、Weisfeiler-Lehman procedureで識別困難な非同型グラフが存在し、それらは(普通の)GNNでも識別が難しい
- Ryoma Sato, “A Survey on The Expressive Power of Graph Neural Networks” (2020)
 - <https://arxiv.org/abs/2003.04078>
- Pan Li, Jure Leskovec, “The Expressive Power of Graph Neural Networks”, in “Graph Neural Networks”, pp. 63-98, Springer (2022)
 - https://graph-neural-networks.github.io/gnnbook_Chapter5.html

GNNが区別できない例

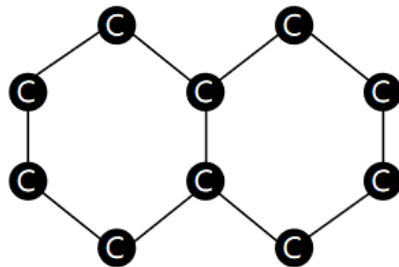
- R. Sato, “A Survey on The Expressive Power of Graph Neural Networks” (2020)
 - <https://arxiv.org/abs/2003.04078>



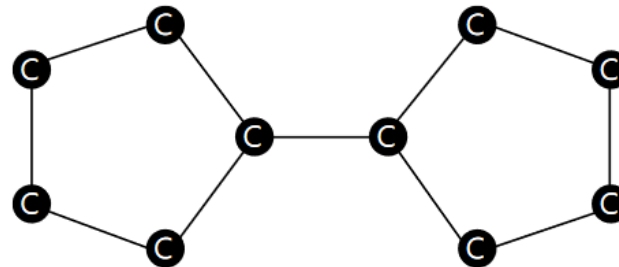
(a) Decaprismane.



(b) Dodecahedrane.



(a) Decalin.

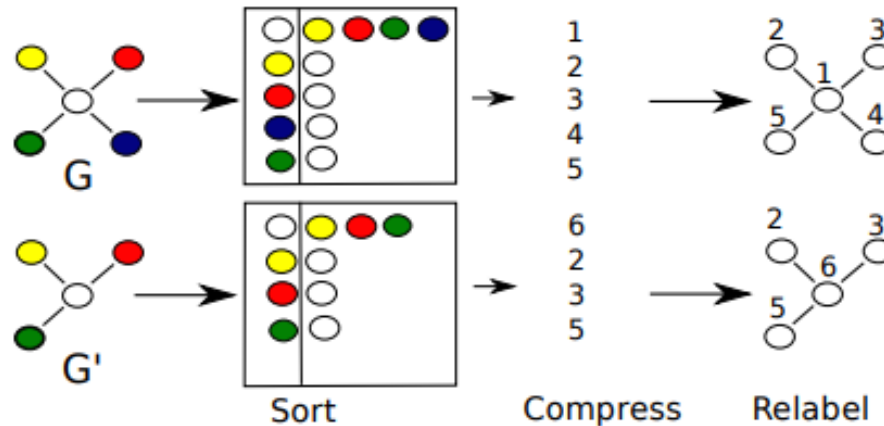


(b) Bicyclopentyl.

Weisfeiler-Lehman Procedure

- 2つのグラフが同型か否かを判定する手法

Weisfeiler-Lehman Procedure



A new subtree kernel

- Count common labels after each iteration
- Process N graphs simultaneously
- Use a global hash function for compression

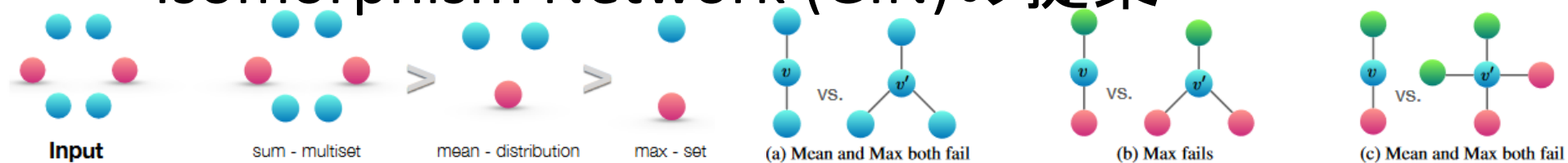
Karsten Borgwardt and Oliver Stegle: Computational Approaches for Analysing Complex Biological Systems, Page 12

