

Warszawa, 25.07.2023

dr hab. inż. Tomasz Trzcíński, prof. PW i UJ
Instytut Informatyki Politechniki Warszawskiej
Katedra Uczenia Maszynowego Uniwersytetu Jagiellońskiego

**RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ DLA RADY DYSCYPLINY NAUKOWEJ
INFORMATYKA TECHNICZNA I TELEKOMUNIKACJA
POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ**

Tytuł rozprawy: Methods for selected problems in unsupervised graph representation learning

Autor rozprawy: Piotr Bielak

1 Analiza strony merytorycznej rozprawy

1.1 Obszar problemowy

Recenzowana rozprawa doktorska dotyczy zagadnień związanych z grafowymi sieciami neuronowymi. Główną osią rozprawy jest rozwiązanie problemów występujących podczas nienadzorowanego uczenia tych modeli, w szczególności koncentrując się na problematyce uczenia reprezentacji elementów grafów oraz całych grafów. W ostatnich latach zaproponowano wiele różnych metod uczenia się reprezentacji grafów, jednak według Autora wciąż istnieją pewne nierozwiązane problemy i luki badawcze. Większość proponowanych metod jest z natury transdukcyjna, optymalizując macierz zanurzeń o stałym rozmiarze, co nie pozwala na uzyskanie zanurzeń dla wcześniej niewidzianych przykładów. Dla dużych grafów spotykanych w rzeczywistym świecie, z milionami lub nawet miliardami węzłów, taka metoda wymaga ogromnych zasobów pamięci i jest niepraktyczna, ponieważ grafy często zmieniają się w czasie. Kolejnym dużym problemem jest to, że uczenie nienadzorowane wymaga etykietowanych danych, których uzyskanie jest kosztowne i czasochłonne. Ostatnim problemem zidentyfikowanym przez Autora jest identyfikowanie negatywnych próbek wykorzystywanych w uczeniu kontrastowym do uczenia reprezentacji grafów, które mają kluczowe znaczenie dla jakości zanurzeń i wydajności finalnej metody. W porównaniu do innych typów danych, wybór odpowiednich negatywnych próbek jest dla grafów szczególnie trudny.

W związku ze zidentyfikowanymi przez Doktoranta wyżej problemami badawczymi, stawia on hipotezę, iż *istnieją nienadzorowane metody uczenia się reprezentacji grafów, których zanurzenia mogą przewyższać te uzyskane za pomocą najnowocześniejszych nienadzorowanych podejść, gdy są oceniane na podstawie zadań podrzędnych (z ang. downstream tasks)*. Drobnym mankamentem tak postawionej tezy jest jej generalny wydźwięk. Co prawda hipoteza ta łączy wszystkie wyżej przedstawione tematy badawcze, jednak sprawia wrażenie jakby została stworzona na podstawie uzyskanych rezultatów, a nie w rezultacie naukowego procesu twórczego. Jest to jednak naturalna i częsta charakterystyka hipotez badawczych stawianych w badaniach empirycznych, jakimi często są prace badawcze w uczeniu maszynowym.

Autor stawia następujące cele rozprawy doktorskiej:

- weryfikacja, czy zastosowanie miary krzyżowej korelacji do zmodyfikowanych widoków atrybowanego grafu pozwala na samonadzorowane szkolenie sieci neuronowej dla grafów, tak aby ta sieć tworzyła lepsze wektory reprezentacji węzłów niż istniejące podejścia samonadzorowane, mierzone przez wydajność w zadaniach docelowych oraz złożoność czasowa treningu,
- opracowanie modelu głębokiej sieci neuronowej do obliczania wektorów reprezentacji krawędzi, który jest trenowany przy użyciu kombinacji kontrastowej funkcji kosztu z funkcją rekonstrukcji cech, tak aby wektory osadzeń tej metody były lepsze w zadaniach docelowych niż te uzyskane jako agregacje reprezentacji węzła źródłowego i docelowego,

- opracowanie metody uczenia się inkrementalnego dla wektorów reprezentacji węzłów w dynamicznych grafach, która wykorzystuje dowolny rodzaj statycznych osadzeń węzłów z kolejnych migawek grafu i wykazuje niższą złożoność czasu i pamięci niż współczesne metody uczenia się reprezentacji na dynamicznych grafach, przy jednoczesnym zapewnieniu konkurencyjnych wzrostów jakościowych miar, oraz
- stworzenie metody łączenia informacji o atrybutach węzłów ze wstępnie obliczonym zanurzeniem strukturalnym węzła, co skutkuje pojedynczym, niskowymiarowym zanurzeniem, które działa lepiej w zadaniach docelowych niż: zanurzenie strukturalne, atrybuty węzła lub inne metody uczenia się reprezentacji węzłów.

