

그래프 신경망 연구 동향 분석

정지선, 최철웅, 염성웅, 김경백
전남대학교 인공지능융합학과

jinguk20@naver.com, sentilemon02@gmail.com, yeomsw0421@gmail.com,
kyungbaekkim@jnu.ac.kr

Analysis on Research Trend of Graph Neural Network

Jisun Jung, Chulwoong Choi, Sungwoong Yeom, Kyungbaek Kim
Department of Artificial Intelligence Convergence in Chonnam National University

요약

그래프는 데이터 간의 추상적인 관계나 상호작용을 나타내는 데이터를 분석할 때 주로 사용한다. 기존의 머신러닝 모델은 그래프를 분석하는 데 어려움이 있었다. 최근 주목을 받는 Graph Neural Network(GNN)를 활용하면 그래프에 적용할 수 있는 신경망을 사용하여 분석이 가능하다. 이 논문은 그래프 특성을 이용하여 분석하는 GNN 모델의 기본원리와 최신동향을 소개하고 GNN을 활용한 연구 방향을 제안한다.

1. 서론

최근 데이터의 다양성과 관계의 복잡성이 높아짐에 따라 일련의 객체(Node)와 그 관계(Edge)를 표현하기 위한 그래프 모델링 연구가 점점 더 주목받고 있다. 이 그래프 모델링은 소셜 네트워크[1,4], 지식 그래프[6], 네트워크상의 라우팅 및 기타 여러 연구 분야[7]에서 응용할 수 있다. 예를 들어 Social Network를 분석하며 커뮤니티 또는 그룹을 효율적으로 식별하고자 그래프 패턴 일치 개념을 사용[1]하거나 COVID-19 확산에 따른 국가별 인구 백만 명당 사례 및 사망률 분석[2]을 위한 사용 또는 GPS 데이터로부터 사용자의 이동 패턴을 분석[3]할 때 도움이 된다.

시계열 데이터나 음성, 이미지와 같은 데이터는 기존의 CNN 및 RNN과 같은 표준 신경망을 통해 분석할 수 있다. 하지만, 그래프 데이터는 고정된 형태가 아니라 같은 인접 행렬을 가지더라도 다르게 표현된다. 특정 순서로 Node의 특징을 차례로 쌓는 표준 신경망은 그래프 모형의 입력을 제대로 처리할 수 없다. 이를 위해 그래프 임베딩을 기반으로 그래프 구조에서 정보를 집합적으로 집계하기 위한 그래프 신경망(GNN)이 제안된다. 그래프 신경망은 RNN 커널을 사용하여 그래프에서 확산 과정을 동시에 모델링할 수 있다. 따라서, GNN은 재귀 신경망을 확장하며 방향성이 있거나 없거나 또는 레이블링 및 순환 그래프 등의 실질적으로 유용한 대부분의 그래프에 적용할 수 있다[5].

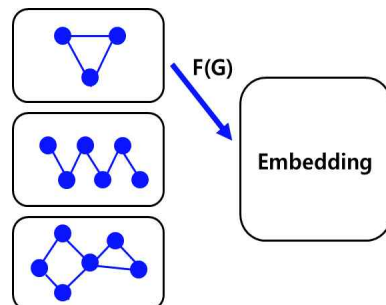
본 논문은 GNN 최신 모델의 기본 원리를 정리하고 활용 가능한 연구 방향을 제안한다. 2장에서는 GNN 최신 모델의 기본 원리와 GNN의 다양한 최신 모델을 소개한

다. 3장에서는 GNN 활용 분야와 연구를 소개하고 4장에서 결론 및 향후 연구에 대해 기술한다.

2. GNN Model 동향

2.1 Graph Neural Network(GNN)

GNN은 Node와 Node가 Edge로 연결되어 정의된다는 것이 핵심이다. 만약 Node와 연결된 Edge가 하나도 없다면 그 Node는 고립되고 아무런 상관관계도 알 수 없어 무의미한 데이터가 된다. 이 점에 유의하여 주어진 모든 Node가 각각의 특징을 설명하기 위해 다른 Node와 연결된 어떤 상태로 표현되어 있다고 가정한다.



(그림 1) GNN 모델 Representation 도식화

그림 1은 GNN 모델의 Representation을 도식화하였다. 주로 연결된 상호관계와 이웃 되는 Node들의 상태를 이용하여 각 Node의 상태를 학습하고 Node Embedding을 사용하여 다음 상황을 예측한다. 임의의 그래프 G 를 하나

의 Representation으로 표현하기 위해 $F(G) = \text{Embedding}$ 으로 표현할 수 있는 함수 F 를 찾는 것이 목표이다. GNN은 그래프에 직접 적용할 수 있는 신경망 모델로 점, 선, 그래프 예측이 가능하며 GRNN, Spatial-based GCN, Spectral-based GCN의 다양한 종류의 모델이 있다.

