

令和 6 年 6 月 18 日現在

機関番号：82626
研究種目：基盤研究(C) (一般)
研究期間：2021～2023
課題番号：21K12042
研究課題名(和文) Neural Network based Graph Learning: Model Evolution and Real-World Application

研究課題名(英文) Neural Network based Graph Learning: Model Evolution and Real-World Application

研究代表者
劉欣(Liu, Xin)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・情報・人間工学領域・主任研究員

研究者番号：20803935
交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：このプロジェクトは、グラフ学習技術において多くの進展を遂げました。新しい学習アーキテクチャを設計し、性能の向上を達成しました。また、異種グラフに対する新しいモデルを開発し、さまざまな不完全な環境に対応するための実践的な戦略を提案しました。これらのアプローチは、多くの実世界の応用において有効性を示しました。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Several intrinsic defects in the current graph learning technology have hindered its widespread success. This project addresses these defects and promotes advancements in graph learning models. Many of the ideas created in this project have already diffused in the academic and industry community.

研究成果の概要(英文)：This project has resulted in many advances in graph learning techniques. We have designed new learning architectures that achieved remarkable performance improvement. We have developed new models for heterogeneous graphs. We have proposed new practical strategies for working in various imperfect environments. We have successfully applied our approaches to many real-world applications.

研究分野：知能情報学

キーワード：graph neural network graph embedding graph analysis social network complex network

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

There has been a surge in research on analyzing graphs with machine learning techniques, or graph learning. Especially, graph embedding aims to learn low-dimensional vector representations, or embeddings, for nodes in a graph. The learned embeddings encode structural and semantic information transcribed from the graph and can be used as the extracted features for downstream graph analysis tasks. Meanwhile, graph neural networks (GNN), as a generalization of convolutional neural networks (CNN) (proposed initially for Euclidean data such as images, text, videos) to non-Euclidean graph-structured data, have been rapidly developed over the past few years.

2. 研究の目的

The current graph learning technology is still at its initial stage. Several intrinsic defects hinder it from achieving immense success and being widely applied in industry. This research aims to remedy these defects and promote evolutions in graph learning models.

3. 研究の方法

We based our approaches on recent advancements in deep learning, along with traditional methodologies in graph theory (connectivity, graph flow, graph spectral theory, graph decomposition, graph isomorphism), statistical machine learning (Bayesian inference, kernel methods, ensemble learning, model selection and evaluation, optimization theory, imbalanced learning, Monte Carlo methods, generative models), and signal processing (Fourier transform, sampling theory, spectral estimation, filters, time-frequency analysis, control theory). Leveraging these foundations, we proposed new approaches focusing on graph-based structures. Then, we validated our approaches using real-world applications.

4. 研究成果

This project has resulted in 20+ publication in three years. The main outcomes consist of the following aspects.

- ♦ New graph learning architectures. Traditional GNN architectures combine node feature aggregation and feature transformation using learnable weight matrix in the same layer. This makes it challenging to analyze the importance of node features aggregated from various hops and the expressiveness of the neural network layers. As different graph datasets show varying levels of homophily and heterophily in features and class label distribution, it becomes essential to understand which features are important for the prediction tasks without any prior information. We decoupled the node feature aggregation step and depth of graph neural network, and empirically analyzed how different aggregated features play a role in prediction performance. We showed that not all features generated via aggregation steps are useful, and often using these less informative features can

be detrimental to the performance of model performance. Based on these findings, we proposed new architectures with selective aggregation of node features from various hops, which have achieved remarkable improvements up to 51.1% over the SOTA models. The related work has been published in CIKM 2022, Journal of Computational Science (vol.62, 101695, 2022), and CAAI Transactions on Intelligence Technology (vol.8, pp.14-28, 2023).