Weisfeiler-Lehman Procedure

https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/bsse/borgwardt-lab/documents/slides/CA10_WeisfeilerLehman.pdf

How Powerful Are Graph Neural Networks? [Xu, ICLR 2019]

- GNNのグラフ識別能力は最高でもWL (Weisfeiler-Lehman) test と同等
- GNNがWL testと同等の識別能力となるための近傍頂点の集約と読み出し関数の条件を明確化
- GCNやGraphSAGE等のGNNでは識別できないグラフ構造の同定
- WL testと同等の識別能力のGraph Isomorphism Network (GIN)の提案



GNNの課題

- 画像や自然言語を対象とした深層学習では性能向上のため何百層にすることも
- グラフ畳み込みで層の数を増やすとover-smoothingになってしまう
 - ノードの表現が互いに近い値に収束

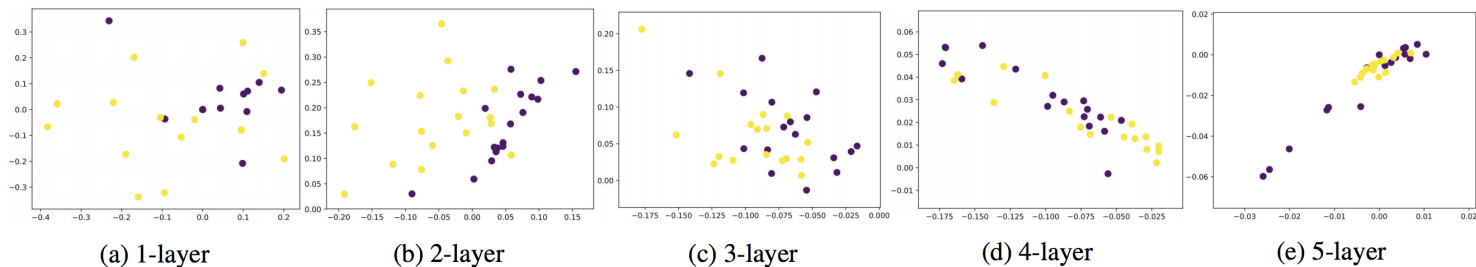


Figure 2: Vertex embeddings of Zachary's karate club network with GCNs with 1,2,3,4,5 layers.

Qimai Li, Zhichao Han, Xiao-Ming Wu, "Deeper Insights into Graph Convolutional Networks for Semi-Supervised Learning", Proceedings of the thirty-second AAAI conference on Artificial Intelligence (AAAI-18), pp.3538-3543 (2018) <https://dl.acm.org/doi/10.5555/3504035.3504468>

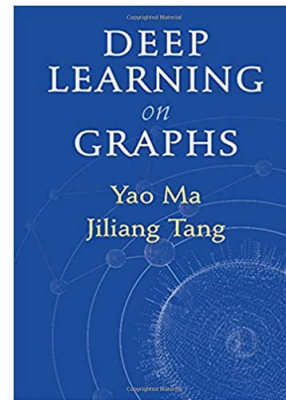
もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

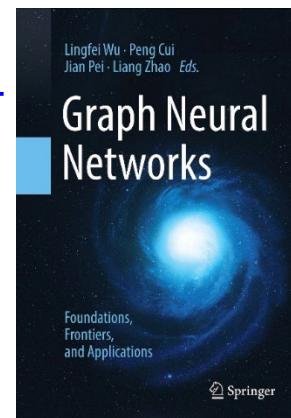
発展的トピック

- Graph Autoencoder
- Graph Attention Networks
- 敵対的攻撃
- 時空間畳み込み
- 動的グラフとGNN
- Graph Transformer
- ...

