

## 著者まえがき

---

「グラフ」は社会学や言語学、化学、生物学、物理学といった様々な領域のデータを表現するために利用されている。それと同時に、現実世界における多くの課題は、グラフ上の計算タスクとみなすことができる。

- ・ノード分類タスク (例. 大気質予測):  
与えられたノード (空間的な位置) の性質 (大気質) を分類するタスク.
- ・リンク予測タスク (例. SNS 上のユーザーレコメンド):  
与えられたノード (ユーザ) 同士に接続があるかを予測するタスク.
- ・グラフ分類タスク (例. タンパク質の相互作用予測):  
与えられたグラフ (タンパク質ペア) の性質 (結合関係にあるか) を分類するタスク.

これらの計算タスクに現代の機械学習モデルを効果的に当てはめるには「グラフからどのように有用な情報を抽出し表現するか」が重要となってくる。グラフから有用な情報を抽出する方法として、「特徴量エンジニアリング」と「特徴量学習」の方法が存在している。特徴量エンジニアリングは手作業による特徴量の抽出に依存するため、時間がかかり、与えられた下流タスクに最適ではない場合がある。一方で、特徴量学習は有用な情報 (特徴量) を自動的に学習することにより手作業は最小限に抑えられるため、与えられた下流タスクに適応することができる。このことからグラフに対する特徴量学習が広範囲に研究されている。

グラフ特徴量学習の分野は目覚ましく発展しており、その歴史を通じて、大まかに「古典的グラフ埋め込み」、「現代的グラフ埋め込み」、「グラフ深層学習」の3つの世代に分けることができる。第1世代の古典的グラフ埋め込みは、「IsoMap」、「LLE (Locally Linear Embedding)」、「ラプラシアン固有マップ」といったグラフ上の古典的な次元削減技術の文脈で研究された。この古典的なアプローチに続いて、Word2vec が登場した。Word2vec は大規

模なテキストデータセット（コーパス）を用いて単語の表現を学習する技術である。この技術によって生成された単語表現（単語埋め込み）は、多くの自然言語処理タスクの発展に寄与した。この Word2vec による成功はグラフ領域にも影響を広げ、特徴量学習の第 2 世代、すなわち現代的グラフ埋め込みへの取り組みに繋がった。その後、画像やテキスト領域における深層学習（ディープラーニング）の大成功から、これらの技術をグラフに適用する試みが始まり、グラフ特徴量学習における新たな時代「グラフ深層学習」の研究が始まった。

グラフ特徴量学習の分野では、特に第 3 世代に位置づけられるグラフニューラルネットワーク（GNN）の登場により、ノードやグラフを対象とする様々な計算タスクが劇的に容易になっていることが多くの証拠によって実証されている。GNN による画期的な進展は、現実世界の応用においてグラフ特徴量学習をより深く、広範囲に活用させることに大きく貢献している。例えばレコメンドシステムや SNS 分析など、グラフ特徴量学習の従来からの応用分野において、GNN は優れた性能を発揮し、新たな可能性の道を切り開いている。また、組み合わせ最適化や物理学、医療など、GNN が効果を発揮する新たな応用分野も次々に現れてきている。このような GNN の多岐にわたる応用は、様々な専門分野の多様な貢献と視点を引き出しており、その研究領域を真に学際的なものへと変貌させている。

グラフ特徴量学習は現在急速に成長している分野であり、様々な分野から注目を集めている。私たちは、日々この分野に関する文献が蓄積されている中で、その体系的な調査と整理が求められている時期であると考えたので本書を執筆した。本書は、我々の長年の教育と研究の経験を生かし、グラフ特徴量学習の基礎からその多様な応用までを網羅することを目指している。特に、世界中の研究者がこの分野の基本的な知識を身につけ、これから訪れるであろう進展と展開を理解できるようにまとめている。

## 本書の概要

本書は、グラフ深層学習（グラフデータを扱うための深層学習の手法全体）の中でも、特に GNN に焦点を当てたグラフ特徴量学習の包括的な入門書である。本書は最初の導入章である第 1 章を除いて、「基礎」、「方法」、

「応用」, 「発展」の四部構成である。

- ・基礎 (第2章～第3章) 「グラフ」と「深層学習」を知るために必要な基礎知識および基礎概念を紹介する。
- ・方法 (第4章～第9章) グラフ埋め込み, 様々な種類のグラフに対する GNN, GNN のロバスト性やスケーラビリティの問題, GNN 以外のディープラーニングモデルなどのトピックを扱う。
- ・応用 (第10章～第13章) 自然言語処理, 画像処理, データマイニング, 生化学, 医療など, 典型的な分野における GNN の応用を紹介する。
- ・発展: (第14章～第15章) 興味のある読者のために, より高度なトピックについて解説している。

## 対象読者

本書は, グラフ理論や微積分, 線形代数, 確率論, 統計学の基本的な知識があると技術的な詳細を深く理解できるが, 最低限の予備知識で理解できるような説明を心がけている。そのため, 様々な読者層がそれぞれの目的に合わせて読むのに適している。

