

令和 2 年 5 月 18 日現在

機関番号：34419

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K00353

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拡張と高性能化

研究課題名(英文) Extension and Performance Improvement 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・教授

研究者番号：60304333

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：グラフを個体としたグラフカーネルを用いた分布推定アルゴリズムEDA-GKの拡張を行う。従来、グラフを個体とした進化アルゴリズムでは、遺伝子型から表現型への写像がでこぼこしてしまうために、良い性能を出すことが難しかった。本研究課題では、アルゴリズムの適用範囲を広げることを目標として研究に取り組む。混合的なカーネルを構成し、スケールフリー性やスモールワールド性などを持つグラフ同定問題に適用した。並行してOrder/Degree問題や固有値最大化問題などグラフ理論の分野で取り扱われている問題へ適用した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

グラフの最適化は、社会ネットワークの分析や、新しい化合物の作成などに応用ができる。これまでにグラフカーネルを用いたアプローチでは分類問題などに適用されていたが、これを進化計算の枠組みにのせることにより、新しいものを創造・設計する問題へと拡張することができます。研究の最終年度では、理学科の先生と共同で、有機薄膜電池の化学式を案出する問題に取り組んでおり、本研究課題の提案手法を用いることでより高性能な電池が実現できることが期待されます。

研究成果の概要(英文)：The distribution of estimation algorithm EDA-GK using graph kernels is extended in this study. Conventionally, it has been difficult to achieve good performance in evolutionary algorithms using graphs as individuals because the mapping from genotype to phenotype is rugged. In this study, we aim to extend the application area of the algorithm. A mixed kernel is constructed and applied to graph identification problems with scale-free and small-world properties. Simultaneously, it is applied to the order/degree problem and the eigenvalue maximization problem, which are coped with in the field of graph theory.

研究分野：ソフトコンピューティング

キーワード：graph kernel 進化計算 分布推定アルゴリズム

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

これまでに、グラフカーネルを用いた分布推定アルゴリズム EDA-GK を提案した。既存の進化アプローチでは、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。この性質は、個体を隣接リストで表しても変わらない。従来の進化計算では遺伝子型でどのような操作を多なっても凸凹さが災いして効果的な探索が見込めなかった。

一方、グラフカーネルを用いた情報処理（最小パス距離カーネル）の場合、最小パス距離をビンとしたヒストグラムを構成する。遺伝子型の表現が全く異なるが表現型が鏡像解になる場合、このようなグラフは同一のヒストグラムを示し、最小パス距離カーネルでは、これらは同一であると判定される。遺伝子型が極めて類似しているが表現型が異なる場合、完全に異なるヒストグラムとなり、最小パス距離カーネルでは、異なるグラフであるとされる。EDA-GK では、グラフに対して特徴空間を構成し、その特徴空間を用いた探索を実現している。

2. 研究の目的

(1) グラフカーネルの改良

従来 EDA-GK では個体分布の推定のため、後述する Shortest-path Graph Kernel を利用してきた。近年は新たなグラフカーネルが数多く提案されているものの、EDA-GK への導入は検討されてこなかった。そこで、比較的新しいグラフカーネルである Weisfeiler-Lehman Kernel と、新たに提案する Mixture Kernel を EDA-GK に導入し、従来のグラフカーネルを利用する場合との性能差を検証する。

(2) グラフ理論の分野で用いられる問題への適用

Order/Degree 問題 や固有値最大化問題に適用し、提案手法の有用性を検証する。Order/Degree 問題とは、与えられたノード数 n と次数 d を満たすグラフのうち、直径 k が最小であるグラフを探す最適化問題である。固有値最大化問題は、グラフの隣接行列の最大固有値を最大化することで伝搬拡散に優れたネットワーク構造を導出する問題である。

3. 研究の方法

(1) グラフカーネルの改良

同型グラフ探索問題を対象問題として、Shortest-path Graph Kernel, Weisfeiler-Lehman Kernel ならびに Mixture Kernel を用いた EDA-GK を用意し、性能の比較を行う。Mixture Kernel とは、Shortest-path Graph Kernel と Weisfeiler-Lehman Kernel を混合したものであり、パラメータ α によってどちらを重点的に用いるかを定める。同型グラフとはターゲットとなるグラフに近づく問題である。ターゲットグラフとして、スモールワールド性を持つグラフ、スケールフリー性を持つグラフ、ならびに、クラスター性を持つグラフを用いた。

