

공간적 그래프 임베딩을 활용한 그래프 암시적 신경 표현

박진호[○], 김동우^{*}

[○]포항공과대학교 인공지능대학원,

^{*}포항공과대학교 인공지능대학원

e-mail: jhpark756@postech.ac.kr[○], dongwookim@postech.ac.kr^{*}

Graph Implicit Neural Representations Using Spatial Graph Embeddings

Jinho Park[○], Dongwoo Kim^{*}

[○]Graduate School of Artificial Intelligence, POSTECH,

^{*}Graduate School of Artificial Intelligence, POSTECH

● 요약 ●

본 논문에서는 그래프 구조의 데이터에서 각 노드의 신호를 예측하는 연구를 진행하였다. 이를 위해 분석하고자 하는 그래프에 대해 연결 관계를 기반으로 각 노드에 비-유클리드 공간 상에서의 좌표를 부여하여 그래프의 공간적 임베딩을 얻은 뒤, 각 노드의 공간적 임베딩을 입력으로 받고 해당 노드의 신호를 예측하는 그래프 암시적 신경 표현 모델을 제안 하였다. 제안된 모델의 검증에 위해 네트워크형 데이터와 3차원 메시 데이터 두 종류의 그래프 데이터에 대하여 신호 학습, 신호 예측 및 메시 데이터의 초해상도 과정 실험들을 진행하였다. 전반적으로 기존의 그래프 암시적 신경 표현 모델과 비교하였을 때 비슷하거나 더 우수한 성능을 보였으며, 특히 네트워크형 그래프 데이터 신호 예측 실험에서 큰 성능 향상을 보였다.

키워드: 암시적 신경 표현(implicit neural representation), 비-유클리드성(non-Euclidean), 그래프(graph), 공간적 임베딩(spatial embedding), 혼합곡률 공간(mixed-curvature space)

I. Introduction

최근 암시적 신경 표현(implicit neural representations)이 다양한 신호 처리 및 예측에 있어 구조적으로 간단함에도 불구하고 우수한 성능을 낸다는 점에서 주목받고 있다[1]. 그러나, 대다수의 암시적 신경 표현 모델들은 예측하고자 하는 신호의 좌표가 유클리드 공간으로 표현될 수 있는 데이터들 위주로 다루어 왔다[2].

그래프(graph)는 소셜 네트워크나 논문 인용 관계와 같은 각 개체, 즉 노드들 사이의 연결 관계를 표현해 주는 추상적인 구조의 데이터로, 그래프 자체만으로는 각 노드의 위치가 정의되지 않는다는 점에서 비-유클리드성(non-Euclidean) 데이터에 속한다. 때문에 암시적 신경 표현 기반의 그래프 데이터 분석 모델은 보고된 경우가 많지 않으며, 예로 Generalized implicit neural representation (GINR) 과 같은 시도가 있었다[2].

본 연구에서는 GINR을 기반으로, 그래프의 공간적 임베딩을 부여한 뒤에 이를 암시적 신경 표현 모델의 입력으로 제공하는 구조의 그래프 암시적 신경 표현 모델을 제안하고, 그 성능을 네트워크형 그래프와, 3차원 메시 두 가지 구조의 그래프 데이터를 활용한 실험을

통해 확인해 본다. 제안한 모델을 발전시킴으로써 그래프 데이터 분석에 있어 새로운 방법론을 개발할 수 있을 것으로 기대할 수 있다.

II. Related Work

1. Implicit Neural Representations (INRs)

암시적 신경 표현은 신호 데이터 처리에 활용되는 모델로, 각 데이터 지점의 좌표값과 같은 위치 정보들을 입력으로 받고, 해당 지점에서의 신호의 값을 예측해서 출력하게 된다. 대부분의 암시적 신경 표현은 2차원 또는 3차원 이미지나 순차 데이터의 처리에 활용되어 왔다[1].

