

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 12 日現在

機関番号：34419

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26330291

研究課題名(和文) グラフカーネルを用いた分布推定アルゴリズムの展開

研究課題名(英文) Extension of Estimation of Distribution Algorithms with graph kernels

研究代表者

半田 久志 (HANDA, Hisashi)

近畿大学・理工学部・准教授

研究者番号：60304333

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、新たな分布推定アルゴリズムの拡張として、グラフ構造を有する個体表現を用いた分布推定アルゴリズムの構築を試みる。提案手法は、グラフカーネルを用い、特徴空間上で情報処理を行うことによりこれらの問題を解決する。

具体的な成果としては、アルゴリズムの実装を軽くし、性能評価を厳格にい、サンプリング方法について検討を重ねた。そして、型付きノードへ拡張し、適用クラスを、無向エッジ・単一ノードで構成されるグラフから、ノードに種類がありラベルが振られているようなグラフへ拡張を行った。さらに、応用問題としてOrder/Degree問題に適用し、他の手法との比較を通して提案手法の有用性を評価する。

研究成果の概要(英文)：This research project extends the estimation of distribution algorithms to cope with graph individuals. The proposed method employ graph kernels to estimate the distribution of graph individuals. That is, the proposed method search for better solutions in the feature space. The results can be summarized as follows: The implementations of algorithms is re-designed such that the sampling method is examined. Moreover, the proposed method extended to cope with nodes with types. Moreover, the proposed method is applied to the Order/Degree problems, which is examined in graph study groups. The experimental results showed that the proposed method is competent with other conventional method designed for solving the Order/Degree problems, meanwhile, the proposed method is general-purpose algorithms.

研究分野：計算知能

キーワード：ソフトコンピューティング グラフカーネル 分布推定アルゴリズム 進化計算

1. 研究開始当初の背景

分布推定アルゴリズムは、交叉や突然変異といった遺伝操作の代わりに確率モデルを用いた進化計算であり、15年ほど前に提案された新しいアルゴリズムである。

- 分布推定アルゴリズムでは、
- 1) 個体群から良好個体を選択
  - 2) 良好個体の分布を確率モデルとして推
  - 3) この確率モデルから新たな個体群をサンプルする。

分布推定アルゴリズムは確率モデルを使用することにより飛躍的な性能改善が見られており、近年、大いに注目を浴びている。

グラフを対象とした、既存の進化アプローチの問題点として、遺伝子型から表現型(グラフ形状)への写像が凸凹しており、この結果、適応度景観も同時に凸凹していることが挙げられる。つまり、鏡像解の場合、遺伝子型異なっても同じ表現型となる。また、遺伝子型が少し異なるだけで、大きく表現型が異なることがある。このような性質が探索効率を大きく下げていることになる。

2. 研究の目的

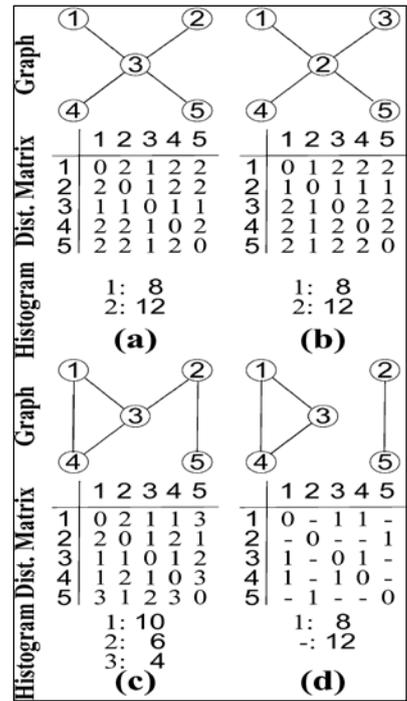
新たな分布推定アルゴリズムの拡張として、グラフ構造を有する個体表現を用いた分布推定アルゴリズムの構築を試みる。本研究課題では、特徴空間上で情報処理を行うことによりこれらの問題を解決する、グラフカーネルを分布推定アルゴリズムに導入した新しいグラフマイニングアルゴリズムを構築する。提案手法ではカーネル密度推定により個体分布を推定し、新たな個体を推定された分布からサンプリングする。