書籍



- Yao Ma, Jiliang Tang, “Deep Learning on Graphs”, Cambridge University Press (2021)
 - <https://doi.org/10.1017/9781108924184>
- Lingfei Wu, Peng Cui, Jian Pei, Liang Zhao, "Graph Neural Networks -- Foundations, Frontiers, and Applications“, Springer (2022)
 - <https://doi.org/10.1007/978-981-16-6054-2>
 - <https://graph-neural-networks.github.io/>



宣伝：本を出版しました

「グラフニューラルネットワーク: PyTorchによる実装」

村田 剛志 著

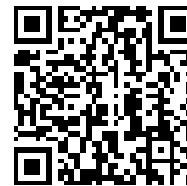
本体3,200円＋税

A5判／248頁

ISBN: 978-4-274-22887-2

発売日: 2022/07/20

発行元: オーム社



- オーム社

<https://www.ohmsha.co.jp/book/9784274228872/>

- サポートページ(関連論文のリンク集)

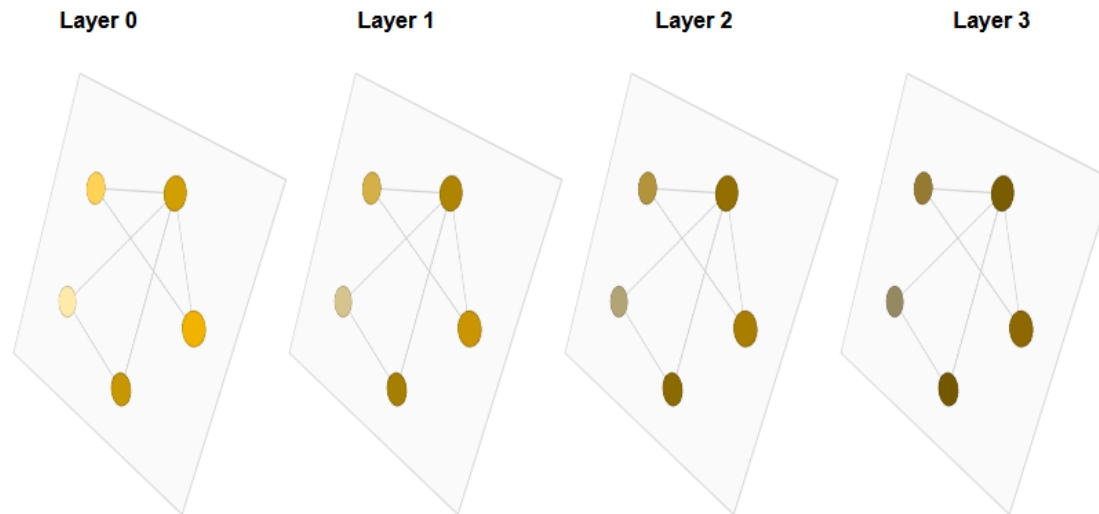
<https://github.com/atarum/GraphNeuralNetworks>

A Gentle Introduction to Graph Neural Networks

- <https://doi.org/10.23915/distill.00033>

A Gentle Introduction to Graph Neural Networks

Neural networks have been adapted to leverage the structure and properties of graphs. We explore the components needed for building a graph neural network - and motivate the design choices behind them.



Hover over a node in the diagram below to see how it accumulates information from nodes around it through the layers of the network.

Graph Neural Networks (deep learning for molecules & materials)

- マテリアル関係の研究者向けのサイト
- <https://dmol.pub/dl/gnn.html>



deep learning for
molecules & materials

Search this book...

Overview

A. MATH REVIEW

1. Tensors and Shapes

B. MACHINE LEARNING

2. Introduction to Machine Learning

3. Regression & Model Assessment



Contents

Target Audience

Framework Choice

Interactivity

Example models

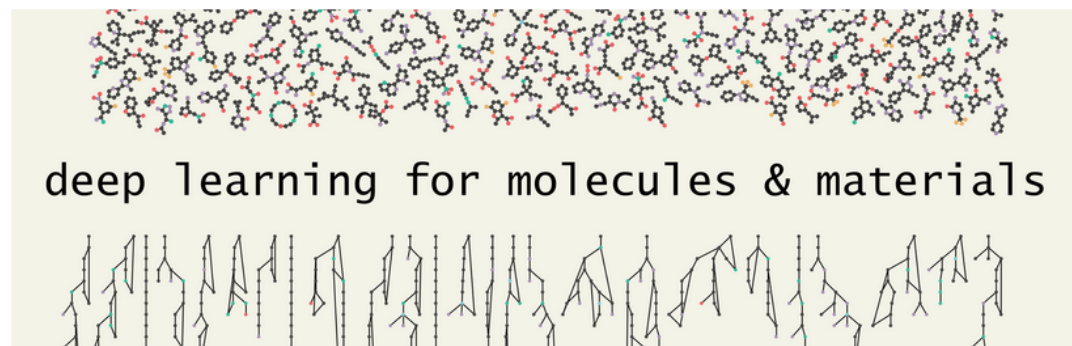
Table of Contents

Contributors

Citation

Funding Support

License (CC BY-NC 3.0)



