物理学とディープラーニング (ゼミ)

B4 柳瀬調知

2023 年 5 月 1 日

4.2.6 グラフニューラルネットワーク (GNN)

CNN と似たようなことを隣接構造の複雑な空間で実行するためのもの。

・グラフ的な構造をもつデータ

CNN では、2 次元のデータを 2 次元的な構造のまま変換することが重要だった。また、データがマスで区切られたものを想定している。しかし、現実には 3.3 節のスピン配位のようにグラフのような構造を考えられる場合や、画像データでもある領域と別の領域の相関だけを抽出したいといった問題設定の場合がある。こういった場合には、データを図 4.20 のようなグラフと見た方がよい。

ニューラルネットに学習させるデータのグラフは、一般に辺と頂点の全てに値が割り振ることができる。(grad, div)

「知識グラフ」は、各オブジェクトの間にどんな相関があるのかをまとめたもの (図 4.21 は対人関係を可視化した例)。食べ物、工業製品、人間といったあらゆるものの相関を描ける。

グラフ理論の活用例：タンパク質の構造解析、高分子化学、物理の材料科学

・CNN → GNN

2 次元的な画像データを考える場合でも、全てのマスに番号を振っておけば、式 (4-28) のように成分まであからさまに書く必要はない。マス i のまわりの領域を $N(i)$ とおくと、式 (4-33) のように書ける。これでも畳み込み操作が可能で、この 2 式は同じこと。このように一般化しておけば、図 4.22(右) のように画像形式が崩れたグラフに対しても、隣接する頂点の値の重み付き和をとることで畳み込みを計算できる。このアプローチは「空間法」という。

・スペクトル法

空間法では、局所的な相関しか扱えない。しかし、大局的な構造に意味のある特徴量を抽出したいときもある。例えば、弦の振動を考えるときは微小部分にはたらく力をみるよりは、振動パターンをみた方が特徴をよく捉えることができる。任意の振動を Fourier 級数展開し、Fourier スペクトル (固有振動の重み) を計算できたように、大局的な

構造を捉えたければ、Fourier 変換すればよい。

・グラフ Fourier 変換

$$\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \langle p|x\rangle \, \langle x|\psi\rangle \tag{1}$$
$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx \tag{2}$$
$$F[\boldsymbol{x}] = U^T \boldsymbol{x} \tag{3}$$

量子力学の式を思い出すと、Fourier 変換とは運動量演算子 $\hat{p}$ を対角化するような基底の変換といえる。逆に言えば、$\hat{p}$ は微分演算子 ∇ だから、∇ に対応した行列 B^T を対角化するような基底の変換が Fourier 変換と類推できる。しかし、B^T は正方行列ではない場合もある。そこで、ラプラシアン行列 L を対角化する基底変換を Fourier 変換と定義する。より厳密には、式 (4-34) のように対角成分をすべて 1 にした正規化ラプラシアン $\bar{L}$ を対角化する (具体的に図 3.8 のグラフで計算した)。このときに使う変換行列を U とすると、グラフの頂点の値 $\boldsymbol{x}$ の Fourier 変換は (3) 式になる。

・Fourier 変換の利点

ノイズを落とすことで情報が見やすくなるほか、Fourier 変換すると座標空間での畳み込み計算がただの積になる (証明は後)。例えば、1 次元 Fourier 変換だと $f(x) * g(x) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(k)\tilde{g}(k)]$ となる。畳み込み計算は F 変換→積→逆 F 変換とすればよい。CNN の畳み込み操作は、Fourier 空間だと式 (4-43) のようになり、これは $\boldsymbol{x}$ にかかる順にみると、U^T(F 変換) $\rightarrow W$(対角行列) $\rightarrow U$(逆 F 変換) となっているとわかる。

結局のところ、$\tilde{\boldsymbol{x}} = (UWU^T)\boldsymbol{x}$ とおき、この $\tilde{\boldsymbol{x}}$ を活性化関数にかませて $\phi(\tilde{\boldsymbol{x}})$ ニューラルネットを組むのが GNN の考え方である。

☆ $\mathcal{F}[f(x) * g(x)] = \tilde{f}(k)\tilde{g}(k)$ の証明

$$\mathcal{F}[f(x) * g(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) g(x-\zeta) d\zeta \right\} e^{-ikx} dx \tag{4}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} g(x-\zeta) e^{-ikx} dx \right\} d\zeta \tag{5}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \int_{-\infty}^{\infty} f(\eta) e^{-ik\eta} d\eta \tag{6}$$
$$= \tilde{f}(k)\tilde{g}(k) \tag{7}$$

ただし、(5) から (6) で $x - \zeta = \eta$ と変数変換した。