最小パス距離グラフカーネルは右上の図のように距離の頻度に基づいてグラフの近しさを近似的に判定する。図中の表はノード間の距離行列を表しており、その下のHistogramと書いているものが距離の頻度となる。(a)と(b)は鏡像解であるが、ヒストグラムは同一であるので、これらのグラフが一致していることがわかる。一方、(c)と(d)はエッジが一本違うだけで個体表現は非常に近いが、全く異なるヒストグラムとなっており、これらのグラフがかけ離れていた表現型をしていることがわかる。

本研究課題の提案手法であるグラフカーネルを用いた分布推定アルゴリズムと従来型分布推定アルゴリズムからの変更点は、

- 1) 個体をグラフで表現
  - 2) カーネル密度推定によるグラフ(個体)の分布の推定
  - 3) 子個体(グラフ)のサンプリング
- である。

本研究課題では、このグラフカーネルを用いた分布推定アルゴリズムが簡単なエッジの位相に限定した部分グラフ同型問題にしか適用されていなかったため、これらの制約の解消を含めた実用的なアルゴリズムの構成、ならびに、その応用問題への適用が本研

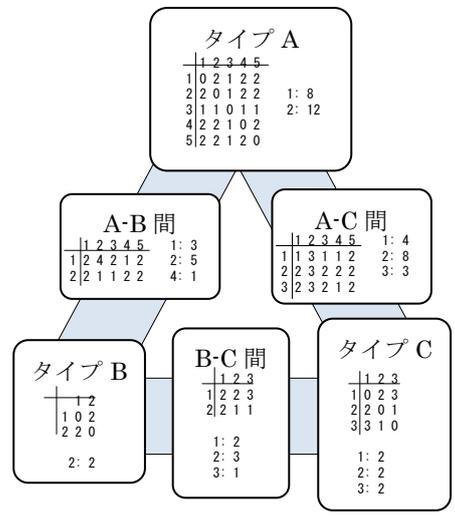


究課題の主題である。

3. 研究の方法

アルゴリズムの実装を軽くし、性能評価を厳格に行う。特にカーネル関数・サンプリング方法について検討を重ねる。

化学式の組成データベースから知識を抽出する場合、また、合成生物学で新たな発現パターンを持つ遺伝ネットワークを構成する場合、ノードの種類が複数あることが考えられる。このような問題に適用するために提案手法が同時に取り扱えるノードの種類を複数個に拡張する。ノードの種類を複数にした時の個々の種を型とし、これらを型付きノードとすることにする。ノードが型を持つことによる拡張は、ノード間の距離行列とヒストグラムを下の図にあるように、ノードのタイプごとに分けることにより行う型付きノードへ拡張し、適用クラスを、無向エッジ・単一ノードで構成されるグラフから、ノードに種類がありラベルが振られているようなグラフへ拡張を行う。



応用問題として Order/Degree 問題に適用し、他の手法との比較を通して提案手法の有用性を評価する。

#### 4. 研究成果

当初の実装では、ギブスサンプリングに偏りが見られるような実験結果であったが、分布が正しくできていることを検証した。初期解生成に問題があることを突き止めた。また、グラフ同型問題への適用を試みた。これらの結果を進化計算学会論文誌で発表した。

また、局所探索法との併用を示す Memetic Algorithms を提案手法を用いて構成し、その有用性を示した。ここでの局所探索は、探索の後半時に尤度を必ず最大化させるものである。つまり、局所探索の時に、通常必要となる適応度評価を必要としない。これは適応度評価に時間がかかる expensive optimization problems に有用であると考えられる。例えば、本研究に関して言えば、グラフマイニングが相当すると考えられる。IES2014 にて発表した。この手法はまだ詰める必要があり、今後、論文誌への掲載が期待される。

2014 年にインドで開催された国際会議 IEEE ICCICN で招待講演を行った。これは、旅費・滞在費等先方負担であった。この招待講演では、ネットワークの構成に提案手法が用いることができることを開設し、非常に良い反応を得ることができた。