Overview

Deep learning is becoming a standard tool in chemistry and materials science. Deep learning is specifically about connecting some input data (features) and output data (labels) with a neural network function. Neural networks are differentiable and able to approximate any function. The classic example is connecting a molecule's structure and function. A recent [example](#) is dramatically accelerating quantum calculations to the point that you can achieve DFT level accuracy with a neural network. What makes deep learning especially relevant is that it's a powerful tool for approximating previously intractable functions **and** its ability to generate new data.

Stanfordの講義 (Prof. Jure Leskovec)

- CS224W: Machine Learning with Graphs
 - <http://web.stanford.edu/class/cs224w/>
- 2021年の動画がYouTubeで視聴可能
 - CS224W: Machine Learning with Graphs | 2021 | Lecture 1.1 - Why Graphs
 - https://www.youtube.com/watch?v=JAB_plj2rbA

CS224W

Content

Schedule

Course Info

Projects

Office Hours

FAQ

Gradescope

Canvas



CS224W: Machine Learning with Graphs

Stanford / Fall 2023



Logistics

- **Lectures:** are on Tuesday/Thursday 3:00-4:20pm **in person** in the [NVIDIA Auditorium](#).
- **Lecture Videos:** are available on [Canvas](#) for all the enrolled Stanford students.
- **Public resources:** The lecture slides and assignments will be posted online as the course progresses. We are happy for anyone to use these resources, but we cannot grade the work of any students who are not officially enrolled in the class.
- **Contact:** Students should ask *all* course-related questions on Ed (accessible from Canvas), where you will also find announcements. For external inquiries, personal matters, or in emergencies, you can email us at cs224w-aut2324-staff@lists.stanford.edu.
- **Academic accommodations:** If you need an academic accommodation based on a disability, you should initiate the request with the [Office of Accessible Education \(OAE\)](#). The OAE will evaluate the request, recommend accommodations, and prepare a letter for the teaching staff. Once you receive the letter, send it to our staff email address. Students should contact the OAE as soon as possible since timely notice is needed to coordinate accommodations.

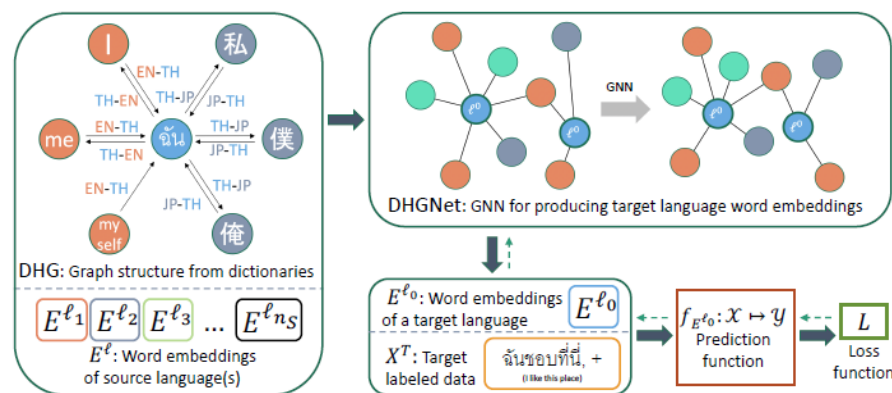
もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- **我々の研究事例**
- 学術指導について

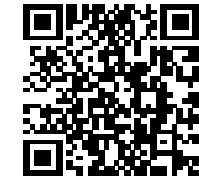
言語横断テキスト分類(CLTC)



