

Dr hab. Przemysław Spurek, prof. UJ
Uniwersytet Jagielloński
Wydział Matematyki i Informatyki

26.07.2023

RECENZJA

wniosku w sprawie nadania
mgr. inż. Piotrowi Bielakowi
stopnia doktora w dziedzinie nauk inżynierjno-technicznych
w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja

Osiągnięciem przedłożonym przez mgr. inż. Piotra Bielaka jest zbiór publikacji zatytułowany "Methods for selected problems in unsupervised graph representation learning". Jest to **cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych** w czasopismach naukowych lub w recenzowanych materiałach z konferencji międzynarodowych. Na cykl ten składają się 4 artykuły naukowe opublikowane między innymi w renomowanych czasopismach takich jak: Knowledge-Based Systems, Information Sciences oraz jednego artykułu opublikowanego jako materiał pokonferencyjny Journal of Computational Science.

Zgodnie z informacją zawartą we wniosku, sumaryczny współczynnik impact factor (IF) publikacji wchodzących w skład osiągnięcia z uwzględnieniem wartości z roku 2023 wynosi 28.328. Wartości współczynnika IF poszczególnych czasopism, w których opublikowano artykuły wchodzące w skład osiągnięcia wahają się w zakresie od 3.817 do 8.233. Sumaryczna liczba punktów MEiN przypisanych do publikacji wchodzących w skład cyklu wynosi 840, przy czym punktacja poszczególnych prac waha się w zakresie od 100 do 200, osiągając średnią na poziomie 168 punktów. Prace te doczekały się też dużej ilości cytowań, w szczególności praca [P1] posiada 50 cytowań na podstawie scholar google.

Od strony bibliometrycznej, ocena przedstawionego przez mgr. inż. Piotra Bielaka osiągnięcia naukowego wypada więc **bardzo dobrze**. Czasopisma, w których opublikowane zostały prace wchodzące w skład cyklu to wydawnictwa o dużym prestiżu, uznane przez środowisko naukowe: Knowledge-Based Systems, Information Sciences.

Pan mgr inż. Piotr Bielak nie jest samodzielnym autorem żadnej publikacji wchodzącej w skład cyklu, a prace posiadają od trzech do sześciu współ-

WPLYNĘŁO

28-07-2023

RDN-IT / 147 / 2023

autorów. We wszystkich pracach doktorant jest pierwszym autorem, a jego udział jest wiodący. Indywidualny wkład merytoryczny mgr. inż. Piotra Bielaka w prace wchodzące w skład cyklu jest wiodący, jasno zdefiniowany i nie budzi wątpliwości.

Praca doktorska jest dobrze napisana. Autor wprowadza wszystkie pojęcia potrzebne do zrozumienia prac wchodzących w skład cyklu, przejrzysto przedstawiając zagadnienia. Dzięki temu doktorat czyta się z przyjemnością. Ponadto autor zwraca dużą uwagę na poprawność matematyczną wprowadzanych pojęć związanych z grafami. Poszczególne prace tworzą cykl powiązanych tematycznie artykułów. Jednakże należy zaznaczyć, że autor powinien lepiej sformułować tytuł pracy doktorskiej. Użyty w tytule zwrot "wybrane problemy" jest zbyt ogólny i niekonkretny. Prace tworzą spójny ciąg publikacji i tytuł mógłby być bardziej precyzyjny. Poszczególne publikacje są dobrze napisane merytorycznie i technicznie. Problemy rozważane w poszczególnych tytułach są umotywowane i sformułowane bardzo naturalnie. Natomiast same rozwiązania problemów są intuicyjne.

W pracy [P1] autor buduje rozwiązanie w zakresie self-supervised learning (SSL) dla danych grafowych. W praktyce autor przedstawia wersję klasycznego algorytmu Barlow Twins w kontekście danych grafowych. Metoda Graph Barlow Twins (G-BT) wykorzystuje korelację krzyżową, zamiast pracować na przykładach negatywnych, co jest bardzo ważne w przypadku danych grafowych.