2.2 Graph Recurrent Neural Network(GRNN)

GRNN은 Banach Fixed-Point Theorem에 기반하여 만들어졌다[6]. k 가 크면, x 에 매핑 T 를 적용하는 작업을 k 번 수행한 값과 $k+1$ 번 적용한 값이 거의 같다는 의미로 해석 가능하며 입력과 출력이 아래 수식1 정의에 따라 Node의 상태를 학습한다.

$$x_n = f_n(l_n, l_{co[n]}, x_{ne[n]}, l_{ne[n]}) \quad (1)$$

수식1에서의 l_n 은 Node n 의 특성을 가지고 $l_{co[n]}$ 은 Node n 과 연결된 Edge의 특성을 $l_{ne[n]}$ 은 Node n 과 연결된 점들의 특성, $x_{ne[n]}$ 은 Node n 과 연결된 Node들의 상태를 의미한다. k 번 반복해 학습한 후 마지막 상태 x_n 과 특징 l_n 을 사용하여 결과 $o_n = g_w(x_n, l_n)$ 을 출력한다.

2.3 Spatial Convolutional Network(Spatial-based GCN)

Spatial-based GCN는 분류와 이미지 영역 구분에 많이 쓰이는 Convolutional Neural Network(CNN)의 아이디어와 비슷하다[7]. 이미지에서의 합성곱(Convolution)은 학습을 통해 중심 픽셀의 주변 픽셀을 합치는 것으로 Spatial-based GCN의 핵심은 CNN에서 주변 픽셀 대신 연결된 Node의 특징을 적용한 것이다.

2.4 Spectral-based GCN

Spectral-based GCN에 대한 연구는 그래프의 신호 처리 이론에 기반한다[8].

$$Z = f(X, A) = \text{softmax}(\hat{A} \text{Relu}(\hat{A} X W^{(0)}) W^{(1)}) \quad (2)$$

수식2를 통해 기존 fully-connected layer 두 개를 연결한 식에서 학습 가능한 행렬 w 에 인접 행렬 A 를 약간 변형한 \hat{A} 가 붙는다.

Spectral-based GCN과 Spatial-based GCN은 각각 이미지에서, 그래프에서의 내용을 기초로 다르지만 비슷한 연산 과정을 거친다. 현재 대부분의 Convolutional GNN은 이와 같은 연산 과정을 이용해 Node의 정보를 공유하고 학습해 전달하는 것에 대한 많은 연구가 진행되고 있다[9].

3. GNN을 활용한 연구

그래프는 유연한 데이터 구조로 되어 있고 다양한 데이터 구조로 일반화가 가능하다. 따라서 데이터를 그래프 구조로 표현할 때 문제를 새로운 관점에서 바라볼 수 있고 사전 지식을 이용해 데이터에 Bias를 주는 것도 가능하다. 분야에 따라 데이터 그 자체가 자연스럽게 그래프로 표현

되는 경우도 있다.

GNN은 Node Classification, Link Prediction, Graph Classification에 적용할 수 있다. Node Classification에서는 Node embedding을 통해 Node들을 분류하는 것으로 그래프의 일부만 매핑되었을 때 준지도학습을 수행한다[8]. 일반적으로 흔히 알 수 있는 응용 분야로 Youtube 동영상, Link Prediction은 그래프의 Node들 사이의 연관성이 얼마나 있을지 예측하는 것으로 Facebook의 친구 추천 또는 Netflix 또는 Youtube의 영상 추천 알고리즘 등이 있다. Graph Classification은 그래프를 분류하는 것으로 Image Classification과 비슷하지만, 그래프로 처리하는 것으로 화학 분야 등에서 쓰일 수 있다.

연구 분야에서 GNN을 활용한 예시로 CNN으로 탐지된 물체들의 scene graph를 생성하여 객체와의 관계를 파악한 연구[10]가 있었으며 반대로 scene graph로부터 이미지를 생성한 연구[11]가 진행되었다. Visual Question Answering 문제에는 장면과 질문으로부터 각각 scene graph와 question graph를 만들어 pooling과 GRU를 적용하는 방식으로 그래프를 도입하여 성능을 향상시킬 수 있다[12].

4. 결론

그래프 분석을 활용하면 보다 더 많은 데이터 간의 관계와 연관성을 분석할 수 있다. 그러나 기존의 그래프를 분석하는 방법들로는 사전 연구나 지식 없이 그래프만을 가지고 분석하기에는 어려움이 있었다. 그의 대안으로 최근 주목을 받는 GNN은 Node 정보와 Topology 구조를 자연스럽게 통합하여 그래프 데이터에 대한 의미 있는 표현을 학습하는 데 큰 성공을 거두었고 실질적으로 유용한 대부분의 그래프에 적용할 수 있는 모델로 떠올랐다.

