

留学報告書

2019年6月

胡 緯華 (Hu, Weihua)

2018年9月からStanford大学のComputer Science (CS)学科の博士課程に在籍している胡緯華と申します。2019年6月現在は、夏休みということもあり、東京に帰って、旧友と会いつつ、日本食を楽しむ日々を過ごしています。以下、ここ半年のご報告をさせていただきます。

1. ローテーションプログラムと指導教員の決定

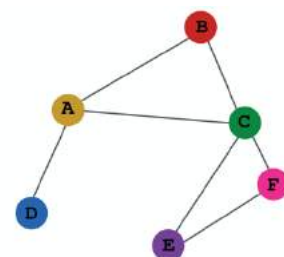
Stanford CSのPh.D.プログラムでは、入学の段階では指導教員は決まっていません。その代わりに、最初の1年は、ローテーションプログラムといって、3人の教授と3ヶ月ずつ研究をして、最終的に相互の同意を経て、指導教員が決まります。僕は、Jure Leskovec, Percy Liang, Stefano Ermonの3人の教授とローテートして、最終的に、Jureを指導教員として決めました。主な理由としては、1) グラフ機械学習に興味があったためJureの研究室が最もマッチしていたこと、2) グラフ機械学習が比較的新しい分野であるため、Ph.D.中に大きな仕事ができそうだったこと、そして、3) 単純にJureとのローテーションが最も楽しかったことが挙げられます。そもそも、最初のJureとのローテーションで、グラフの機械学習の魅力に取り憑かれてしまっていて、PercyとStefanoとも、グラフの研究していたので、Jureを指導教員にすることは、ほぼ最初の時点で決まっていたのかもしれませんが。

2. グラフ機械学習とは？

僕のPh.D.の研究の大きな軸となるのが、「グラフ機械学習」ですが、1) そもそもなんなのか、2) なぜ重要なのか、そして、3) 何が面白いのかについて簡単に説明したいと思います。

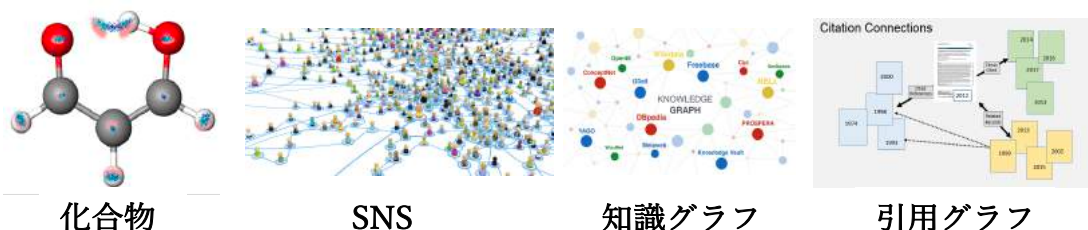
1) なんなのか？

グラフとは、右の図のように、接点の集合が辺で繋がっているデータ構造です。グラフ機械学習では、グラフデータ上の予測問題（例えば、グラフ全体に付与されたラベルを予測する）を解きます。



2) なぜ重要なのか？

グラフは、そのシンプルさと抽象さゆえに、現実の多くの現象を記述できるパワフルなツールです。以下に、我々の身の回りにあるグラフデータの例を並べました。



化合物：接点は、原子を表し、辺は、化学結合を表します。

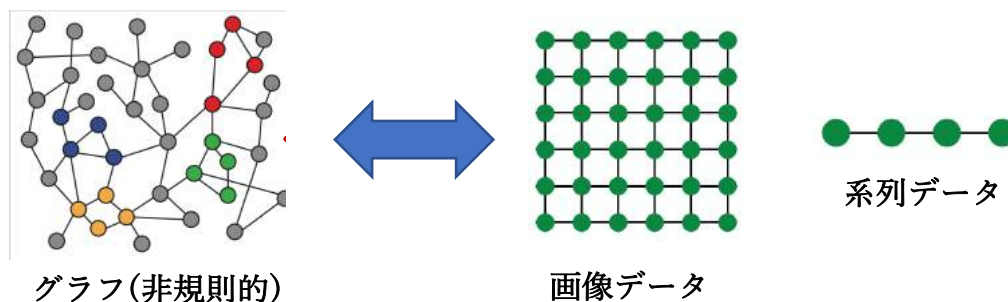
SNS：接点は、ユーザーを表し、辺は、ユーザー間のインタラクション(友人関係など)を表します。

知識グラフ：知識グラフは、我々の世の中の知識・常識をグラフという形で表現したものです。接点は、世の中にある entity を表し、辺は、実体同士の関係を表します。例えば、Stanford, California は、entity の例で、Stanford に対応する点から California に対応する点には、「所在する」という意味の有向辺がひかれます。

引用グラフ：点は、論文を表し、辺は、引用・被引用関係を表します。

上の例のように、世の中の多くの現象は、グラフによって記述することができます。良いグラフ機械学習アルゴリズムを開発することができれば、多くの応用分野にインパクトを与えることができます。具体的には、例えば、化合物グラフが与えられたときに、化合物の特性(例えば、毒性など)を予測できたり、SNS グラフが与えられたときに、新しい友人関係を予測できたりします。

3) なぜ面白いのか？(何が難しいのか?)