암시적 신경 표현 모델의 예로 Neural Radiance Field (NeRF)[3]와 Sinusoidal Representation Network (SIREN)[1]이 있다. NeRF는 3차원 물체 각 지점에 대한 x, y, z 좌표를 입력의 일부로 받는데,

각 좌표별로 위치 임베딩을 적용한 뒤 얻어진 임베딩들을 다층 퍼셉트론에 통과시키는 방식을 취하였다. SIREN 모델의 경우 좌표를 전처리하지 않는 대신 다층 퍼셉트론의 각 층 사이의 활성화 함수를 기존의 ReLU 함수 대신 사인 함수로 변경하였다.

2. Graph INRs

기존의 암시적 신경 표현 모델들의 경우 각 지점의 위치 정보가 물리적인 값들로 나타내어질 수 있는 유클리드성 데이터 위주로만 취급하였다. 그래프와 같은 비-유클리드성 데이터의 경우 체계적으로 각 지점에 좌표를 부여하는 방식을 정의하는 데 어려움이 있기 때문에, 좌표를 입력으로 받는 암시적 신경 표현 모델들 중 이러한 데이터들을 다루는 경우는 잘 다루어지지 않았다.

GINR은 비-유클리드성 데이터를 처리할 수 있는 암시적 신경 표현의 하나로, 그래프의 각 노드에 대하여 좌표값이 아닌 각 노드의 스펙트럼 임베딩 (spectral embedding)을 입력으로 받고, 각 노드의 신호값을 예측하여 출력한다. 그래프의 스펙트럼 임베딩의 경우 먼저 신호를 학습하고자 하는 그래프의 연결 관계를 나타내는 인접 행렬을 얻은 뒤, 이 행렬을 특잇값 분해하고, 정해진 개수만큼의 주성분 고유벡터들만 취하는 방식으로 얻어진다. 즉 GINR은 그래프의 노드 좌표값이 아닌, 각 노드별로 대응되는 스펙트럼 임베딩, 즉 고유벡터들의 값들을 입력으로 받게 된다. 이런 특징을 가진 GINR은 그래프 신호의 학습과 메시 데이터의 초해상도 과정이 가능하다[2].

3. Limitations of Spectral Graph Embeddings

그래프 암시적 신경 표현 모델에서 그래프에 대응하는 입력을 얻기 위해 그래프를 임베딩하는 방식에는 크게 GINR에 활용된 스펙트럼 임베딩과 공간적 임베딩(spatial embedding)이 있다.

스펙트럼 임베딩의 경우 계산이 비교적 간단하고 빠르게 이루어지지만, 인접 행렬이 조금만 바뀌어도 고유벡터의 값이 크게 바뀔 가능성이 높으며, 이로 인해 노드 추가 및 제거와 같은 그래프의 국부적 수정에 취약하다는 단점을 가진다. 따라서 스펙트럼 임베딩을 이용하는 모델의 경우 한정된 방식의 그래프 수정만 가능하다[4].

III. The Proposed Scheme

그래프의 공간적 임베딩은 그래프의 각 노드에 비-유클리드성 좌표를 부여한 뒤, 그래프에서의 노드 사이의 거리 관계가 대응되는 좌표값들을 기반으로 계산되는 거리 관계와 최대한 가까워지도록 학습하는 방식으로 얻어지게 된다. 즉 공간적 임베딩은 그래프에 대응되는 비-유클리드성 좌표들의 모임이며, 해당 임베딩을 사용하는 그래프 암시적 신경 표현 모델의 경우 기존의 암시적 신경 표현 모델과 유사하게 각 노드의 좌표를 입력으로 받게 된다. 그래프의 각 노드에 좌표가 따로 부여되기 때문에 스펙트럼 임베딩에 비해 그래프의 국부적 수정에 영향을 덜 받게 되며, 기존 노드들의 좌표를 기반으로 새로 추가되는 노드의 위치를 계산해서 그래프에 추가하는 것 또한 가능하다[4]. 따라서, 그래프 암시적 신경 표현 모델에서

스펙트럼 임베딩 대신 공간적 임베딩을 사용하면 기존보다 다양한 그래프 관련 작업에도 해당 모델을 활용할 수 있을 것으로 기대할 수 있다.