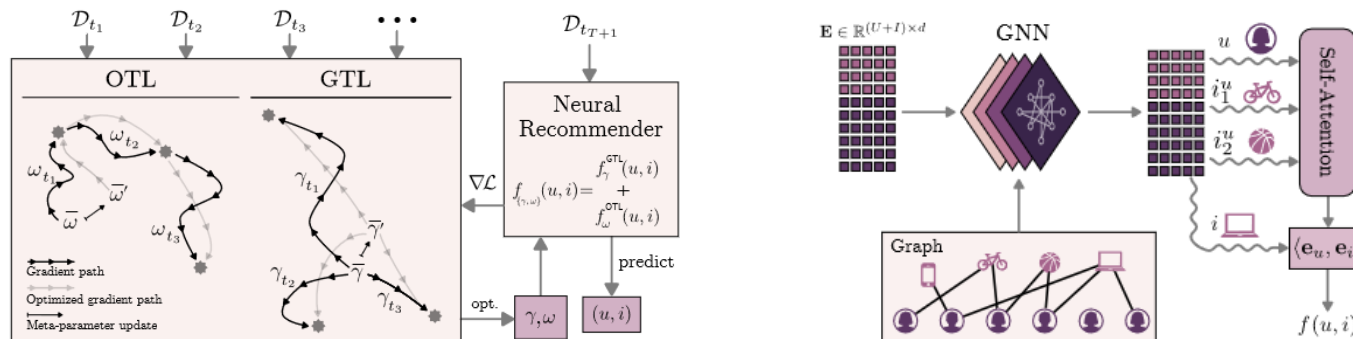
- 資源が豊富な言語の訓練データを使って、資源が乏しい言語の分類問題を解くための転移学習
 - 資源が豊富な言語のタスク固有の訓練データは入手困難
- 代替案として、資源が豊富な言語のタスクに依存しない単語埋め込みと、2言語間の辞書を用いたCLTCを提案
 - 2言語間の辞書から異種頂点グラフを作り、単語レベルと言語レベルの2段階集約を行うグラフニューラルネットワークを構築
 - 大規模コーパスを利用しないのに事前学習モデルよりも高性能



嗜好の時間変化に対応した 推薦システム



- ユーザの嗜好の変化に適応する時間的ダイナミクス問題に対し、軌跡に基づくメタ学習を用いて時間依存性をモデル化
- 提案手法LeapRecは、非順序の時間データに対して最短の学習経路を見つけることで長期的なパターンを学習するグローバルタイムリープ(GTL)と、時間データの順序性を考慮して短期的なパターンを学習するオーダードタイムリープ(OTL)の2つによってダイナミクスを特徴づける