Te cele jasno i klarownie wskazują obszar zainteresowań badawczych Doktoranta, jak również główną oś publikacji, wchodzących w skład rozprawy. Mieszczą się ono w pełni w dziedzinie informatyki oraz w takich działach informatyki technicznej jak uczenie maszynowe czy sztuczna inteligencja.

Pierwszy rozdział rozprawy to wstęp, który opisuje motywację podjęcia pracy badawczej w określonym wyżej kierunku, krótko omawia aktualnie istniejące rozwiązania oraz ich ograniczenia. W rozdziale tym Autor opisuje również zidentyfikowane luki badawcze, które prowadzą autora w kierunku proponowanych celów badawczych.

W rozdziale drugim Autor przedstawia stawianą hipotezę badawczą wraz z wynikającymi z niej celami badawczymi, a następnie wymienia publikacje, wchodzące w skład cyklu powiązanych tematycznie artykułów naukowych tworzących rdzeń rozprawy. Dalej Autor przedstawia powiązanie pomiędzy zdefiniowanymi celami badawczymi a opublikowanymi pracami.

Przedstawione w rozdziale drugim publikacje opisują następujące proponowane przez Autora metody i podejścia do rozwiązania stawianego w rozprawie problemu:

1. [P1] Piotr Bielak, Tomasz Kajdanowicz, Nitesh V. Chawla, *Graph Barlow Twins: A self-supervised representation learning framework for graphs*, *Knowledge-Based Systems, Volume 256*, 2022: nowatorskie podejście do samonadzorowanego uczenia reprezentacji grafów o nazwie Graph Barlow Twins.
2. [P2] Piotr Bielak, Tomasz Kajdanowicz, Nitesh V. Chawla, *AttrE2vec: Unsupervised attributed edge representation learning*, *Information Sciences, Volume 592*, 2022: nowatorska metoda AttrE2vec do nienadzorowanego uczenia reprezentacji krawędzi w grafach z atrybutami.
3. [P3] Piotr Bielak, Kamil Tagowski, Maciej Falkiewicz, Tomasz Kajdanowicz, Nitesh V. Chawla, *FILDNE: A Framework for Incremental Learning of Dynamic Networks Embeddings*, *Knowledge-Based Systems, Volume 236*, 2022: nowe podejście do uczenia reprezentacji węzłów w dynamicznych grafach za pomocą metody uczenia przyrostowego o nazwie FILDNE.
4. [P4] Piotr Bielak, Daria Puchalska, Tomasz Kajdanowicz, *Retrofitting Structural Graph Embeddings with Node Attribute Information*. *ICCS'22*: nowatorska metoda, zwana GERF (Graph Embedding RetroFitting), do aktualizacji istniejących wektorów reprezentacji strukturalnych węzłów za pomocą informacji o atrybutach węzła.
5. [P5] Piotr Bielak, Jakub Binkowski, Albert Sawczyn, Katsiaryna Viarenich, Daria Puchalska, Tomasz Kajdanowicz, *A deeper look at Graph Embedding RetroFitting*, *Journal of Computational Science, Volume 68*, 2023: rozszerzenie metody prezentowanej w [P4] o automatyczny moduł estymacji hiperparametrów na bazie wielomianowego modelu Dirichleta.

W rozdziale trzecim Autor przedstawia wnioski końcowe, podsumowując wymienione w rozdziale drugim publikacje. W rozdziale tym brakuje wskazania głównych obszarów badawczych, na które publikacje te mają wpływ oraz możliwych dalszych prac nad proponowanymi metodami, jednak częściowo można znaleźć takie informacje w rozdziale kolejnym.

Czwarty i ostatni rozdział zawiera przedruki artykułów opublikowanych w renomowanych, wysokopunktowanych czasopismach i konferencjach. Co prawda konstrukcja rozprawy polegająca na połączeniu w jednym rozdziale wszystkich publikacji, nie zmieniając ich formatowania w stosunku do oryginalnie opublikowanych prac, utrudnia odpowiednie zredagowanie wstępu rozprawy, natomiast jest to zgodne z praktyką aktualnie obserwowaną przeze mnie w większości rozpraw doktorskich z dziedziny uczenia maszynowego. Wybrana forma prezentacji ułatwia czytelnikowi poruszanie się pomiędzy publikacjami, natomiast generuje problem redundancji pewnych części tekstu, takich jak wstępy czy analizy

literatury. Jednocześnie należy przyznać, że taki styl pisania rozpraw doktorskich jest powszechnie akceptowany i należy obecnie do kanonu rozpraw doktorskich w dziedzinach informatyki i robotyki.