- ・学部生, 大学院生: 本書はグラフ深層学習の内容を体系的に知るための参考書になるだろう。特にこの研究分野を追求したいと考える研究者は本書から入門すると良い。
- ・実務者, プロジェクト責任者: 本書を通じて GNN の応用を学ぶことで, 自社製品やプラットフォームに取り入れる方法を探ることができる。
- ・他分野の研究者: コンピュータサイエンス以外の分野の研究者も, この本を通じて, 自分たちの研究領域への GNN の応用のヒントを見つけることができる。

## 謝辞

私たちはまず, 家族にこの本を捧げたい。彼らの支援と励ましがなければ本書は実現しなかったであろう。

グラフ特徴量学習は, 古典的なグラフ埋め込みから現代的なグラフ埋め込

み、そしてグラフニューラルネットワークへと、驚異的な成長を遂げた。我々はこの3世代を目撃する幸運に恵まれたと思っている。このような進化は、多くの研究者による先駆的な研究なしには不可能であった。今ではグラフ特徴量学習を活用して、様々な分野の応用へと展開する取り組みも増えてきている。グラフ特徴量学習は、まさに学際的な研究分野となっている。この分野に貢献している全ての人々に感謝したい。彼らの努力により、この分野の本を出版することができただけでなく、機械学習における最も人気のあるトピックの一つとなったためである。

本書を執筆しようと思ったのは、Huan Liu (アリゾナ州立大学) から強いインスピレーションを受けたからである。彼は数十年にわたり特徴量選択の研究に取り組み、2010年に彼がグラフ上の特徴量選択に関して独創的な提案を行ったことで、私たちはグラフ特徴量学習の道に歩み始めた。その後2014年に現代的なグラフ埋め込みに関する研究を共に始めた Charu Aggarwal (IBM Research) と Shiyu Chang (カリフォルニア大学サンタバーバラ校) に感謝したい。

また、我々は2010年からこの分野に取り組んでおり、次の共同研究者たちから多大な支援を得てきた：Salem Alelyani (キング・ハーリッド大学), Yi Chang (吉林大学), Ken Frank (ミシガン州立大学), Huiji Gao (LinkedIn 社), Xia Hu (テキサス A&M 大学), Anil Jain (ミシガン州立大学), Shuiwang Ji (テキサス A&M 大学), Jundong Li (バージニア大学), Zitao Liu (TAL 教育グループ), Sinem Mollaoglu (ミシガン州立大学), Shin-Han Shiu (ミシガン州立大学), Kai Shu (イリノイ工科大学), Pang-Ning Tan (ミシガン州立大学), Lei Tang (Lyft 社), Guanhua Tu (ミシガン州立大学), Suhang Wang (ペンシルベニア州立大学), Lingfei Wu (JD.com), Yuying Xie (ミシガン州立大学), Ming Yan (ミシガン州立大学), Dawei Yin (Baidu 社), Mi Zhang (ミシガン州立大学), Jiayu Zhou (ミシガン州立大学)。

ミシガン州立大学のデータサイエンス・エンジニアリング研究室に現メンバーと元メンバーに感謝したい：Meznah Almutairy, Norah Alfadhli, Aaron Brookhouse, Jamell Dacon, Daniel K. O-Dankwa, Tyler Derr, Jiayuan Ding, Wenqi Fan, Haoyu Han.

さらに、本書のドラフト段階における貴重なコメントやフィードバックを寄せてくれた方々にも感謝を表したい：O-Dankwa, Tyler Derr, Jiayuan Ding, Wenqi Fan, Haoyu Han, Jiangtao Huang, Hamid Karimi, Wei Jin, Juanhui Li, Yaxin Li, Haochen Liu, Hua Liu, Xiaorui Liu, Jie Ren, Namratha Shah, Harry Shomer, Yuxuan Wan, Wentao Wang, Yiqi Wang, Xochitl Weiss, Hongzhi Wen, Xiaoyang Wang, Xin Wang, Zhiwei Wang, Han Xu, Xiangyu Zhao.

本書のプレプリント段階におけるご指摘をいただいた Xavier Sumba (Heyday.ai), Shunshi Hu (湖南師範大学), Kannan Presanna Kumar (SAP), Chen Chen (寧夏師範大学) に感謝する。

ミシガン州立大学のコンピュータサイエンス・エンジニアリング学部は、本書執筆のために素晴らしい環境を提供してくれた。また、グラフ特微量学習に関する我々の研究の一部は、全米科学財団、陸軍研究局、NEC Labs America, Snap Inc., The Ford Motor Company, JD.com, Criteo Labs, TAL Education Group の支援を受けている。特に、Hector Munoz-Avila, Zhengchang Chen, Wei Ding, Purush S. Iyer, Balakrishnan Prabhakaran, Neil Shah, Finbarr Sloane, Maria Zemankova, Aidong Zhang は、グラフ特微量学習における我々の研究をサポートしてくれた。ケンブリッジ大学出版局から協力を得られたのはとても光栄なことである。ケンブリッジ大学の数学・計算機科学のシニア編集者である Lauren Cowles の手厚いサポート、ケンブリッジ大学の親切なスタッフである Amy He と Mark Fox, そして本書の制作に尽力してくれた SPi Global の Harshavardhanan Udhayakumar と彼の同僚にも感謝したい。