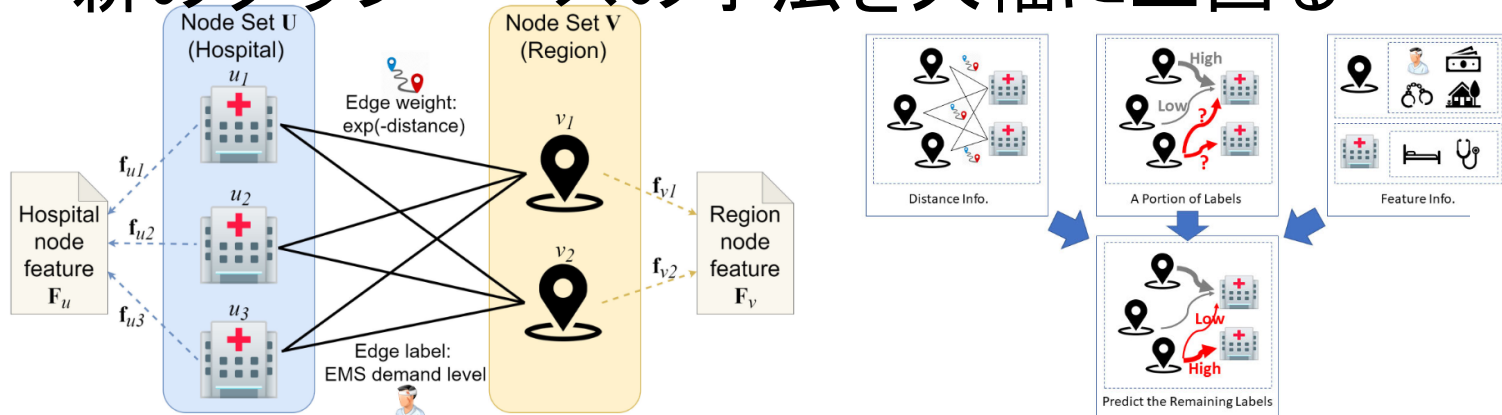


Nuttapong Chairatanakul, Nguyen Thai Hoang, Xin Liu, Tsuyoshi Murata, "Leaping Through Time with Gradient-based Adaptation for Recommendation", Proceedings of The Thirty-Sixth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-22), pp.6141-6149, 2022. <https://doi.org/10.1609/aaai.v36i6.20562>

2部グラフGCNによる救急医療サービスの需要予測



- 東京都の救急車データを病院-地域の2部グラフで表現し、救急需要(高/低)を予測する2部グラフ畳み込みニューラルネットワークモデルを提案
- 需要予測において77.3%~87.7%の精度を達成
 - 従来の機械学習アルゴリズム、統計モデル、および最新のグラフベースの手法を大幅に上回る



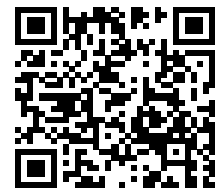
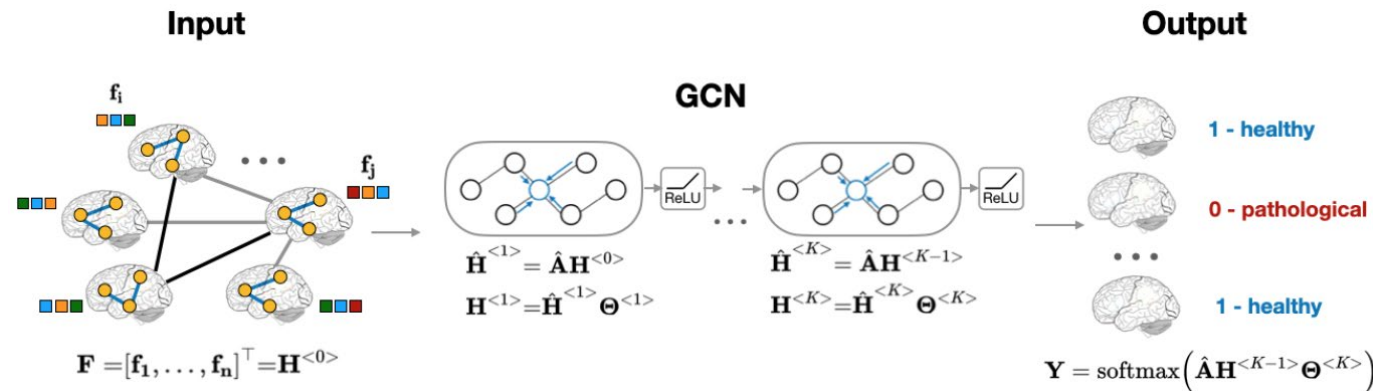
Ruidong Jin, Tianqi Xia, Xin Liu, Tsuyoshi Murata, Kyoung-Sook Kim, "Predicting Emergency Medical Service Demand With Bipartite Graph Convolutional Networks", IEEE Access, Vol. 9, pp.9903-9915, 2021.

<https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3050607>

GNNによる高精度な認知機能診断



- 脳画像技術や機械学習の進歩により、脳疾患の診断に大きな進歩
 - 健常者と患者を区別する機械学習モデルの開発は非常に重要
- population graphに基づくマルチモデルアンサンブルを提案
 - 画像と表現型の異なる組み合わせで(類似した患者の脳の) population graphを構築
 - 提案モデルはABIDEデータにおいて、最先端の手法よりも高性能



Zarina Rakhimberdina, Xin Liu, Tsuyoshi Murata, "Population Graph-Based Multi-Model Ensemble Method for Diagnosing Autism Spectrum Disorder", Sensors, Vol.20, No.21, 18 pages, 2020.