型付ノードへのアルゴリズムの拡張を行った。この拡張は当初の計画通りタイプ毎、またはタイプ間にヒストグラムを構成しつつ確率モデルを構成するアプローチを取った。型付ノードは、型がないグラフよりもより情報をもたらされているものであり、一般的解きやすいことが判明した。この結果は IES2016 にて発表した。まだ論文として発表されておらず、今後論文誌への掲載を目指していく。

応用問題として Order/Degree 問題への適用に着手した。この問題はグラフ理論の分野でベンチマーク問題として competition が開催されている問題であり、この問題を解くことにより、ネットワークの設計に役立つことが知られている。提案手法を適用したところ、この手法に特化したメタヒューリスティクスには敵わないが、3,4 番目に位置することが多く、汎用的な手法としては良好な結果を示すことができている。

本節に述べた結果に加えて、世代交代モデルも含めた解説を、日本知能情報ファジィ学会誌に解説論文としてまとめた。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

- ① 半田久志, 前澤健太, 長谷川凌一: グラ

フカーネルを用いた進化計算, 知能と情報 (日本知能情報ファジィ学会誌), Vol. 29, No. 1, pp. 14-19, 2017, 査読無

- ② 前澤健太, 半田久志: グラフカーネルを用いた分布推定アルゴリズム, 進化計算学会論文誌, Vol. 7, No. 3, pp. 56-64, 2016 査読有
- ③ 半田久志: Mario AI における Deep Boltzmann Machine を併用した進化学習, 電気学会論文誌 C (電子・情報・システム部門誌), Vol. 134, pp. 1738-1745, 2014, 査読有

[学会発表] (計 7 件)

- ① H. Handa, K. Maezawa: Estimation of Distribution Algorithms with Graph Kernels for Graphs with Node Types, Proc. The 20th Asia-Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems, 2016. 11. 15, キャンベラ (オーストラリア)
- ② 長谷川凌一, 前澤健太, 半田久志: 分布推定アルゴリズムの Order/Degree 問題への適用, 第 26 回インテリジェントシステム・シンポジウム, 2016. 10. 28, 大阪大学 (大阪)
- ③ 前澤健太, 長谷川凌一, 半田久志: EDA-GK のタイプ付きノードへの拡張と性能評価, 第 26 回インテリジェントシステム・シンポジウム, 2016, 2016. 10. 29, 大阪大学 (大阪)
- ④ H. Handa: Use of RBM for Identifying Linkage Structure of Genetic Algorithms, Proc. Eighth International Conference on Future Computational Technologies and Applications, CD-ROM, 2016. 3. 22, ローマ (イタリア)
- ⑤ H. Handa: Efficient Evolution of the Topology of Networks, by the Estimation of Distribution Algorithms with Graph Kernels, IEEE International Conference on Computational Intelligence and Communication Networks, 2014. 11. 14, コルカタ (インド, 招待講演)
- ⑥ K. Maezawa, H. Handa: Memetic Algorithms of Graph Based Estimation of Distribution Algorithms, Proc. 18th Asia Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems, Volume 2, pp. 647-656, 2014, 11. 12, シンガポール (シンガポール)

- ⑦ H. Handa: Deep Boltzmann Machine for Evolutionary Agents of Mario AI, Proc. of 2014 IEEE Congress on Evolutionary Computation, pp. 36-41, 2014. 7. 10, 北京 (中国)

[図書] (計 2 件)

- ① H. Handa, H. Ishibuchi, Y. -S. Ong, K. -C. Tan (Eds.): Proc. 18th Asia Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems, Volume 1, 709 pages, Springer, 2015, 査読無
- ② H. Handa, H. Ishibuchi, Y. -S. Ong, K. -C. Tan (Eds.): Proc. 18th Asia Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems, Volume 2, 685 pages, Springer, 2015, 査読無

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

半田 久志 (HANDA, Hisashi)  
近畿大学・理工学部・准教授  
研究者番号：6 0 3 0 4 3 3 3

### (2) 研究分担者