본 연구에서는 GINR을 기반으로, 그래프의 스펙트럼 임베딩 대신 공간적 임베딩을 입력으로 받고, 각 노드의 신호를 예측 및 출력하는 그래프 암시적 신경 표현 모델을 제안한다. 이후 네트워크형 그래프와 3차원 메시의 2가지 구조의 그래프 데이터를 활용한 실험들을 통해 제안한 모델의 성능을 확인한다. 제안하는 모델은 크게 그래프의 공간적 임베딩 계산 과정과 계산된 임베딩을 암시적 신경 표현의 입력으로 제공하여 예측값을 얻는 과정의 두 단계로 구성된다.

그래프의 공간적 임베딩은 그래프 데이터의 연결 방식에 따른 영향을 최소화하여 받게 하도록, 쌍곡선 공간(hyperbolic space)과 구형 공간(spherical space), 유클리드 공간(Euclidean space)의 곱공간(product space)으로 정의되는 혼합곡률 공간(mixed-curvature space) 상에서 이루어졌다[5]. 얻어진 그래프의 공간적 임베딩은 그래프 암시적 신경 표현의 입력으로 주어진다. 제안한 그래프 암시적 신경 표현의 전체적인 구조는 Fig. 1과 같다.

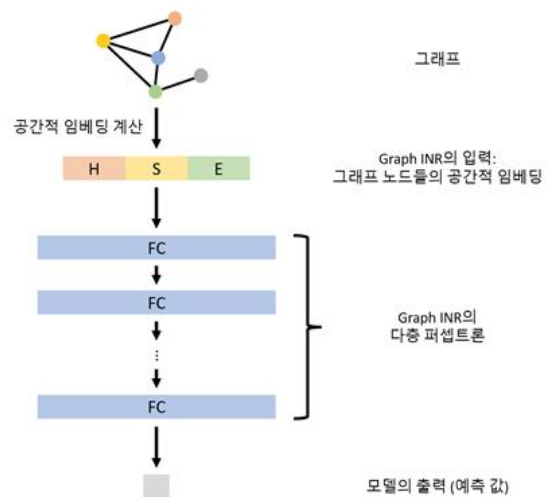


Fig. 1. Architecture for the Proposed Model
H, S, E = Embeddings for graph on hyperbolic, spherical, and Euclidean spaces, respectively,
FC = Fully-connected layer.

IV. Experiments

1. 데이터셋

실험에 사용된 데이터셋은 US Election, Stanford Bunny의 두 가지이다.

1.1 US Election

래프 노드의 정보에 물리적인 위치 정보가 직접적으로 포함되어 있지 않은 네트워크형 데이터셋으로, 2012년의 미국 선거 결과를 나타낸다. 각 노드는 미국의 카운티 (county) 에 대응되며, 노드

정보는 카운티 별 수익, 출생률, 이민률과 같은 통계 수치들이다. 노드의 신호는 대응되는 카운티의 선거 결과 지수(공화당 투표 수를 G , 민주당 투표 수를 D 라고 하였을 때, $(G - D) / (G + D)$ 의 값)이다. 간선은 Facebook Social Connectedness Index를 기반으로 구성된다[6].

1.2 Stanford Bunny

토끼의 형태를 가진 3차원 메시 데이터셋으로, 각 노드는 물체 표면에서의 한 점으로, 노드 정보는 3차원 공간에서의 x, y, z 좌표들이 다[7]. 그래프의 신호는 Gray-Scott reaction-diffusion model을 통해 산호 패턴의 단색 계열 신호를 부여해서 얻어진다[8].

2. 실험 설계

실험은 총 3가지로, 그래프 신호 학습, 그래프 신호 예측, 3차원 메시 초해상도 과정으로 구성된다. 첫 두 실험의 경우 두 종류의 데이터셋이 모두 활용되며, 네트워크형 데이터셋인 US Election의 경우 제시한 모델과 GINR의 성능을 비교하고, 3차원 메시 데이터셋인 Stanford Bunny의 경우 제시한 모델과 GINR, INR의 성능을 비교한다. 3차원 메시 초해상도 과정 실험의 경우 Stanford Bunny 데이터셋만 활용되며, 제시한 모델과 GINR, INR의 성능을 비교한다.