Yao Ma

Jiliang Tang

ミシガン州イーストランシング

# 訳者まえがき

---

本書は、グラフを対象とした深層学習の基本原則を扱った「Deep Learning on Graphs」の邦訳書です。本書の翻訳に当たっては「読みやすさ」を最も重視しました。現在、深層学習分野は非常に進展が速いので、そこで使われる技術や必要知識といった常識はどんどん変わっていています。実際、原著者らは技術的な詳細にこだわるよりも、大枠の概念の把握ができるような説明に力を入れています。そのような状況や意向を鑑みながら、日本語版は「理論書でありながら、忠実で固い直訳調に寄りすぎず、論理的厳密性をなるべく保った意識版」としての完成を目指しました。

## 必要となる前提知識について

本書はなるべく少ない知識で済むように工夫されておりますが、以下の知識を有している読者が想定されております。

### 応用数学

「微積分」と「線形代数」は重要な土台となるので、ある程度は体系的な理解が必須です。これら2分野については、以下で挙げた参考文献（拙訳）の一部をサポートページ上で公開しています。是非ご活用ください。

#### ● 必要知識（キーワード）：

- 微積分：常微分，偏微分，連鎖律（合成関数の微分）
- 線形代数：ベクトル，行列，行列式，固有値と固有ベクトル，行列分解
- 統計学：期待値，分散，確率分布，条件付き確率，最尤推定
- 情報理論：自己情報量，交差エントロピー，KL ダイバージェンス
- 集合論：集合の定義と表記，集合演算（和・差），部分集合，順序対

#### ● 参考文献（微積分・線形代数）：

- マリー R. シュピーゲル 著 「解きながら学ぶ 完全独習 応用数学」（ブリアデス出版），2023

## 深層学習

「深層学習の動作原理」の全体的なプロセスについて、直感的に把握していることが望ましいです。

### • 必要知識（キーワード）：

順伝播型ネットワーク，誤差逆伝搬，勾配降下法，活性化関数，正則化，CNN，RNN，LSTM，Word2vec (Skip-gram)，アテンション機構

### • 参考文献：

- 斎藤 康毅 著 「ゼロから作る Deep Learning -Python で学ぶディープラーニングの理論と実装」(オライリージャパン), 2016
- 斎藤 康毅 著 「ゼロから作る Deep Learning 2 -自然言語処理編」(オライリージャパン), 2018

## グラフ理論

「グラフはノード（頂点）とエッジ（辺）で構成される」とだけ知っていれば大丈夫です。そのほかは予備知識ゼロで構いません。

## サポートページ

<https://deeplearning-on-graphs.github.io/>

## 参考文献について

紙面の都合上，原著にある「参考文献 (Bibliography)」はサポートページに載せる形になりました。適宜ご参照ください。

## 読書アシスタントについて

実験的な試みとして，「LLM（大規模言語モデル）を取り入れた読書アシスタントツール」を公開しました。本チャット AI は，訳文を事前情報として与え，本書の内容に関する疑問に答えてくれるように設計しています。使い方などの詳細はサポートページをご確認ください。

訳者

2024 年 1 月

## 目次

---

第 1 章	グラフ深層学習：イントロダクション	1
1.1	はじめに	1
1.2	なぜグラフニューラルネットワークなのか？	1
1.3	この本で扱うこと	4
1.4	想定読者	8
1.5	グラフの表現学習に関する歴史	9
1.5.1	グラフにおける特徴量選択	11
1.5.2	グラフにおける表現学習	12
1.6	本章のまとめ	16
1.7	参考文献	16
第 I 部	基礎	17
第 2 章	グラフ理論の基礎	19
2.1	はじめに	19
2.2	グラフの表現	20
2.3	グラフの性質と様々な指標	22
2.3.1	次数	22
2.3.2	連結性	24
2.3.3	中心性	28
2.3.3.1	次数中心性	28
2.3.3.2	固有ベクトル中心性	29
2.3.3.3	Katz 中心性	30
2.3.3.4	媒介中心性	31
2.4	スペクトルグラフ理論	32
2.4.1	ラプラシアン行列	33
2.4.2	ラプラシアン行列の固有値と固有ベクトル	34
2.5	グラフ信号処理	36

## 目次

2.5.1	グラフフーリエ変換	38
2.6	複雑グラフ	40
2.6.1	ヘテログラフ	41
2.6.2	二部グラフ	42
2.6.3	多次元グラフ	43
2.6.4	符号付きグラフ	44
2.6.5	ハイパーグラフ	45
2.6.6	ダイナミックグラフ	46
2.7	グラフを使った分析タスク	48
2.7.1	ノードを対象としたタスク	48
2.7.1.1	ノード分類	48
2.7.1.2	リンク予測	50
2.7.2	グラフを対象としたタスク	51
2.7.2.1	グラフ分類	51
2.8	本章のまとめ	52
2.9	参考文献	53
第3章	深層学習の基礎	55
3.1	はじめに	55
3.2	深層順伝播型ネットワーク	57
3.2.1	ネットワークの構成	58
3.2.2	活性化関数	60
3.2.2.1	ReLU 関数	60
3.2.2.2	ロジスティックシグモイド関数と tanh 関数	62
3.2.3	出力層と損失関数	63
3.2.3.1	二値分類	64
3.2.3.2	多値分類	64
3.3	畳み込みニューラルネットワーク	65
3.3.1	畳み込み演算と畳み込み層	66
3.3.1.1	スパース結合	68
3.3.1.2	パラメータ共有	69
3.3.1.3	平行移動に対する同変性 (equivariant representation)	70

