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 $g\colon G \mapsto \boldsymbol{z}$ について，ある関数 $f^{集約}, f^{読み出し}$ が存在して，

$$r_v \sim \mathrm{Unif}([0,1]) \tag{8.1}$$
$$h_v^{(0)} = [\boldsymbol{X}_v; r_v] \tag{8.2}$$
$$h_v^{(1)} = f^{集約}(h_v^{(0)}, \{\!\{h_u^{(0)} \mid u \in \mathcal{N}(v)\}\!\}) \tag{8.3}$$
$$h(G) = f^{読み出し}(\{\!\{h_v^{(1)} \mid v \in V\}\!\}) \tag{8.4}$$

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

$$g(G) = h(G) \tag{8.5}$$

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．$r_v \sim \mathrm{Unif}([0,1])$ 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

$$f^{集約}([\boldsymbol{X}_v; r_v], \{\!\{[\boldsymbol{X}_u; r_u] \mid u \in \mathcal{N}(v)\}\!\}) = (\tag{8.6}$$
$$r_v, \tag{8.7}$$
$$\{\{r_u, r_v\} \mid u \in \mathcal{N}(v)\}, \tag{8.8}$$
$$(r_v, \boldsymbol{X}_v) \tag{8.9}$$
$$) \tag{8.10}$$

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 $\boldsymbol{X}_v$ の対応関係を表す．読み出し関数を

$$f^{再構築}(\{\!\{h_v^{(1)} \mid v \in V\}\!\}) = (\tag{8.11}$$
$$\{h_{v,1}^{(1)} \mid v \in V\}, \tag{8.12}$$
$$\bigcup_{v \in V} h_{v,2}^{(1)}, \tag{8.13}$$
$$h_{v,3,1}^{(1)} \mapsto h_{v,3,2}^{(1)}, \tag{8.14}$$
$$) \tag{8.15}$$
$$f^{読み出し} = g \circ f^{再構築} \tag{8.16}$$

とする．$f^{再構築}$ 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． □