

先端科学技術研究科 博士論文要旨

所属研究室 (主指導教員)	数理情報学 (池田 和司 (教授))		
学籍番号	1921004	提出日	令和 4年 1月 17日
学生氏名	伊藤 健史		
論文題目	Compositionality-Aware Graph Representation Learning 構成性を考慮したグラフ表現学習		
要旨			
<p>Graph neural networks (GNNs) have been widely used to learn vector representations of graph-structured data and have achieved better task performance than conventional graph machine learning methods. The foundation of GNNs is the message passing procedure, which propagates information from a node to its neighbors. Therefore, message passing GNNs can exploit the stationarity and locality of graphs.</p> <p>However, existing GNN methods have limitations in capturing and exploiting the compositionality of graphs while learning graph representations. Because message passing is executed one step at a time for each layer, the range of the information propagation among nodes is small in the lower layers, and it expands toward the higher layers. Therefore, a GNN model must be deep enough to capture the global structural information in a graph. By contrast, it is known that deep GNN models suffer from performance degradation because they lose the local information of nodes, which would be essential for good model performance, because of the large number of message passing steps. In other words, there is a trade-off between using deep GNNs to capture global graph information and using shallow ones to focus on local information.</p> <p>In this dissertation, we propose multi-level attention pooling (MLAP) for graph representation learning (GRL), which can adapt to both local and global structural information in a graph. It has an attention pooling layer for each message passing step and computes the final graph representation by unifying layer-wise graph representations. The MLAP architecture allows models to utilize the structural information in graphs with multiple levels of localities because it preserves layer-wise information before losing them. Results of our experiments show that the MLAP architecture improves performance compared with the baseline architectures, both in graph classification tasks and graph-to-sequence (graph2seq) tasks. In addition, analyses of the layer-wise graph representations indicate that aggregating information from multiple levels of localities is indeed beneficial for learning discriminative graph representations. Although the exploitation of compositionality in neural network studies is just in its infancy, we believe that analyzing compositionality is key to building high-performance and interpretable machine learning models, both in GRL and other machine learning domains.</p>			

氏名	伊藤 健史
----	-------

(論文審査結果の要旨)

IoTの進展によるビッグデータ時代において、多くのデータは単純なベクトル型ではなくグラフ構造を持っており、その構造を生かした情報処理が必要である。グラフニューラルネットワーク (GNN) は AI の主役である深層学習を発展させグラフ構造を扱えるようにしたものであり、多くの課題でよい性能を示している。しかし従来の GNN はその階層性により、複雑な構造を持つグラフ、例えば階層構造を持つグラフのように局所的構造と大域的構造を同時に持つようなグラフに対しては、その特徴を捉えきれていなかった。

本研究は、multi-level attention pooling (MLAP) という構造を GNN に導入し、上の問題の解決をはかったものである。標準的データセットに対する実験に依り、提案手法の優位性を確認している。また、階層構造を持つグラフを利用して、局所的構造と大域的構造が目論見通りに抽出されていることを確認している。

以上をまとめると、本論文は複雑な構造を持つグラフにも対応できるように GNN を拡張する方法を提案したものであり、今後の GNN のスタンダードになりうる技術を提供している。よって、博士 (工学) の学位に値するものと認められる。