

定理 8.19 (乱択グラフニューラルネットワークの万能近似能力)

グラフ上の任意の不変な関数 $g: G \mapsto \mathbb{R}$ について, ある関数 $f^{\text{集約}}, f^{\text{読み出し}}$ が存在して,

$$r_v \sim \text{Unif}([0, 1]) \quad (8.1)$$

$$h_v^{(0)} = [\mathbf{X}_v; r_v] \quad (8.2)$$

$$h_v^{(1)} = f^{\text{集約}}(h_v^{(0)}, \{\{h_u^{(0)} \mid u \in \mathcal{N}(v)\}\}) \quad (8.3)$$

$$h(G) = f^{\text{読み出し}}(\{\{h_v^{(1)} \mid v \in V\}\}) \quad (8.4)$$

で定義されるグラフニューラルネットワークは確率 1 で

$$g(G) = h(G) \quad (8.5)$$

を満たす.

証明 構成的に示す. 以下, 乱択特徴量には重複が無いと仮定する. $r_v \sim \text{Unif}([0, 1])$ の下でこの仮定が満たされる確率は 1 である. 集約関数を

$$f_0^{\text{集約}}([\mathbf{X}_v; r_v], \{\{[\mathbf{X}_u; r_u] \mid u \in \mathcal{N}(v)\}\}) = (\quad (8.6)$$

$$r_v, \quad (8.7)$$

$$\{\{r_u, r_v\} \mid u \in \mathcal{N}(v)\}, \quad (8.8)$$

$$(r_v, \mathbf{X}_v) \quad (8.9)$$

$$) \quad (8.10)$$

とする. この第一成分は乱択特徴量 r_v の集合を表し, 第二成分は乱択特徴量 r_u と r_v を持つ頂点の間に辺があることを表し, 第三成分は乱択特徴量 r_v と頂点特徴量 \mathbf{X}_v の対応関係を表す. 読み出し関数を

$$f^{\text{再構築}}(\{\{h_v^{(1)} \mid v \in V\}\}) = (\quad (8.11)$$

$$\{h_{v,1}^{(1)} \mid v \in V\}, \quad (8.12)$$

$$\bigcup_{v \in V} h_{v,2}^{(1)}, \quad (8.13)$$

$$h_{v,3,1}^{(1)} \mapsto h_{v,3,2}^{(1)}, \quad (8.14)$$

$$) \quad (8.15)$$

$$f^{\text{読み出し}} = g \circ f^{\text{再構築}} \quad (8.16)$$

とする． $f^{\text{再構築}}$ は全ての頂点についての，乱択特徴量と，辺の情報と，乱択特徴量と頂点の対応関係を基にグラフを復元する．ただし，頂点番号は元のものではなく， r_v を v の頂点番号として用いている．最後に，このグラフを g に入力すると， g は不変であるので，元のグラフに対する出力と同じものが得られる． \square