- ♦ Handling heterogeneous graphs. Unlike traditional homogeneous graphs, heterogeneous graphs contain multiple types of nodes and edges, representing a more general form of graph data. To address this complexity, we have developed approaches for graph learning and embedding in heterogeneous graphs. In *Information Sciences*, vol. 570, pp.769-794, 2021, we introduced a novel unsupervised embedding method called the Projected Graph Relation-Feature Attention Network (PGRA). This approach addresses the incompatibility between various relations and captures rich semantic information in heterogeneous graphs. In *Machine Learning*, vol.112, pp.4227-4256, 2022, we tackled the notorious down-weighting issue of the current methods, which disregards individual node information. We developed a simple yet effective single-level aggregation scheme that performs relation-specific transformation to obtain homogeneous embeddings before aggregating information from multiple types of neighbors, thus elegantly avoiding the down-weighting issue.
- ♦ Learning in imperfect environments. Existing models overwhelmingly assume ideal experimental conditions, but real-world scenarios are often far from ideal. For instance, in real-world graph data, 1) there is often missing or noisy information; 2) the nodes tend to follow unbalanced, long-tailed class distributions; 3) the nodes are often associated with multiple labels. These factors render current techniques, which were originally designed for ideal experimental environments, inadequate for real-world applications. We have conducted extensive research to address these various challenges encountered in practical scenarios. As a result, we have proposed a series of practical and targeted methods, which are detailed in our publications including ECML-PKDD 2022, PAKDD 2023, Remote Sensing (vol.14, 3295, 2022), Remote Sensing (vol.14, 4479, 2022).
- ♦ Real-world applications. We have validated the proposed approaches in various real-world applications, including incident prediction, product recommendation, citation recommendation, text classification, donation prediction, popularity trend prediction, missing biography prediction. These have been published in ECAI 2023, EMNLP Findings 2021, AACL 2022, CIKM 2021, Machine Learning (vol.113, pp.2093-2127, 2023), Complex & Intelligent Systems (2024), Scientometrics (vol.127, pp.233-264, 2022).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計20件（うち査読付論文 20件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Maurya Sunil Kumar, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 8
2. 論文標題 Feature selection: Key to enhance node classification with graph neural networks	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 CAAI Transactions on Intelligence Technology	6. 最初と最後の頁 14 ~ 28
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1049/cit2.12166	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Chairatanakul Nuttapong, Liu Xin, Hoang Nguyen Thai, Murata Tsuyoshi	4. 巻 112
2. 論文標題 Heterogeneous graph embedding with single-level aggregation and infomax encoding	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Machine Learning	6. 最初と最後の頁 4227 ~ 4256
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10994-022-06160-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Maurya Sunil Kumar, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 62
2. 論文標題 Simplifying approach to node classification in Graph Neural Networks	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Computational Science	6. 最初と最後の頁 101695 ~ 101695
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jocs.2022.101695	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Duan Yijun, Liu Xin, Jatowt Adam, Yu Hai-tao, Lynden Steven, Kim Kyoung-Sook, Matono Akiyoshi	4. 巻
2. 論文標題 Anonymity Can Help Minority: A Novel Synthetic Data Over-Sampling Strategy on Multi-Label Graphs	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of ECML-PKDD'22	6. 最初と最後の頁 20 ~ 36
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-031-26390-3_2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Jodelet Quentin, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 225
2. 論文標題 Balanced softmax cross-entropy for incremental learning with and without memory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Vision and Image Understanding	6. 最初と最後の頁 103582 ~ 103582
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cviu.2022.103582	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Xiu Haoyi, Liu Xin, Wang Weimin, Kim Kyoung-Sook, Shinohara Takayuki, Chang Qiong, Matsuoka Masashi	4. 巻 116
2. 論文標題 DS-Net: A dedicated approach for collapsed building detection from post-event airborne point clouds	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation	6. 最初と最後の頁 103150 ~ 103150
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jag.2022.103150	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Xiu Haoyi, Liu Xin, Wang Weimin, Kim Kyoung-Sook, Shinohara Takayuki, Chang Qiong, Matsuoka Masashi	4. 巻
2. 論文標題 Optimizing Local Feature Representations of 3D Point Clouds with Anisotropic Edge Modeling	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of MMM'23	6. 最初と最後の頁 269 ~ 281
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-031-27077-2_21	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Duan Yijun, Liu Xin, Jatowt Adam, Yu Hai-tao, Lynden Steven, Kim Kyoung-Sook, Matono Akiyoshi	4. 巻
2. 論文標題 Dual Cost-sensitive Graph Convolutional Network	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of IJCNN'22	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/IJCNN55064.2022.9892598	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Maurya Sunil Kumar, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻
2. 論文標題 Not All Neighbors are Friendly: Learning to Choose Hop Features to Improve Node Classification	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of CIKM'22 (Short Paper)	6. 最初と最後の頁 4334 ~ 4338
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3511808.3557543	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Jin Ruidong, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻
2. 論文標題 Predicting Potential Real-time Donations in YouTube Live Streaming Services via Continuous-Time Dynamic Graph	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of DS'22	6. 最初と最後の頁 59 ~ 73
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-031-18840-4_5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Rakhimberdina Zarina, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 10
2. 論文標題 Strengthening Robustness Under Adversarial Attacks Using Brain Visual Codes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 IEEE Access	6. 最初と最後の頁 96149 ~ 96158
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ACCESS.2022.3204995	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Duan Yijun, Liu Xin, Jatowt Adam, Yu Hai-tao, Lynden Steven, Kim Kyoung-Sook, Matono Akiyoshi	4. 巻 14
2. 論文標題 SORAG: Synthetic Data Over-Sampling Strategy on Multi-Label Graphs	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Remote Sensing	6. 最初と最後の頁 4479 ~ 4479
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/rs14184479	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chairatanakul Nuttapong, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 570
2. 論文標題 PGRA: Projected graph relation-feature attention network for heterogeneous information network embedding	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Information Sciences	6. 最初と最後の頁 769 ~ 794
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ins.2021.04.070	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Pornprasit Chanathip, Liu Xin, Kiattipadungkul Pattararat, Kertkeidkachorn Natthawut, Kim Kyoung-Sook, Noraset Thanapon, Hassan Saeed-UI, Tuarob Suppawong	4. 巻 127
2. 論文標題 Enhancing citation recommendation using citation network embedding	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientometrics	6. 最初と最後の頁 233 ~ 264
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11192-021-04196-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Wang Zhaonan, Jiang Renhe, Cai Zekun, Fan Zipei, Liu Xin, Kim Kyoung-Sook, Song Xuan, Shibasaki Ryosuke	4. 巻 -
2. 論文標題 Spatio-Temporal-Categorical Graph Neural Networks for Fine-Grained Multi-Incident Co-Prediction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of CIKM'21	6. 最初と最後の頁 2060 ~ 2069
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3459637.3482482	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Rakhimberdina Zarina, Jodelet Quentin, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 15
2. 論文標題 Natural Image Reconstruction From fMRI Using Deep Learning: A Survey	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Frontiers in Neuroscience	6. 最初と最後の頁 1 ~ 19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fnins.2021.795488	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Haoyi Xiu, Xin Liu, Weimin Wang, Kyoung-Sook Kim, Takayuki Shinohara, Qiong Chang, Masashi Matsuoka	4. 巻 -
2. 論文標題 Enhancing Local Feature Learning for 3D Point Cloud Processing using Unary-Pairwise Attention	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of BMVC'21	6. 最初と最後の頁 1~14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chairatanakul Nuttapong, Sriwatanasakdi Noppayut, Charoenphakdee Nontawat, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 -
2. 論文標題 Cross-lingual Transfer for Text Classification with Dictionary-based Heterogeneous Graph	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Findings of EMNLP'21	6. 最初と最後の頁 1504~1517
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18653/v1/2021.findings-emnlp.130	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Jodelet Quentin, Liu Xin, Murata Tsuyoshi	4. 巻 -
2. 論文標題 Balanced Softmax Cross-Entropy for Incremental Learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of ICANN'21	6. 最初と最後の頁 385~396
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-86340-1_31	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nuttapong Chairatanakul, Nguyen Thai Hoang, Xin Liu, Tsuyoshi Murata	4. 巻 -
2. 論文標題 Leaping Through Time with Gradient-based Adaptation for Recommendation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of AAAI'22	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計10件(うち招待講演 0件/うち国際学会 10件)