Powyższą metodę można traktować jako przeniesienie klasycznej metody Barlow Twins [14] działającej na zdjęciach na przestrzeń grafów. Algorytm G-BT najpierw przekształca wejściowy graf za pomocą funkcji augmentacji, aby uzyskać dwa zmodyfikowane grafy. Następnie przepuszczamy oba z nich przez ten sam enkoder aby zbudować macierze reprezentujące grafy. Do tak powstałej macierzy stosujemy klasyczną funkcję kosztu algorytmu Barlow Twins.

Aby algorytm zadziałał na danych grafowych autor wprowadza modyfikację w trzech częściach: funkcji kosztu, architekturze enkodera oraz sposobie augmentacji. W przypadku augmentacji rozważane są klasyczne dla grafów augmentacje: edge dropping oraz node feature masking. Enkoder może być prawie każdą siecią grafową. Jako funkcję kosztu wykorzystano korelację krzyżową. Najpierw macierze reprezentujące grafy są normalizowane, a następnie obliczana jest macierz korelacji krzyżowej. W kolejnym etapie wykorzystuje się funkcję kosztu, które porównuje wyznaczoną macierz do macierzy tożsamościowej (Barlow Twins loss function).

mgr. inż. Piotr Bielak

mgr. inż. Piotr Bielak

pozwala przyspieszyć proces w stosunku do metod liczących reprezentację niezależnie w każdej chwili czasowej. W pracy zaprezentowane są dwa podejścia. Podstawowa wersja wykorzystuje tylko jeden krok czasowy FILDNE oraz jego modyfikacja k-FILDNE, która bierze pod uwagę dłuższy okres czasu.

Zaproponowana metoda składa się z kilku kroków. Najpierw budowane są reprezentacje. W tym kroku można wykorzystać dowolną istniejącą metodę. Następnie mamy etap wyboru kluczowych węzłów (Reference nodes selection). Na końcu tworzona jest reprezentacja w nowej chwili czasowej. Cały proces jest intuicyjny i dobrze zdefiniowany. W konsekwencji powyższe podejście jest bardziej wydajne od metod opartych na tworzeniu reprezentacji w niezależnych chwilach czasowych.

Natomiast nasuwają się następujące pytania: 1. Jak ważna jest faza Reference nodes selection? Czy możliwe jest wykorzystanie wszystkich wierzchołków do budowania reprezentacji w nowym kroku czasowym. 2. W modelu wykorzystuje się tak zwany Base Method do tworzenia reprezentacji. Czy dałoby się stworzyć komponent, który łączyłby tę fazę z etapem Alignment (reference nodes), na przykład wykorzystując w jakiś sposób metodę atencji.

W pracy [P4] autor proponuje wprowadzenie dwóch rodzajów podobieństwa wierzchołków. Pierwsze klasyczne opiera się na strukturze grafu. Drugie jest bardziej abstrakcyjne w kontekście grafów i opiera się na podobieństwie etykiet wierzchołków. W moim odczuciu takie podejście jest najmniej intuicyjne ze wszystkich publikacji zawartych w niniejszej pracy doktorskiej. Fakt, że wierzchołki są do siebie podobne i jednocześnie niepołączone może być ważną informacją, którą w jakiś sposób osłabiamy. W publikacji jest brak naturalnego przykładu, w którym takie podobieństwo miałoby kluczowy wpływ na zrozumienie struktury grafu.

Abstrahując jednak od samej motywacji, praca jest dobrze przygotowana technicznie. Problem jest poprawnie zdefiniowany i opisany w odniesieniu do istniejącej literatury. Autor formułuje nowy problem w uczeniu reprezentacji grafów. Następnie proponuje autorskie rozwiązanie GERF, które wykorzystuje zarówno strukturę grafu jak i podobieństwo etykiet. Zaproponowane rozwiązanie jest interesujące. Można zadać pytanie czy na podstawie podobieństw etykiet wierzchołków można zbudować strukturę grafu i uruchamiać dwie sieci grafowe na dwóch rodzajach etykiet?

Autor również proponuje zestaw kilku eksperymentów, które porównują zaproponowane rozwiązanie z istniejącymi metodami.