## 目次

3.3.2	実際の畳み込み層	70
3.3.3	検出層（非線形活性化層）	72
3.3.4	プーリング層	73
3.3.5	CNN フレームワークの全体像	73
3.4	RNN：リカレントニューラルネットワーク	74
3.4.1	従来の RNN の構成	75
3.4.2	LSTM (Long Short-Term Memory)	76
3.4.3	GRU (Gated Recurrent Unit)	79
3.5	オートエンコーダー（自己符号化器）	80
3.5.1	不完全オートエンコーダー	82
3.5.2	正則化オートエンコーダー	82
3.6	深層ニューラルネットワークの学習	83
3.6.1	勾配降下法	84
3.6.2	誤差逆伝播法	85
3.6.3	過学習の抑制	88
3.6.3.1	重み正則化	88
3.6.3.2	ドロップアウト	88
3.6.3.3	バッチ正規化	89
3.7	本章のまとめ	89
3.8	参考文献	89
第 II 部	手法	91
第 4 章	グラフ埋め込み	93
4.1	はじめに	93
4.2	単純グラフのグラフ埋め込み	95
4.2.1	ノード共起性の保存	95
4.2.1.1	マッピング関数	96
4.2.1.2	ランダムウォークに基づく共起性の抽出	96
4.2.1.3	共起性の再構成および目的関数	99
4.2.1.4	学習過程の高速化	101
4.2.1.5	階層的ソフトマックス	101
4.2.1.6	ネガティブサンプリング	103

## 目次

4.2.1.7	実際の学習プロセスについて：バッチ処理	104
4.2.1.8	共起性を保存するその他の手法	105
4.2.1.9	node2vec	105
4.2.1.10	LINE	106
4.2.1.11	行列分解による表示	107
4.2.2	構造的役割の保存	108
4.2.2.1	構造類似性の測定	108
4.2.2.2	構造類似性に基づくグラフの生成	110
4.2.2.3	多層グラフ上での偏りのあるランダムウォーク	111
4.2.3	ノード状態の保存	112
4.2.3.1	情報抽出	112
4.2.3.2	再構成	113
4.2.4	コミュニティ構造の保存	113
4.2.4.1	ノード指向構造の保存	114
4.2.4.2	ノード指向構造の保存：情報抽出	114
4.2.4.3	ノード指向構造の保存：再構成および目的関数	115
4.2.4.4	コミュニティ構造の保存	115
4.2.4.5	全体の目的関数	117
4.3	複雑グラフ上のグラフ埋め込み	117
4.3.1	ヘテログラフの埋め込み	117
4.3.1.1	メタパスに基づく情報抽出	119
4.3.1.2	再構成	120
4.3.2	二部グラフの埋め込み	121
4.3.2.1	情報抽出	121
4.3.2.2	再構成および目的関数	122
4.3.3	多次元グラフの埋め込み	123
4.3.3.1	マッピング関数	123
4.3.3.2	情報抽出	124
4.3.3.3	再構成および目的関数	124
4.3.4	符号付きグラフの埋め込み	124
4.3.4.1	情報抽出	125

## 目次

4.3.4.2	再構成	127
4.3.4.3	目的関数	128
4.3.5	ハイパーグラフの埋め込み	128
4.3.5.1	情報抽出	129
4.3.5.2	マッピング関数	129
4.3.5.3	再構成および目的関数	129
4.3.6	ダイナミックグラフの埋め込み	131
4.3.6.1	情報抽出	131
4.4	本章のまとめ	133
4.5	参考文献	133
第5章	グラフニューラルネットワーク	135
5.1	はじめに	135
5.2	一般的な GNN のフレームワーク	138
5.2.1	ノードを対象としたタスクのフレームワーク	138
5.2.2	グラフを対象としたタスクのフレームワーク	138
5.3	グラフフィルタ	140
5.3.1	スペクトル型グラフフィルタ	141
5.3.1.1	グラフの周波数フィルタリング	142
5.3.1.2	スペクトル型グラフフィルタ	144
5.3.1.3	チェビシェフ多項式とチェビシェフフィルタ	149
5.3.1.4	GCN フィルタ：単純化された 1 次のチェビシェフ フィルタ	152
5.3.1.5	複数チャンネルのグラフ信号に対するグラフフィルタ	153
5.3.2	空間型グラフフィルタ	155
5.3.2.1	最初期のグラフニューラルネットワーク (GNN) の フィルタ	155
5.3.2.2	GraphSAGE フィルタ	156
5.3.2.3	GAT フィルタ	157
5.3.2.4	ECC フィルタ	159
5.3.2.5	GGNN フィルタ	159
5.3.2.6	Mo フィルタ	160