<https://doi.org/10.3390/s20216001>

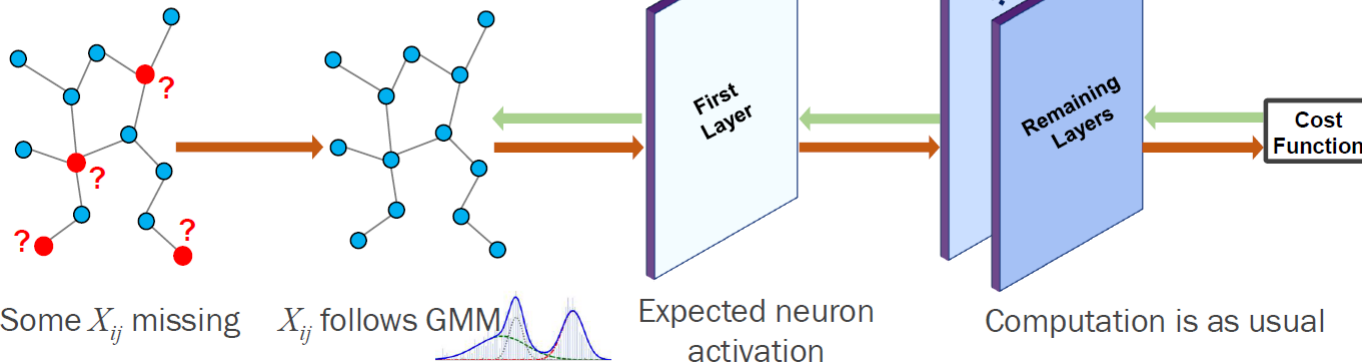
欠損値を含むグラフを扱うGNN



- 欠損した特徴の入力とグラフ学習を同じニューラルネットワークアーキテクチャ内に統合
 - 欠損データをガウス混合モデル(GMM)で表現し、GCNの第一隠れ層のニューロンの期待活性化を計算
- 従来の入力ベースの手法よりも高性能・頑強

Our Approach

Integrates processing of missing features and graph learning within the same architecture



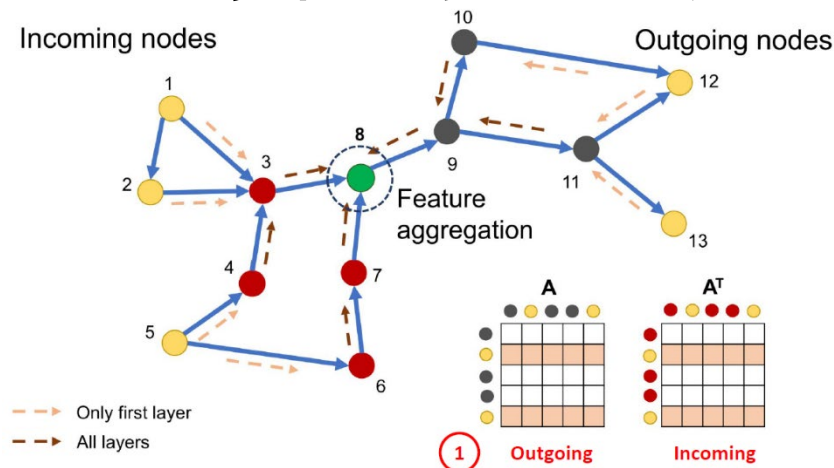
Hibiki Taguchi, Xin Liu, Tsuyoshi Murata, "Graph Convolutional Networks for Graphs Containing Missing Features", Future Generation Computer Systems, Vol.117, pp.155-168, Elsevier, 2021.

<https://doi.org/10.1016/j.future.2020.11.016>

中心性を高速に近似するGNN



- GNNによる媒介中心性の計算
- ノード特徴の制約付きメッセージパッシングを用いて、媒介中心性を近似
- 実データを用いた大規模な実験で、既存手法よりも
高性能・高速



Sunil Kumar Maurya, Xin Liu, Tsuyoshi Murata, "Graph Neural Networks for Fast Node Ranking Approximation", ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data, Vol.15, No.5, Article No.78, 2021.