グラフは、一見非常にシンプルなデータ構造をしておりますが、実は、機械学習

のパイプラインにのせるのは容易ではありません。実際、これまでに開発された多くの深層学習アルゴリズム (Convolutional Neural Networks, Recurrent Neural Networks, Multi-layer Perceptron など) は、グラフデータに直接適用することができません。最大の難点は、グラフデータが、非規則的であることです。例えば、画像データと違い、グラフの各接点は異なる数の接点と繋がっており、さらに、異なるグラフは、異なる数の接点があります。また、自然言語などの系列データとは異なり、グラフデータには、接点の順番が定義されていません。従って、グラフの構造を効率よく利用できるような、全く新しい機械学習のツールの開発が必要になります。

グラフ機械学習、特に深層学習の分野で、最近注目を集めているのが Graph Neural Networks です。Graph Neural Networks は、非規則的なグラフデータを効率的に処理し、良いパターンを抽出できる深層学習のフレームワークとして期待されており、僕の Ph.D.の研究の大きな軸となるものです。

3. ICLR での研究発表

2019 年の 5 月 6 日から 9 日まで International Conference on Learning Representation (ICLR) という深層学習の国際会議で以下の論文の発表を行いました。

K. Xu*, W. Hu*, J. Leskovec, S. Jegelka. “How Powerful are Graph Neural Networks?”

Link: <https://openreview.net/forum?id=ryGs6iA5Km>

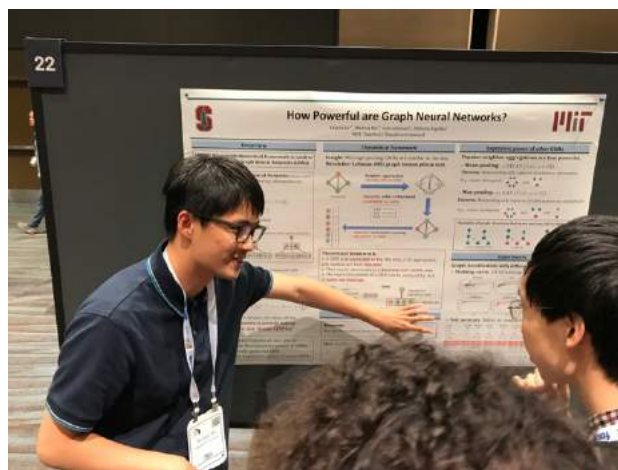
この論文では、これまで提案されてきた多くの Graph Neural Networks を「表現力」という新しい視点から理論的に分析するというものです。これまでの Graph Neural Networks の研究では、様々な手法がアドホックに提案されてきたため、混沌としていましたが、我々は、世界で初めて、理論的な理解とフレームワークを提案することができました。この論文をきっかけに、Graph Neural Networks のコミュニティ全体の意識が変わったようで、最近では、たくさんの理論論文や体系的な論文を見かけるようになりました。非常に良い流れだと思います。

深層学習が注目を集めていることもあり、今年は 4000 人ほどの参加者がいました。我々の論文は、口頭発表枠として採択されることができたので、全員の前でプレゼンをする機会をいただきました。何千人を前にプレゼンすることは

初めてだったので、かなり緊張しましたが、共著者の Keyulu 君や指導教員のおかげでなんとかうまくいったと思います。前日の夜 10 時に、先生から大量のコメントをもらって、当日の朝 4 時まで Keyulu 君とスライドの直しをしたのは今となっては良い思い出です。



口頭発表



ポスター発表

機械学習のコミュニティは、これからどんどん拡大していくと思います。国際会議で 1000 本の論文発表が同時に発表されるような時代に Ph.D. 学生をする僕にとっては、大衆に埋もれないように良い研究をすることが最も重要になると思います。実際、国際会議の会場で、Jure が「1 年に 1 本の great paper があれば十分だ。焦る必要はない。」と言ってくれました。

4. 化学応用のためのグラフ機械学習

グラフ機械学習の重要な応用分野として、化学があります。化合物の構造式は、グラフによって表すことができるので、グラフ機械学習のまさに適切な応用先であると言えます。また、機械学習によって、化学実験の結果を高精度に予測することができれば、創薬の著しい促進につながります。

僕は、ICLR の研究の応用先として、今年の 1 月から、Stanford の化学学科と共同研究を始めました。僕自身は、化学の知識がほぼ全くなかったので、完全に手探りのスタートでしたが、インパクトのある仕事をしているという確信があったため、非常に exiting でもありました。主なコラボレーターである Bowen 君は、Jure と化学の教授に co-advise されていたこともあり、共同研究は順調に進んでいます。主に、Graph Neural Networks の事前学習という手法に取り組んで

おり，化学への深層学習応用の際のいくつかの根本的な問題を解決できるので
ないかと期待しています。これまでの研究成果は，国際会議に投稿中で，以下に
pre-print という形で公開しています。

W. Hu*, B. Liu*, J. Gomes, M. Zitnik, P. Liang, V. Pande, J. Leskovec. “Pre-training
Graph Neural Networks.” <https://arxiv.org/abs/1905.12265>

良い成果が出始めているので，手法をさらに改善つつ，製薬会社と実際にコラボ
レーションを始められれば良いと思っています。

5. アメリカでの食生活

正直，アメリカの食べ物のクオリティは，コストとクオリティの両面において，
日本と比べ物にならないほど劣っています。海外に留学していた友人が日本に
帰ってきたときに，豪快に日本食を食べていたことが，今になって理解できま
す。アメリカでの外食は，あまりにも高すぎるので，普段は自炊をしています。
カレー，チャーシュー，しゃぶしゃぶ，すた丼などを作っていて，料理の腕はだ
いぶ上がったように思います。ただ，同じく Stanford のいた野田シェフに比べ
ればまだまだですが... 現在，ポスト野田さんを目指して修行中です... 時々友人
を家に招いてホームパーティーをしていて，これはこれで居酒屋にない楽しさ
があって良いです。



チャーシュー



カレー

6. おわりに

留学の1年目は，充実して過ごせたと思います。船井財団には，いつもサポート
していただき，本当に感謝しております。次の1年も，より実りのあるものとな
るように頑張っていきたいです。