## 目次

5.3.2.7	MPNN (空間型グラフフィルタの一般的なフレームワーク)	161
5.4	グラフプーリング	162
5.4.1	平坦グラフプーリング	163
5.4.2	階層的グラフプーリング	164
5.4.2.1	ダウンサンプリング型プーリング	165
5.4.2.2	スーパーノード型プーリング	167
5.5	GNN の学習	171
5.5.1	ノード分類における学習	171
5.5.2	グラフ分類における学習	172
5.6	本章のまとめ	173
5.7	参考文献	173
第 6 章	GNN の敵対的ロバスト性	175
6.1	はじめに	175
6.2	グラフへの敵対的攻撃	176
6.2.1	敵対的攻撃の分類	177
6.2.1.1	攻撃者の行動範囲に基づく分類	177
6.2.1.2	摂動の種類に基づく分類	177
6.2.1.3	攻撃者の目標に基づく分類	178
6.2.1.4	標的モデルの知識に基づく分類	178
6.2.2	ホワイトボックス攻撃	179
6.2.2.1	PGD トポロジー攻撃	179
6.2.2.2	積分勾配に基づく攻撃	181
6.2.3	グレーボックス攻撃	183
6.2.3.1	Nettack	184
6.2.3.2	Metattack	186
6.2.4	ブラックボックス攻撃	190
6.2.4.1	RL-S2V	190
6.2.4.2	ReWatt	193
6.3	敵対的攻撃に対する防御	195
6.3.1	グラフの敵対的学習	196

## 目次

6.3.1.1	グラフ構造を用いた敵対的学習	196
6.3.1.2	ノード特徴量を用いた敵対的学習	197
6.3.1.3	グラフ構造とノード特徴量の両方を用いた敵対的学習	198
6.3.2	グラフの純化	199
6.3.2.1	特徴量の類似度が低いエッジの除去によるグラフ純化	199
6.3.2.2	隣接行列の低ランク近似によるグラフの純化	200
6.3.3	グラフアテンション防御	200
6.3.3.1	RGCN：正規分布による隠れ表現のモデル化	201
6.3.3.2	PA-GNN：クリーンなグラフから作る敵対的エッジを用いた学習	202
6.3.4	グラフ構造学習	206
6.4	本章のまとめ	207
6.5	参考文献	208
第7章	GNNのスケラビリティ	209
7.1	はじめに	209
7.2	ノードサンプリング	214
7.3	層サンプリング	217
7.4	部分グラフサンプリング	222
7.5	本章のまとめ	225
7.6	発展的な話題	225
第8章	複雑グラフ上のGNN	227
8.1	はじめに	227
8.2	ヘテログラフ上のGNN	227
8.3	二部グラフ上のGNN	230
8.4	多次元グラフ上のGNN	231
8.5	符号付きグラフ上のGNN	233
8.6	ハイパーグラフ上のGNN	238
8.7	ダイナミックグラフ上のGNN	240
8.8	本章のまとめ	242
8.9	参考文献	242

## 目次

第 9 章	GNN の枠を超えて	
	その他のグラフ深層学習モデル	243
9.1	はじめに	243
9.2	グラフ上のオートエンコーダー	244
9.3	グラフ上の RNN	246
9.4	グラフ上の VAE	249
9.4.1	ノード表現学習のための VAE	251
9.4.2	グラフ生成のための VAE	252
9.4.2.1	エンコーダー：推論モデル	252
9.4.2.2	デコーダー：生成モデル	253
9.4.2.3	再構成損失の評価	254
9.5	グラフ上の GAN	255
9.5.1	ノード表現学習のための GAN	256
9.5.1.1	生成モデル	257
9.5.1.2	識別モデル	258
9.5.2	グラフ生成のための GAN	258
9.5.2.1	生成モデル	259
9.5.2.2	識別モデルと判別モデル	260
9.6	本章のまとめ	260
9.7	参考文献	261
第 III 部	応用	263
第 10 章	自然言語処理分野における GNN	265
10.1	はじめに	265
10.2	意味役割のラベリング (SRL)	266
10.3	ニューラル機械翻訳	270
10.4	関係抽出	271
10.5	質問応答 (QA)	274
10.5.1	マルチホップ QA タスク	274
10.5.2	Entity-GCN	276
10.5.2.1	Entity グラフ	276