(2) グラフ理論の分野で用いられる問題への適用

Order/Degree 問題では、ノード数、次数が問題のパラメータとなる。局所探索法との比較を行う。一方、固有値最大化問題では、ノード数が問題のパラメータとなる。ここでは 80 ノードの問題を対象とする。

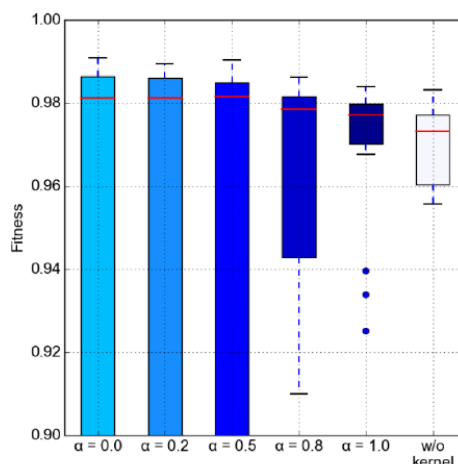
4. 研究成果

(1) グラフカーネルの改良

右側のグラフは、ターゲットグラフをスモールワールド性を持つグラフであり、次ページの右側は、スケールフリー性を持つグラフ（上）、ならびに、クラスター性を持つグラフ（下）にした時の実験結果である。 $\alpha=1$ が Shortest-path Graph Kernel, $\alpha=0$ が Weisfeiler-Lehman Kernel を用いた提案手法。w/o はグラフカーネルを用いない場合である。これら以外の $\alpha=0.2$ 等のグラフが Mixture Kernel を用いた EDA-GK の実験結果である。これらのグラフは最大化問題でありその上限値は 1.0 となっている。

スモールワールド性を持つグラフをターゲットグラフにした場合、カーネルを用いない場合や、Shortest-path Graph Kernel を単体で用いる場合 ($\alpha=1$) に比べて、Weisfeiler-Lehman Kernel を併用する場合の方が適応度の高い解を探索できていることがわかる。一方で、Weisfeiler-Lehman Kernel を併用する場合は局所解に陥ってしまう試行も多く、およそ半数に極端に適応度の低い解が含まれていることが読み取れる。

次ページ右上のグラフのターゲットグラフをスケールフリー性を持つグラフにした場合、 $\alpha=0$ の場合、すなわち Weisfeiler-Lehman Kernel を単体で用いる場合に、最も適応度の高い解を探索できていることが読み取れる。ターゲット、最良解ともに



一部のノードのみが大きな次数を持ち、大多数のノードが小さな次数を持つという性質を満たしていた。これより、EDA-GK はスケールフリー性を持つグラフも導出可能であるということがわかった。