W pracy [P5] autor proponuje poprawkę do podejścia z pracy [P4].

Całe rozwiązanie jest bardzo naturalne i intuicyjne. Nasuwa się jednak kilka pytań: 1. Czy można zdefiniować korelację krzyżową, która bierze pod uwagę krawędzie w grafie? 2. Czy możliwe jest zastosowanie Graph Barlow Twins w przypadku augmentacji zmieniającej ilość wierzchołków. 3. Niektóre grafy mają naturalne położenia 3D wierzchołków, np. związki chemiczne mogą mieć taką informację. Czy zaprezentowana metoda mogłaby w jakiś naturalny sposób wykorzystać taką informację? 4. Czy powyższa metoda mogłaby być zaadaptowana do chmur punktów 3D lub ogólnie danych reprezentowanych za pomocą zbiorów?

W sekcji eksperymentalnej autorzy pokazują, że stworzona metoda dostaje podobne wyniki do wcześniejszych podejść, ale jest bardziej efektywna z numerycznego punktu widzenia. Sekcja eksperymentalna jest bardzo dobrze przygotowana.

W pracy [P2] autor rozważa problem tworzenia reprezentacji dla krawędzi w grafie. Sam problem jest dobrze zdefiniowany. Istnieje dużo modeli uczących reprezentację wierzchołków w grafie, natomiast problem reprezentacji krawędzi jest zbadany w dużo mniejszym zakresie. Autor proponuje spojrzeć na graf z punktu widzenia krawędzi. W takim kontekście naturalne jest rozważanie etykiet krawędzi w grafie oraz otoczeń dwóch wierzchołków połączonych daną krawędzią. Wykorzystując taką intuicję autor proponuje mechanizm agregacji informacji ze wspomnianych otoczeń opartej na błędzeniu losowym. Algorytm AttrE2vec najpierw wykonuje błędzenie losowe w dwóch sąsiedztwach danej krawędzi, aby zbudować reprezentacje, które są łączone z etykietą krawędzi za pomocą enkodera. W pracy autor przeanalizował kilka różnych strategii agregacji informacji. Wyniki eksperymentów pokazują, że wprowadzona metoda buduje reprezentację pozwalającą uzyskać konkurencyjne wyniki w stosunku do istniejących podejść.

Podobnie jak w przypadku poprzedniej pracy całe rozwiązanie jest bardzo naturalne i intuicyjne. Nasuwa się jednak kilka pytań: 1. Czy dałoby się wykorzystać architekturę Transformera do budowania reprezentacji w otoczeniu wierzchołków? 2. Czy można użyć wszystkie wierzchołki osiągalne w n krokach, zamiast błędzenia losowego?

W pracy [P3] autor rozważa problem budowy reprezentacji grafów o zmieniającej się strukturze. Podobnie jak w poprzednich pracach, autor zaczyna od motywacji do podjęcia danego problemu badawczego. Motywacja jest spójna i bardzo naturalna. Praca z grafami o zmiennej strukturze jest trudna i może prowadzić do ciekawych wniosków. Zapropionowana metoda FILDNE wykorzystuje reprezentację zbudowaną w poprzednich krokach, co

W praktyce autor zauważa, że można w naturalny sposób uprościć funkcję kosztu. Takie podejście pozwala trenować model szybciej i efektywniej. Ponadto autor pokazuje automatyczną metodę wyznaczania hiper parametrów modelu bez klasycznej walidacji krzyżowej. Pracę tą można traktować jako rozszerzenie metody z [P4]. W mojej opinii ta praca jest ważna, gdyż pozwala poprawić pierwszy algorytm.

Pod koniec recenzji chciałbym zaznaczyć, że prace wchodzące w skład cyklu dobrze świadczą o warsztacie naukowym mgr. inż. Piotra Bielaka. Ponadto pokazuje dogłębne zrozumienie tematyki uczenia reprezentacji w grafach i obiecująco rokując na dalszy rozwój naukowy.

Podsumowując, rozprawa spełnia wszelkie zwyczajowe i ustawowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim, w związku z czym wnioskuję o dopuszczenie doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Dr hab. Przemysław Spurek, prof. UJ