## 目次

10.5.2.2	Entity グラフ上での Entity-GCN によるマルチス テップ推論	277
10.6	Graph-to-Sequence 学習	279
10.6.1	Graph2Seq におけるエンコーダーおよびデコーダー	280
10.7	知識グラフ上の GNN	281
10.7.1	方法 1: 知識グラフ用のグラフフィルタ設計	282
10.7.2	方法 2: 知識グラフの単純グラフへの変換	283
10.7.3	知識グラフの補完	284
10.8	本章のまとめ	285
10.9	参考文献	285
第 11 章	画像処理分野における GNN	287
11.1	はじめに	287
11.2	VQA: 画像を使った質問応答タスク	287
11.2.1	画像をグラフとして捉える方法	289
11.2.2	画像と質問をグラフとして捉える方法	291
11.3	骨格情報に基づく行動認識タスク	293
11.4	画像分類	296
11.4.1	ゼロショット画像分類	296
11.4.2	少数ショット画像分類	298
11.4.3	マルチラベル画像分類	299
11.5	点群学習	301
11.6	本章のまとめ	302
11.7	参考文献	302
第 12 章	データマイニング分野における GNN	303
12.1	はじめに	303
12.2	Web データマイニング	303
12.2.1	ソーシャルネットワーク分析	304
12.2.1.1	社会的影響の予測	304
12.2.1.2	社会的関係性の特徴量学習	306
12.2.2	推薦システム	309
12.2.2.1	協調フィルタリング	310

## 目次

12.2.2.2	アイテムに関する付加情報を用いた協調フィルタリング	311
12.2.2.3	ユーザに関する付加情報を用いた協調フィルタリング	313
12.3	都市データマイニング	315
12.3.1	交通量の予測	315
12.3.2	大気質予測	317
12.4	サイバーセキュリティ・データマイニング	318
12.4.1	悪質アカウントの検出	319
12.4.1.1	アカウントとデバイスに基づいたグラフの構築	319
12.4.1.2	GNN による悪意あるアカウントの検出	320
12.4.2	フェイクニュース検出	321
12.4.2.1	ニュース記事に基づいたグラフの構築	322
12.4.2.2	グラフ分類タスクとしてのフェイクニュース検出	323
12.5	本章のまとめ	323
12.6	参考文献	323
第 13 章	生化学・ヘルスケア分野における GNN	325
13.1	はじめに	325
13.2	創薬	325
13.2.1	分子表現学習	326
13.2.2	タンパク質の相互作用予測	328
13.2.2.1	タンパク質構造のグラフ表現	329
13.2.2.2	相互作用予測モデル	329
13.2.3	薬物・標的間の結合親和性予測	330
13.3	薬物類似性学習	332
13.4	ポリファーマシー副作用予測	334
13.4.1	マルチモーダルグラフの構築	335
13.4.2	ポリファーマシー副作用予測モデル	336
13.5	疾病予測	337
13.6	本章のまとめ	339
13.7	参考文献	339
第 IV 部	発展	341

## 目次

第 14 章	GNN における発展的な話題	343
14.1	はじめに	343
14.2	深い層を持つ GNN	344
14.2.1	Jumping Knowledge	347
14.2.2	DropEdge	347
14.2.3	PairNorm	347
14.3	自己教師あり学習	348
14.3.1	ノードを対象としたタスク	349
14.3.1.1	グラフ構造情報を対象とした自己教師あり学習	350
14.3.1.2	ノード属性情報を対象とした自己教師あり学習	351
14.3.1.3	グラフ構造情報とノード属性情報を対象とした自己教師あり学習	351
14.3.2	グラフを対象としたタスク	353
14.4	グラフニューラルネットワークの表現力	354
14.4.1	Weisfeiler-Lehman テスト	356
14.4.2	表現力	357
14.5	本章のまとめ	359
14.6	参考文献	360
第 15 章	GNN における発展的な応用例	361
15.1	はじめに	361
15.2	グラフ上の組み合わせ最適化	361
15.3	ソースコード表現の学習	364
15.4	物理学における力学的相互作用系の推論	366
15.5	本章のまとめ	368
15.6	発展的な話題	368

# 第 1 章

---

## グラフ深層学習：イントロダクション

---

### 1.1 はじめに

まず本書に関する幾つかの質問に答えることから始める。

最初に、「なぜ私たちはグラフ深層学習（グラフニューラルネットワーク）に注目しなければならないのか」を説明する。特に、「なぜ現実世界のデータをグラフで表現するのか?」、「深層学習とグラフの橋渡しをする意義は?」、そして「グラフ深層学習にはどのような課題があるのか?」について答えていく。

次に、本書で扱う内容について紹介する。どのようなトピックを取り上げ、それらのトピックをどのように整理していくのかを述べていく。

さらに、この本を読むべき人や、さまざまな背景や目的を持つ読者がそれぞれどのように読み進めると良いかについての指針を紹介する。

最後に、グラフ深層学習をより深く理解するために、グラフ上の特徴学習と呼ばれるより一般的な文脈の下で、グラフ深層学習がどのような歴史をたどってきたかを簡単に振り返っていく。

### 1.2 なぜグラフニューラルネットワークなのか？

現実世界のデータは、(行列などの) テンソル形式<sup>1)</sup>、(文字列などの) 順序を持つシーケンスデータ、時系列データなど様々な形態をとる。すると、「なぜデータをグラフで表現しようとするのか?」という疑問が自然に湧く。

そのモチベーションは主に 2 つある。第一に、グラフはあらゆるデータを記述できる汎用性を持つことができる (図 1.1)。例えば、ソーシャルネット

---

1) 訳注：テンソル (Tensor) には数学的に厳密な定義があるが、深層学習の文脈では「ベクトルや行列を拡張させた多次元配列」の意味で使われることが多い。

ワーク、交通ネットワーク、タンパク質間相互作用ネットワーク、知識グラフ、脳のネットワークなど、様々な分野の多くの系から得られるデータは、明示的にグラフとして表現することができる。それに加えて、図 1.1 に示すように、その他多くの種類のデータもグラフ形式に変換することが可能である (Xu, 2017).