<https://doi.org/10.1145/3446217>

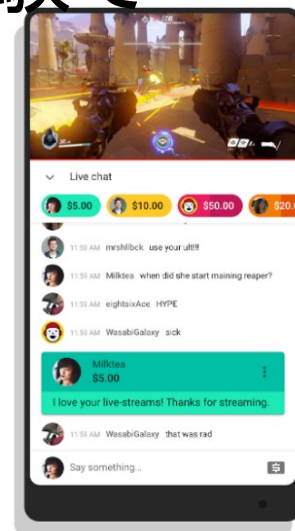
Sunil Kumar Maurya, Xin Liu, Tsuyoshi Murata, "Fast Approximations of Betweenness Centrality with Graph Neural Networks", Proc. of the 28th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management (CIKM'19) pp.2149–2152, 2019.

<https://doi.org/10.1145/3357384.3358080>

YouTubeの投げ銭(スーパーチャット) を予測するGNN



- 視聴者間のインタラクションを連続時間動的グラフとしてモデル化し、視聴者から配信者への投げ銭を予測
- 隣接ノードの時間差分に注目したTemporal Difference Graph Neural Network (TDGNN)を提案し、kaggleの公開データを用いた実験で精度向上



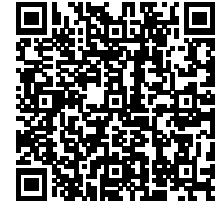
Jin Ruidong, Xin Liu, Tsuyoshi Murata, "Predicting Potential Real-time Donations in YouTube Live Streaming Services via Continuous-time Dynamic Graph ", Machine Learning, Springer (accepted)

<https://github.com/Tracy-King/YouTube>

もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について

宣伝：技術相談承ります



- 「東京工業大学 学術指導」で検索
 - <https://www.ori.titech.ac.jp/sangaku/research-contract/academic-consultation/>



The screenshot shows the homepage of the Tokyo Institute of Technology's Office of Research and Innovation. The header includes the university's name in Japanese and English, and navigation links for 'Enterprise/Local Government', 'Faculty', and 'Students/Graduates'. A main menu lists various research and innovation activities. The breadcrumb trail indicates the path: TOP > Industry-Academia Collaboration > Individual Faculty/Enterprise Research Collaboration > Academic Guidance. The main heading is 'Industry-Academia Collaboration' (産学連携). The 'Academic Guidance' (学術指導) section is highlighted, with a description: 'A system where university faculty provide guidance or advice based on their own knowledge and technology for specific topics requested by enterprises. Academic guidance is implemented based on an agreement with the university, and a guidance fee is payable.' A sidebar on the left lists 'Individual Faculty/Enterprise Research Collaboration' (個々の教員・企業で行う研究の連携) with sub-items: 'Joint Research' (共同研究), 'Entrusted Research' (受託研究), and 'Academic Guidance' (学術指導).

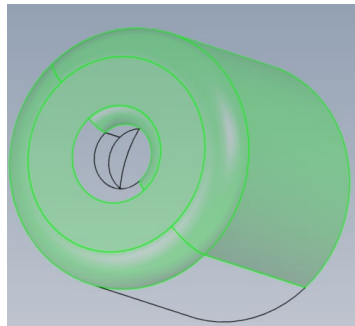
学術指導例(1): 機械加工

- 株式会社LIGHTz様



– <https://lightz-inc.com/>

- 3次元形状加工での熟達設計者の暗黙的な知を機械学習によって明確化

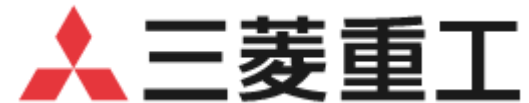


手元の図面から
気になる
形状を指定して
検索

過去製品モデルの図面と、不良
発生メカニズムの組合せを検索

学術指導例(2):交通量予測

- 三菱重工業株式会社様



– <https://www.mhi.com/jp>

- 計測機器により収集された交通量データの分析
- 渋滞緩和の施策に繋がるデータ分析技術の開発



もくじ

- グラフニューラルネットワーク(GNN)とは
- GNNの応用
- グラフエンベディング
- グラフ畳み込みの2つのアプローチ
- GNNの単純化・説明可能性・限界・課題
- 発展的トピック・参考文献・参考Webサイト
- 我々の研究事例
- 学術指導について



【第70回AIセミナー】グラフニューラルネットワークやグラフ表現学習の最前線
2023.10.17(火)

グラフニューラルネットワークによる構造データ機械学習

東京工業大学 村田剛志

<http://www.net.c.titech.ac.jp>