

## ニューラルネットワークを用いたグラフ埋め込みの表現能力とその拡張

理化学研究所

奥野彰文

理化学研究所, 京都大学大学院

Kim Geewook

理化学研究所, 京都大学大学院

下平英寿

データの各ノードにベクトル表現  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^p$  が与えられ, 更にデータベクトルのペア  $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$  間の関係の強さを表す重み  $w_{ij} \geq 0$  が得られている時, データ間の関係の強さ  $\{w_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq n}$  を考慮してデータベクトルを低次元ベクトル  $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^K$  ( $K \leq p$ ) に変換する手法をグラフ埋め込みと呼ぶ.

旧来のグラフ埋め込みでは線形のモデル  $\mathbf{y}_i = \boldsymbol{\theta}^\top \mathbf{x}_i$  が利用されていたが, 近年では最適化技術の発展に伴い, ベクトル値ニューラルネットワーク (NN)  $\mathbf{f}_\theta: \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^K$  を用いた非線形のモデル  $\mathbf{y}_i = \mathbf{f}_\theta(\mathbf{x}_i)$  が用いられるようになった. これら非線形のグラフ埋め込みでは, 適当なカーネル関数  $g: \mathbb{R}^{2K} \rightarrow \mathbb{R}$  を用いて, 例えばポアソン分布

$$w_{ij} \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \sim \text{Po}(\exp(h(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j; \boldsymbol{\theta}, g))), \quad h(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j; \boldsymbol{\theta}, g) := g(\mathbf{f}_\theta(\mathbf{x}_i), \mathbf{f}_\theta(\mathbf{x}_j)),$$

の最尤法により NN のパラメータ  $\boldsymbol{\theta}$  を推定する.

類似度  $h(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j; \boldsymbol{\theta}, g)$  は特に Siamese network (Bromley et al., 1994) と呼ばれている. 多くの既存研究 (e.g., Perozzi et al., KDD 2014; Tang et al., WWW 2015; Kipf and Welling, NeurIPS-WS 2016) では内積  $g(\mathbf{y}, \mathbf{y}') := \langle \mathbf{y}, \mathbf{y}' \rangle$  が用いられてきたが, 近年ではツリー構造を持ったグラフを双曲空間に埋め込むためにポアンカレ距離が用いられ始めた (Nickel and Kiela, NeurIPS 2017, ICML 2018). 一方で, Siamese network にどのようなカーネル  $g$  を用いるべきか, 理論的な背景はよく解明されていない.

本講演では Siamese network の表現能力に焦点を当てる. 最初に, 実数値 NN の表現定理 (e.g., Cybenko 1989) とマースーの定理を組み合わせ, 内積を用いた Siamese network が任意の正定値類似度を近似でき, 任意の正定値カーネル  $g$  を用いた Siamese network は内積を用いたものと表現能力に差が無いことを示す.

一方で, Nickel and Kiela (NeurIPS 2017, ICML 2018) で用いられたポアンカレ距離は正定値ではなく, 内積を用いた Siamese network より表現能力が高い. 本講演では内積にシフト項を加えたシフト内積 (SIPS) モデルを示し, 正定値類似度に加えてポアンカレ距離などいくつかの非正定値類似度を加えた条件付き正定値類似度を近似できることを示す.

さらに, 条件付き正定値類似度に限らずより広い類似度を近似できる重み付き内積 (WIPS) モデルを示し, 一般の類似度を近似できることを示す. また, 提案した SIPS や WIPS を数万ノードからなる実データでの実験で評価した結果を示す.

本講演は Okuno et al. (ICML 2018, AISTATS 2019), Kim et al. (IJCAI 2019) を基にしている.

### 参考文献

- Kim, G., Okuno, A., Fukui, K., and Shimodaira, H. (2019). Representation learning with weighted inner product for universal approximation of general similarities. In *Proceedings of the International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI, to appear)*.
- Okuno, A., Hada, T., and Shimodaira, H. (2018). A probabilistic framework for multi-view feature learning with many-to-many associations via neural networks. In *Proceedings of the International Conference on Machine Learning (ICML)*, volume 80 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 3888–3897. PMLR.
- Okuno, A., Kim, G., and Shimodaira, H. (2019). Graph embedding with shifted inner product similarity and its improved approximation capability. In *Proceedings of the International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS)*, volume 89 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 644–653. PMLR.