

令和7年4月14日

報道機関各位

熊本大学

革新的なディープラーニングモデルを開発
ENDNet：サブグラフマッチングのための余分ノード判定ネットワーク

(ポイント)

- サブグラフマッチングの精度を大幅に向上させる新たなディープラーニングモデルを開発
- データグラフ内の「余分ノード」を特定・中和する独自技術を実現
- オープンデータセットにおいて最大99.1%の高精度を達成

(概要説明)

熊本大学大学院自然科学教育部 城谷昌季 博士前期課程学生、熊本大学大学院先端科学研究部 尼崎太樹 教授、木山真人 同助教らの研究グループは、グラフデータから特定のパターンを高精度に検出する革新的な機械学習のディープラーニングモデル「ENDNet」を開発しました。

(取り組みの内容)

本研究では、大きなデータグラフ内から特定のクエリグラフ（パターン）を見つけ出す「サブグラフマッチング」の課題に取り組み、余分なノード（節点）を検出・中和する新たな手法を提案しています。従来のグラフニューラルネットワーク（GNN）では、データグラフ内の余分なノードや接続がマッチング精度を低下させる問題がありましたが、開発した「ENDNet (Extra-NodeDecision Network)」は、これらの余分ノードを特定し、その影響を除去することで高精度なマッチングを実現します。本研究成果は、「IEEE ACCESS」に2025年2月18日に掲載されました。

(背景)

サブグラフマッチングは、グラフ理論における基本的な問題であり、創薬、情報検索、コンピュータビジョン、自然言語処理など多様な分野に応用されています。しかし、計算複雑性の高さから、効率的かつ高精度なアルゴリズムの開発が課題となっていました。従来の学習ベースのアプローチでは、データグラフに含まれる余分なノードや接続がマッチング精度を低下させるという問題がありました。特に、グラフニューラルネットワーク（GNN）は情報集約プロセスにおいて、クエリグラフに対応しない余分なノードの特徴も伝播させてしまうため、正確なマッチングが困難でした。

(成果)

ENDNet は次の 3 つの革新的なメカニズムを組み合わせています：

1. 余分ノード判定機構：非正規化マッチング行列を用いて余分ノードを特定し、その特徴値をゼロに設定して影響を排除
2. 単方向伝播機構：クエリグラフとデータグラフ間で対応するノードの特徴を効果的に近づける
3. 共有グラフ畳み込みネットワーク：シグモイド関数を活用した新たな畳み込み処理により特徴抽出を最適化

4 つのオープンデータセット (COX2、PROTEINS_full、DD、SYNTHETIC) での実験により、ENDNet は既存の最先端モデルである AEDNet を上回る性能を示しました。特に COX2 データセットでは、精度を 91.6%から 99.1%へと大幅に向上させました。また、アブレーション研究により、提案したすべてのメカニズムの有効性が確認されました。

(展開)

本研究で開発された ENDNet は、生体ネットワーク解析、分子構造の類似性検索、ソーシャルネットワーク分析など、様々な実用的なグラフマッチングタスクに応用できます。特に化学分子のような比較的小規模の実世界データに対して効果的であり、将来的には大規模グラフへの適用も期待されます。

研究成果は GitHub で公開されており、他の研究者や開発者が活用できるようになっています。

[GitHub - ms1211/ENDNet](#)

(論文タイトル)

ENDNet: Extra-Node Decision Network for Subgraph Matching

(論文著者)

城谷昌季、尼崎太樹、木山真人

(掲載雑誌)

IEEE ACCESS 2025 年 2 月掲載

[ENDNet: Extra-Node Decision Network for Subgraph Matching | IEEE Journals & Magazine | IEEE Xplore](#)

【お問い合わせ先】

熊本大学大学院先端科学研究部

担当：助教 木山 真人

電話：096-342-3847

e-mail：masato@cs.kumamoto-u.ac.jp