Rozprawa zawiera reprezentatywną dla poruszanej problematyki bibliografię, która w większości przypadków właściwie ilustruje omawiane zagadnienia i dokumentuje wkład własny Autora.

1.2 Ocena wyników oraz stopnia ich oryginalności

Oryginalne wyniki pracy badawczej doktoranta, opisane w rozprawie, osiągnięte zostały zarówno w kontekście opracowania nowych metod reprezentacji grafów, jak i ich trenowania, w tym w scenariuszu inkrementalnym.

Zaprezentowane w rozprawie rozwiązania postawionego problemu badawczego bazują na nowych pomysłach lub zawierają wyraźne modyfikacje w stosunku do metod przedstawionych w literaturze. Na szczególną uwagę zasługuje konsekwencja w dążeniu do opracowania rozwiązania, które uzyskuje zarówno dobre wyniki jakościowo, jak i wydajnościowe.

Wśród wielu przedstawionych w rozprawie rozwiązań, dodatków technicznych i implementacyjnych oraz usprawnień istniejących metod należy wyróżnić:

- użycie w proponowanej metodzie Graph Barlow Twins macierzy korelacji krzyżowej dwóch perturbowanych widoków grafu w celu budowy optymalnej reprezentacji,
- zastosowanie kombinacji funkcji kontrastywnej i funkcji rekonstrukcji w metodzie AttrE2vec,
- zastosowanie mechanizmu inferencji Bayesowskiej do wyszukania wag zastosowanych przy łączeniu reprezentacji grafów z różnych momentów czasowych,
- wykorzystanie SGD do nauki wektora zanurzeń łączącego informację o strukturze grafów oraz atrybutach węzłów w procesie retrofittingu w metodzie GERF.

Należy podkreślić, że pomimo tego, iż część publikacji wchodzących w skład przedstawionej rozprawy ma kilku autorów, wkład Doktoranta jest jasno opisany i stanowi dominującą część prac, o czym świadczy również jego pierwsza pozycja na liście autorów.

Zauważone nieliczne niedoskonałości dysertacji dotyczą raczej drobnych kwestii, takich jak brak jasno nakreślonych dalszych prac związanych z rozwijającym kierunkiem badań, w tym m.in. ograniczeń proponowanych metod, jak również sporadycznie nadmiernie sformalizowanego języka (np. *In order to validate the research hypothesis, it was substantiated into (...)*).

1.3 Zagadnienia dyskusyjne

Poniższe uwagi dotyczą ogólniejszych kwestii poruszonych w rozprawie i nie odnoszą się bezpośrednio do treści pracy. Niemniej jednak liczę na analizę tych zagadnień i odniesienie się do nich przez Doktoranta.

- *Relacja pomiędzy uczeniem inkrementalnym (przyrostowym) grafów, oraz proponowanymi metodami reprezentacji takich ewoluujących struktur a uczeniem ciągłym (Research Objective 3:* ciekawi mnie czy Doktorant dostrzega jakieś analogie pomiędzy rozwiązywanym w rozprawie problemem rosnących grafów, a dziedziną uczenia ciągłego, która zajmuje się modelami trenowanymi przy wykorzystaniu strumienia danych, a nie zamkniętego zbioru danych. W szczególności podejścia proponowane w uczeniu ciągłym, takie jak Progressive Neural Networks [Rusu et. al, arxiv: 1606.04671], przypominają rozrastający się graf. Czy Doktorant dostrzega potencjał na zastosowanie proponowanych przez siebie podejść w uczeniu ciągłym?
- We wprowadzeniu Autor pisze iż *self-supervised learning still resides within the area of unsupervised learning (i.e., SSL methods are a subset of unsupervised methods)*. Autor motywuje to stwierdzenie faktem, iż w samonadzorowanym uczeniu nie występuje proces adnotacji. Czy jednak jest to warunek wystarczający, żeby uznać samonadzorowane uczenie jako w pełni nienadzorowane? Czy fakt, że występuje tam "automatycznie pozyskiwana" informacja o tym, które pary czy trójki danych są do siebie podobne lub nie, nie świadczy o tym, że jednak pewnego rodzaju nadzór jest konieczny, żeby trening był skuteczny?