2.1 그래프 신호 학습

모델이 주어진 그래프 신호를 잘 학습하여 학습에 사용된 신호를 정확하게 예측할 수 있는지를 확인하는 실험으로, 모든 노드가 모델 학습에 활용된다.

2.2 그래프 신호 예측

모델이 그래프의 일부 노드들의 신호를 기반으로 학습 과정에서 다루지 않은 노드들의 신호를 예측하는 능력을 확인하는 실험으로, 노드의 비율은 Training : Validation : Test = 8 : 1 : 1로 하였다.

2.3 3차원 메시 초해상도 과정

모델이 저해상도 3차원 메시의 신호 값들로부터 mesh subdivision 과정을 거쳐 얻어진 고해상도 3차원 메시에서의 새로운 노드의 신호들을 예측하는 능력을 확인하는 실험이다. 예측된 신호와 고해상도 3차원 메시에 부여된 원본 신호를 비교한다. Mesh subdivision 과정은 원본 메시의 각 간선에 중점을 추가하고, 원본 메시의 각 삼각형 면을 4개의 작은 삼각형으로 나누는 과정으로 이루어진다[9].

3. 실험 결과

3.1 그래프 신호 학습

실험 결과는 Table 1에 정리되어 있다. 제시한 모델과 GINR 둘 다 그래프 신호를 잘 학습함을 확인할 수 있으며, INR 또한 Stanford Bunny 데이터셋에서 신호를 잘 학습하는 것을 확인할

수 있다.

Table 1. Results for Graph Signal Learning Tasks

Dataset	US Election		Stanford Bunny	
	R ² (↑)	MSE (↓)	R ² (↑)	MSE (↓)
Proposed	1.000	$7.32 \cdot 10^{-7}$	1.000	$7.89 \cdot 10^{-9}$
GINR	0.997	$3.41 \cdot 10^{-3}$	1.000	$8.18 \cdot 10^{-9}$
INR	-	-	1.000	$8.45 \cdot 10^{-9}$

3.2 그래프 신호 예측

실험 결과는 Table 2에 정리되어 있다. 네트워크형 데이터셋인 US Election의 경우 제시한 모델이 GINR보다 그래프 신호 예측 능력이 우수한 것으로 나타났다. 3차원 메시 데이터셋인 Stanford Bunny의 경우 세 모델 모두 비슷한 오차값을 보였다.

Table 2. Results for Graph Signal Prediction Tasks

Dataset	US Election		Stanford Bunny	
	R ² (↑)	MSE (↓)	R ² (↑)	MSE (↓)
Proposed	0.434	$6.64 \cdot 10^{-1}$	-0.210	$6.97 \cdot 10^{-3}$
GINR	0.141	$1.01 \cdot 10^0$	-0.006	$5.79 \cdot 10^{-3}$
INR	-	-	0.063	$5.39 \cdot 10^{-3}$

3.3 3차원 메시 초해상도 과정

Stanford Bunny에서 mesh subdivision 과정을 통하여 얻어진 즉 초해상도 과정을 거친 메시에서의 실제 신호 값과 각 모델이 예측한 신호 값을 이미지로 나타내어 비교하면 Fig. 2와 같다. 제안한 모델의 경우 메시 전체에서 실제 신호의 패턴을 잘 재현하였음을 확인할 수 있었다. 반면, GINR의 경우 귀 끝부분의 신호를 제대로 재현하지 못하였으며, INR에서는 메시의 전체적인 패턴을 재현하지 못하였다.