GNN은 주어진 모든 Node가 각각의 특징을 설명하기 위해 다른 Node와 연결된 어떤 상태로 표현되어 있다고 가정한다. 주로 연결된 상호관계와 이웃 되는 Node들의 상태를 이용하여 각 Node의 상태를 학습한 후 Node Embedding을 통해 예측 업무를 수행하는 방식이다. 점, 선, 그래프 레벨의 예측에 따라 GRNN, Spatial-based GCN, Spectral-based GCN의 형태로 분류되었다. GNN을 사용하면 머신러닝 모델을 분석할 때 유용하여 최근 많은 연구에 적용되고 있음을 알 수 있다.

향후에는 그래프 데이터를 이용하여 GNN의 최신모델을 적용해 네트워크 Topology를 학습하고 각 Node와 Edge의 특성을 파악하여 의미 있는 예측을 추론해보고자 한다.

Acknowledgements

이 논문은 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(NRF-2017R1A2B4012559).

참 고 문 헌

- [1] Fan Wenfei, "Graph pattern matching revised for social network analysis", Proceedings of the 15th International Conference on Database Theory, 2012.
- [2] Idogawa M, Tange S, Nakase H, Tokino T, "Interactive web-based graphs of novel coronavirus COVID-19 cases and deaths per population by country", Clinical Infectious Diseases, 2020.
- [3] 최정화, 이향진, 박영택. "대용량의 GPS 데이터 분석을 위한 사용자 선호 경로 모델 표현", 『정보과학회논문지: 소프트웨어 및 응용』 39.4, 2012. PP.315-327.
- [4] Fan W, Ma Y, Li Q, Wang J, Cai G, Tang J, Yin D, "A Graph Neural Network Framework for Social Recommendations", IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2020.
- [5] Gori M, Monfardini G, Scarselli F, "A new model for learning in graph domains", Proceedings. 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks. Vol.2, July 2005.
- [6] Scarselli F, Gori M, Tsoi A C, Hagenbuchner M, Monfardini G, "The graph neural network model", IEEE Transactions on Neural Networks 20.1, 2008. pp.61-80.
- [7] Wu Z, Pan S, Chen F, Long G, Zhang C, Philip S Y, "A comprehensive survey on graph neural networks", IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2020.
- [8] Kipf Thomas N, Max Welling, "Semi-supervised classification with graph convolutional networks", arXiv preprint arXiv:1609.02907, 2016.
- [9] Gilmer J, Schoenholz S S, Riley P F, Vinyals O, Dahl G E, "Neural message passing for quantum chemistry", arXiv preprint arXiv:1704.01212, 2017.
- [10] Xu D, Zhu Y, Choy C B, Fei-Fei L, "Scene graph generation by iterative message passing", Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition, 2017. pp.5410-5419.
- [11] Johnson J, Gupta A, Fei-Fei L, "Image generation from scene graphs", Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition, 2018.
- [12] Teney D, Liu L, van Den Hengel A, "Graph-structured representations for visual question answering", Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition, 2017. pp.1-9.

공지사항

스마트미디어학회 조직위원회를 대표하여, 2020 추계학술대회를 보다 잘 준비하기 위한 협력에 감사드립니다. 논문 제출과 더불어 해당 논문의 분야에 대해 조사하고자 합니다.

논문이 수락된 경우, 학회 프로그램 세션에 분류될 트랙을 선택해주시기 바랍니다.

아울러 학문후속세대(학부생) 논문인 경우에는 아래의 칸에 추가 표시를 부탁드립니다.

【●】 Smart Information

지능형컴퓨터, 클라우드컴퓨팅, 분산 및 병렬처리시스템, 인공지능, 영상처리
컴퓨터그래픽스, 음성처리, 멀티미디어, HCI, 빅데이터, 지능정보처리, 정보보호
모바일정보통신, 사물인터넷, 자동제어, 반도체, Microwave/Wireless, Optics

【●】 Information System

정보시스템 조직과 관리, e-비즈니스, ERP, CRM, SCM, 스마트워크, 소셜네트워크
IT아웃소싱, 프로젝트관리, 스마트라이프, 스마트 물류/금융/농업/교통/헬스케어
산업융합보안, 개인정보/의료정보/금융정보/산업기술보호, 스마트그리드, AMI

[] Contents & Services

융복합콘텐츠, 게임, 애니메이션, 웹/모바일, 스마트러닝, 문화디자인, 유니버설디자인
UI/UX, 인터랙션 디자인, 디자인매니지먼트, 정보디자인, 디자인마케팅, 디자인방법론
디자인이론

[] Smart Media

미디어융합, 융복합 미디어, 디지털사이니지, 스토리텔링, 미디어콘텐츠와 기획, 창작, 전송
유통, 마케팅

[] 학문후속세대(학부생) 논문