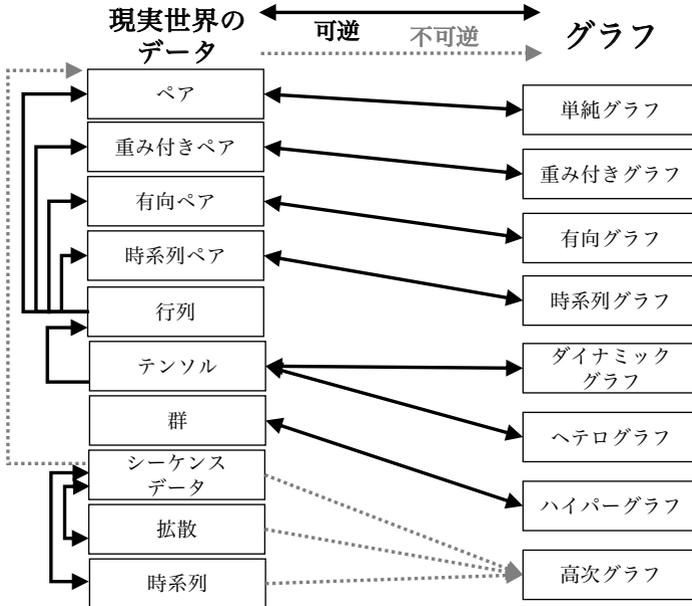


図 1.1. 現実世界データのグラフ表現：図は (Xu, 2017) をもとに作成。実線はグラフで表現する際に情報が失われていないことを表し、点線は情報が失われていることを表す。

第二に、現実世界の問題の多くは、グラフ上の小さな計算タスクの集合として取り扱うことができる。例えば、「ノードの属性を推測する」、「(スパム送信者やテロリストといった) 異常なノードを検出する」、「病気に関連する遺伝子を特定する」、「患者に投薬を提案する」などは、**ノード分類問題**としてまとめることができる (Bhagat *et al.*, 2011)。一方で、「レコメンデーション」、「薬物併用時の副反応の予測」、「薬物とその標的間の相互作用の同定」、

## 1.2 なぜグラフニューラルネットワークなのか？

「知識グラフの埋め込み」などは、基本的には**リンク予測問題**として扱うことができる (Liben-Nowell and Kleinberg, 2007).

グラフ上のノードは他のノードと繋がっている．これは各ノードが互いに独立でないことを示唆している．従来の機械学習の手法は，各データが独立かつ同一に分布していることを前提としていることが多い．そのため，従来の機械学習の手法は，グラフ上の計算タスクに直接取り入れるには適していない．この問題を解決するには，2つの方向性がある (図 1.2)．ノード分類を例にして，以下の2つの方向性について見ていこう．

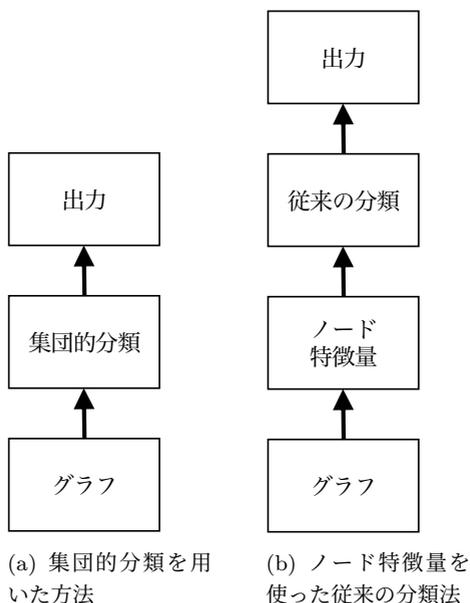


図 1.2. グラフのノード分類問題に取り組むための2つの方向性.

### ・集団的分類 (Collective classification) を用いた方法：

この方法はグラフに特化した新しいフレームワークである．図 1.2(a) のように，グラフ用に設計された分類問題は，**集団的分類問題**として知られている (Sen *et al.*, 2008)．従来の分類問題と異なり，集団的分類問題

ではノードの特徴量とそのラベルの対応を考慮するだけでなく、ノード近傍の情報も考慮する。

### • 従来の分類法を用いた方法：

この方法は、図 1.2(b) のように、各ノードを表す特徴量を構築することでグラフを平坦化し、従来の分類技術を適用する。この方向性は、従来の機械学習技術を活用できるため、主流になってきている。