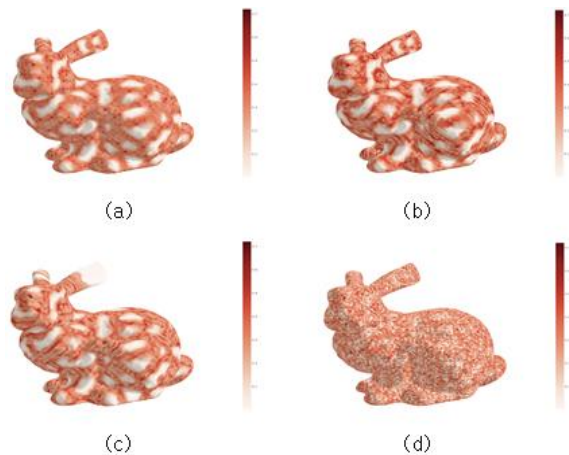


Fig. 2. Comparison of Signals on the Super-Resolved Stanford Bunny Mesh.

(a) true signal, (b) proposed model, (c) GINR, (d) INR.

언어진 신호 값들과 실제 신호 값들을 수치적으로 비교한 결과를 Table 3에 정리하였다. 세 모델 중 GINR의 예측 결과가 수치적으로 가장 나빴다.

Table 3. Results for 3D Mesh Super-Resolution Tasks

Model	R ² (↑)	MSE (↓)
Proposed	0.715	3.48·10 ⁻³
GINR	-1.493	3.05·10 ⁻²
INR	0.857	1.75·10 ⁻³

V. Conclusions

본 연구에서는 기존 GINR 모델을 기반으로 그래프의 스펙트럼 임베딩 대신 공간적 임베딩을 입력으로 제공함으로써 그래프와 같은 비-유클리드성 데이터에 대한 분석 및 신호 예측 작업을 수행하는 그래프 암시적 신경 모델을 제안하고, 실험을 통해 제안한 모델의 성능을 GINR과 비교해 보았다. 그 결과, 제안한 모델은 전반적으로 기존의 그래프 암시적 신경 표현 모델과 비교하였을 때 비슷하거나 더 우수한 성능을 보였으며, 특히 네트워크형 그래프 데이터 신호 예측 과정에서 큰 성능 향상을 보였다.

네트워크형 그래프와 같이 각 노드의 정보에 물리적인 위치 정보가 포함되지 않은 그래프 데이터의 분석 작업에서 이 모델의 성능을 높이는 방향을 찾는 것과, 초해상도 과정을 넘어서 보다 일반화된 노드 추가 및 제거 과정과 같은 국부적인 그래프 수정 과정에서의 모델 안정성을 높이는 것 모두 향후 흥미로운 연구 방향이 될 것으로 예상된다. 제안한 모델이 그래프 데이터의 분석 및 예측에 있어서 새로운 가능성을 열 수 있을 것으로 기대된다.

REFERENCES

[1] V. Sitzmann, J. N. P. Martel, A. Bergman, D. B. Lindell, G. Wetzstein, "Implicit Neural Representations with Periodic Activation Functions," NeurIPS, 2020.

[2] D. Grattarola, P. Vandergheynst, "Generalised Implicit Neural Representations," NeruIPS, 2022.

[3] B. Mildenhall, P. P. Srinivasan, M. Tancik, J. T. Barron, R. Ramamoorthi, R. Ng, "NeRF: Representing Scenes as Neural Radiance Fields for View Synthesis," ECCV, 2020.

[4] Z. Wu, S. Pan, F. Chen, G. Long, C. Zhang, P. S. Yu, "A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks," *arXiv:1901.00596*, 2019.

[5] A. Gu, F. Sala, B. Guel, C. Ré, "Learning Mixed-Curvature Representations in Products of Model Space," ICLR, 2019.

[6] J. Jia, A. R. Benson, "A Unifying Generative Model for Graph Learning Algorithms: Label Propagation, Graph

Convolutions, and Combinations," *arXiv:2101.07730*, 2021.

[7] Stanford Bunny, Stanford University Computer Graphics Laboratory, <https://graphics.stanford.edu/data/3Dscanrep/>

[8] P. Gray, S. K. Scott, "Autocatalytic Reactions in the Isothermal, Continuous Stirred Tank Reactor: $a + 2b \rightarrow 3b$; $b \rightarrow c$," *Chemical Engineering Science*, Vol. 39, No. 3, pp. 1087-1097, 1984.

[9] C Loop. "Smooth Subdivision Surfaces Based on Triangles," 1987.