2 Analiza strony formalnej rozprawy

2.1 Ocena układu pracy i redakcji manuskryptu

Recenzowana rozprawa doktorska napisana jest w języku angielskim i obejmuje w kolejności: podziękowania, streszczenie w języku angielskim, streszczenie w języku polskim, trzy rozdziały zasadnicze (w tym "Wstęp" oraz "Wnioski"), przedruki artykułów, a także bibliografię. Praca liczy 127 stron.

Bibliografia liczy 116 uporządkowanych alfabetycznie pozycji. Spośród znajdujących się w bibliografii prac większość ukazała się w przeciągu ostatnich 10 lat co świadczy o dobrym umiejscowieniu tematyki rozprawy w aktualnym w skali światowej nurcie badań. Bibliografia rozprawy, po włączeniu w nią utworów cytowanych w ramach załączonych artykułów, nie budzi zastrzeżeń od strony merytorycznej, a jej redakcja jest staranna i nie dostrzegłem w niej żadnych błędów.

Układ rozprawy jest prawidłowy, jest ona także starannie opracowana pod względem edytorskim, w szczególności rozdziały pierwszy, drugi i trzeci są odpowiednio dopracowane i nie widać w nich żadnych błędów w sztuce. Użyta terminologia jest właściwa dla obszaru problemowego rozprawy, zarówno w zakresie robotyki, informatyki jak i uczenia maszynowego.

2.2 Uwagi szczególne

Tekst rozprawy jest w przeważającej większości poprawny pod względem językowym, stylistycznym i merytorycznym. Podczas lektury zauważyłem nieliczne błędy redakcyjne i pomyłki wymagające korekty, lub fragmenty, które rekomendowałbym zmienić, np:

- Streszczenie, w. 23: Większość istniejących podejść uczenia - powinno być: Większość istniejących podejść do uczenia.
- str. 13, w. 26: Sometimes the performance was even better than for the supervised case - potrzebna referencja/cytat na wsparcie tej tezy.
- str. 14, ostatni wiersz: The thesis addressed this question by means of the Research objective 1. - niejasne w tym miejscu dla czytelnika jest umiejscowienie celów badawczych (ROs). Warto dodać tutaj jakieś odniesienie.
- str. 16, w. 21: The [101]paper considers - brakuje spacji pomiędzy cytowaniem a słowem 'paper'.
- str. 16, ostatni paragraf: This thesis addressed this question by means of the Research objective 2. - zdanie powinno być w czasie teraźniejszym, tj. "addresses", bo praca istnieje i wciąż odnosi się do tego celu badawczego.
- str. 18, drugi paragraf: brakuje tutaj przykłady aplikacji przemysłowej wspomnianej w tekście. Przykład znacząco urealniłby stawiany problem badawczy.

3 Konkluzja

Uważam, że recenzowana dysertacja Pana mgr. inż. Piotra Bielaka **spełnia z nadmiarem wymagania** stawiane rozprawom doktorskim przez *Ustawę z 20 lipca 2018 roku (Dz. U. 2018 poz. 1668) Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*, wymogi, ponieważ zawiera oryginalne koncepcje i rozwiązania istotnych problemów w **dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja**. Rezultaty nawiązują do aktualnego stanu wiedzy i mają znaczenie praktyczne, czego potwierdzeniem są liczne pierwszo-autorskie publikacje w renomowanych czasopismach (m.in. Knowledge-Based Systems, IF: 8.139, 200 pkt. MEiN, czy Information Sciences, IF: 8.233, 200 pkt. MEiN) oraz na istotnych konferencjach międzynarodowych z dziedziny informatyki (ICCS, CORE A, 140 pkt. MEiN). Uzyskane wyniki eksperymentalne w wystarczającym stopniu dokumentują poprawność proponowanych koncepcji oraz skuteczność działania ich implementacji. Uwagi krytyczne sformułowane w treści recenzji, po części mające charakter dyskusyjny, nie wpływają istotnie na moją bezapelacyjnie pozytywną ocenę oryginalności i poziomu merytorycznego przedstawionej rozprawy.

Sformułowanie problemu badawczego, zaproponowane oryginalne metody jego rozwiązania, sposób przeprowadzenia badań oraz zademonstrowane umiejętności formułowania wniosków świadczą o przygotowaniu Doktoranta do pracy naukowej. Na tej podstawie **wnioskuję o dopuszczenie mgr. inż.**

Piotra Bielaka do dalszych kroków procedury uzyskania stopnia doktora nauk technicznych. Co więcej, ze względu na wysoką jakość przedstawionych publikacji oraz renomowane miejsca, w których się one ukazały, **wniosuję o wyróżnienie pracy doktorskiej.**



Tomasz Trzcíński