2 つ目のアプローチがうまく機能させるには、各ノードの特徴量（ノード表現ともいう）をどのように構築するかが重要である。表現学習は、画像処理、音声認識、自然言語処理など様々な領域で大きな発展をもたらしてきたが、深層学習はこの表現学習に対して大きな威力を発揮する。したがって、深層学習をグラフ表現学習に適用するのはこれまでにない可能性を秘めている。一方で、グラフにおける深層学習は多くの課題に直面している。そもそも従来の機械学習は、画像やシーケンスデータなど規則的な構造データに対して設計されてきた。それに対してグラフは不規則なデータであり、グラフ内のノードには定まった順序がなく、それぞれが異なる近傍ノードを持つことができる。また、規則的なデータの構造情報は単純であるのに対して、グラフの構造情報は複雑であり、様々な種類のグラフが存在する（図 1.1）。その点でグラフ上のノードとエッジは豊富な付加情報を持つことがあるが、従来の深層学習はそれらを捉えるのに十分ではない。

以上のように、これまでにない可能性と多くの課題を抱えながら、グラフ深層学習という新しい研究分野が開拓されてきたのである。

## 1.3 この本で扱うこと

さまざまな背景や目的を持つ読者に読んでいただくために、図 1.3 に本書の構成を示した。本書は4つのパートで構成されている。第I部では基礎概念を紹介し、第II部ではこれまでに確立されてきた手法について議論する。第III部ではグラフ深層学習による典型的な応用例を紹介し、第IV部ではグラフ深層学習周辺の発展的な手法や、今後の研究のために重要かつ有望と思われる応用例について解説する。各章では、まず取り上げる内容の背景や目的

### 1.3 この本で扱うこと

を説明する。その後、わかりやすい例と技術的な詳細を交えながら、そして最後に、さらなる参考として関連する参考文献を紹介する。

各章の簡潔な概要を以下にまとめた。

#### 第Ⅰ部：基礎。

第Ⅰ部では、グラフ深層学習の基礎となる、「グラフ理論」と「深層学習」それぞれの基礎事項に焦点を当てる。

**第2章** グラフの主要な概念や性質、グラフフーリエ変換、グラフ信号処理を紹介し、さまざまな種類のグラフやグラフ上の計算タスクを形式的に定義する。

**第3章** 主要なニューラルネットワークモデルや、深層モデルの学習のための手法や、過学習を抑えるための実践的な技術について説明する。

#### 第Ⅱ部：手法。

第Ⅱ部では、グラフ深層学習においてこれまでに確立されてきた手法について、その基礎から発展的な内容までを扱う。

**第4章** 「グラフが持つ情報の保持」という観点から、一般的なグラフ埋め込みのフレームワークを紹介する。グラフ上の様々な情報を保持する代表的なアルゴリズムを紹介し、さまざまな種類のグラフに特化した埋め込み手法を紹介する。

**第5章** 典型的なグラフニューラルネットワーク（GNN）モデルは**グラフフィルタリング**と**グラフプーリング**という2つの重要な操作で構成されている。そこで、これらの操作を紹介し、下流のタスクのためのGNNのパラメータをどのように学習するのかを議論する。

**第6章** 従来の深層モデルをグラフに一般化したことでGNNは深層モデルの欠点を受け継いでしまっており、**敵対的攻撃**に対して脆弱である。そこで、グラフ敵対的攻撃の概念と定義に焦点を当て、代表的な敵対的攻撃とその防御技術について説明する。

**第7章** GNNでは、各層でノードの近傍情報を集約し、その情報を次の層でさらに広範囲のノードへと伝えるプロセスを繰り返す。そのため、たった1つのノードの近傍に対する処理だけでもグラフ中で関

係する領域が急速に増え、最終的にグラフの大部分やグラフ全体が関わってくる可能性がある。したがって、GNN にとってスケーラビリティの向上は重要な課題である<sup>2)</sup>。そこで本章では GNN を拡張するための代表的な技術について説明する。

**第8章** 様々な種類のグラフに対応するために設計された GNN モデルについて議論する。

**第9章** 深層学習技術を用いてより多様な場面でグラフ上のタスクに取り組むため、GNN の枠組みを超えた様々なグラフ深層学習モデルを紹介する。

### 第III部：応用。

現実世界のデータに対してグラフは普遍的な表現を提供するため、グラフ深層学習技術は様々な分野で応用されている。第III部では、各章ごとに、GNN による代表的な応用例を紹介していく。

**第10章** 自然言語処理分野への応用

**第11章** 画像処理分野への応用

**第12章** データマイニング分野への応用

**第13章** 生化学・ヘルスケア分野への応用

### 第IV部：発展。

第IV部では、第II部の手法と第III部の応用の両方においてこれまで紹介してきた内容よりもさらに進んだ内容に焦点を紹介する。

**第14章** 表現力、層の深さ、公平性、解釈可能性、自己教師あり学習など、GNN の発展的な手法を紹介する。

**第15章** 組合せ最適化や物理学への応用、プログラム表現など、GNN が適用されている、さらに発展的な領域について議論する。

---

2) 訳注：グラフ深層学習におけるスケーラビリティ (scalability) は、大規模なグラフデータに効果的に対応する能力を指す。大きなグラフの処理において、計算時間やメモリ効率が重要となる課題として位置づけられている。