1. 発表者名 Duan Yijun、Liu Xin、Jatowt Adam、Yu Hai-tao、Lynden Steven、Kim Kyoung-Sook、Matono Akiyoshi
2. 発表標題 Anonymity Can Help Minority: A Novel Synthetic Data Over-Sampling Strategy on Multi-Label Graphs
3. 学会等名 The European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML-PKDD'22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Maurya Sunil Kumar、Liu Xin、Murata Tsuyoshi
2. 発表標題 Not All Neighbors are Friendly: Learning to Choose Hop Features to Improve Node Classification
3. 学会等名 The 31st ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM'22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Duan Yijun、Liu Xin、Jatowt Adam、Yu Hai-tao、Lynden Steven、Kim Kyoung-Sook、Matono Akiyoshi
2. 発表標題 Dual Cost-sensitive Graph Convolutional Network
3. 学会等名 The 2022 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN'22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Xiu Haoyi、Liu Xin、Wang Weimin、Kim Kyoung-Sook、Shinohara Takayuki、Chang Qiong、Matsuoka Masashi
2. 発表標題 Optimizing Local Feature Representations of 3D Point Clouds with Anisotropic Edge Modeling
3. 学会等名 The 29th International Conference on Multimedia Modeling (MMM'23) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Jin Ruidong、Liu Xin、Murata Tsuyoshi
2. 発表標題 Predicting Potential Real-time Donations in YouTube Live Streaming Services via Continuous-Time Dynamic Graph
3. 学会等名 The 25th International Conference on Discovery Science (DS'22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nuttapong Chairatanakul、Nguyen Thai Hoang、Xin Liu、Tsuyoshi Murata
2. 発表標題 Leaping Through Time with Gradient-based Adaptation for Recommendation
3. 学会等名 36th AAAI Conference on Artificial Intelligence (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Jodelet Quentin、Liu Xin、Murata Tsuyoshi
2. 発表標題 Balanced Softmax Cross-Entropy for Incremental Learning
3. 学会等名 30th International Conference on Artificial Neural Networks (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Chairatanakul Nuttapong、Sriwatanasakdi Noppayut、Charoenphakdee Nontawat、Liu Xin、Murata Tsuyoshi
2. 発表標題 Cross-lingual Transfer for Text Classification with Dictionary-based Heterogeneous Graph
3. 学会等名 2021 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Haoyi Xiu, Xin Liu, Weimin Wang, Kyoung-Sook Kim, Takayuki Shinohara, Qiong Chang, Masashi Matsuoka
2. 発表標題 Enhancing Local Feature Learning for 3D Point Cloud Processing using Unary-Pairwise Attention
3. 学会等名 32nd British Machine Vision Conference (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Wang Zhaonan, Jiang Renhe, Cai Zekun, Fan Zipei, Liu Xin, Kim Kyoung-Sook, Song Xuan, Shibasaki Ryosuke
2. 発表標題 Spatio-Temporal-Categorical Graph Neural Networks for Fine-Grained Multi-Incident Co-Prediction
3. 学会等名 30th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------