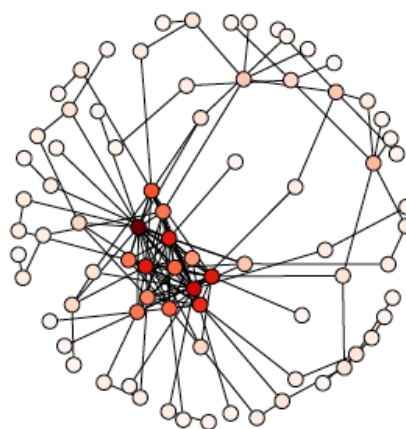
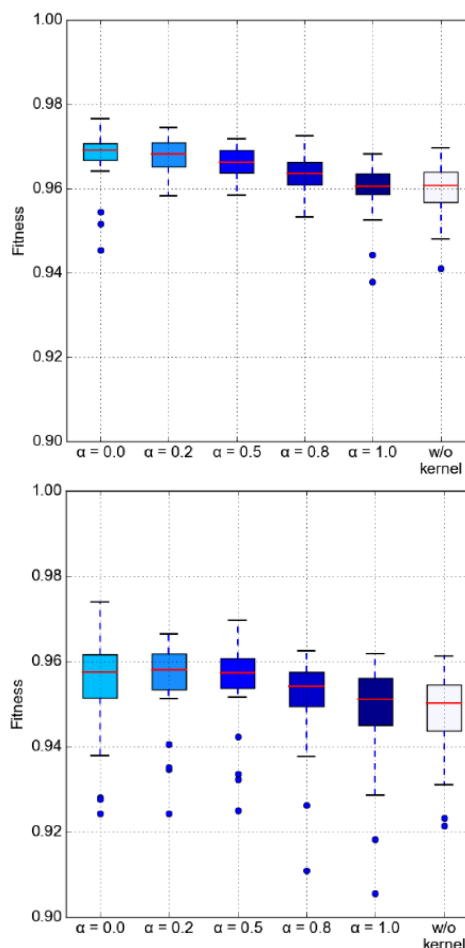
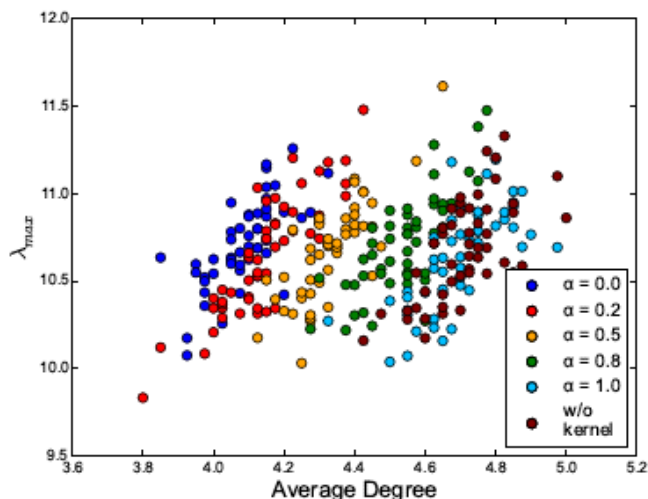
クラスター性を持つグラフは、ドロゴフツェフとメンデスによって提案されたアルゴリズムを利用しており、これによって得られるグラフはスモールワールド性、スケールフリー性、クラスター性の全てを満たしている。クラスター性を持つグラフをターゲットグラフにした場合、カーネル未使用の場合や Shortest-path Graph Kernel を単体で用いる場合よりも、Weisfeiler-Lehman Kernel を併用する場合、特に $\alpha = 0.2$ の場合に、平均適応度が高かった。

(2) グラフ理論の分野で用いられる問題への適用

下の表は Order/Degree 問題の適用結果であり、値が小さい方が良い。ベンチマークで競われている3つ問題に適用した。50 試行のの最良適応度を表している。この問題は最小化問題である。比較の局所探索法がリスタートを行うものである。近傍のサイズが小さい時は局所探索法との差がないが、次数が8の時は、提案手法の方が良い結果を示した。これらの問題の下限值が知られており、それぞれ、43.06, 21.78, 64.20 である。ノード数が大きい時や、次数が大きい時に乖離が見られる。そのような問題で EDA-GK の有用性が示されている。

問題の種類 (ノード数, 次数)	EDA-GK	局所探索法
(64, 3)	43.07	43.07
(64, 8)	31.00	32.09
(96, 3)	64.31	64.32

固有値最大化問題を左下の図に示す。各実験の最終世代において発見された最良解の分布を散布図で示しており、横軸は解の平均次数、縦軸は隣接行列の最大固有値を示している。この散布図では図中左上（最大固有値は大きい方が良く、平均次数は小さい方が良い）にプロットされている点が良好な点であると言える。青色でプロットされている $\alpha = 0.0$ の Weisfeiler-Lehman Kernel を単体で用いる場合に良好な解を探索できていることが読み取れる。最良と言える解の一つは最大固有値が 10.63、平均次数が 3.85 であった。一方、既存手法のバラバシ・アルバートモデルやドロゴフツェフ・メンデスのアルゴリズムでは、それぞれ、最大固有値が 6.71 と 7.05 で、平均次数は 3.93 と 3.92 であった。EDA-GK によって良好な解が得られていると言える。この時のグラフを右下に示す。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hasegawa Ryoichi, Handa Hisashi	4. 巻 22
2. 論文標題 Solving Order/Degree Problems by Using EDA-GK with a Novel Sampling Method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics	6. 最初と最後の頁 236 ~ 241
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.20965/jaciii.2018.p0236	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kitahashi Misaki, Handa Hisashi	4. 巻 22
2. 論文標題 Estimating Classroom Situations by Using CNN with Environmental Sound Spectrograms	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics	6. 最初と最後の頁 242 ~ 248
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.20965/jaciii.2018.p0242	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 長谷川稜一, 半田久志
2. 発表標題 EDA-GKにおけるカーネル関数の検討
3. 学会等名 電気学会C部門大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hasegawa Ryoischi, Handa Hisashi
2. 発表標題 Investigation of kernel functions in EDA-GK
3. 学会等名 the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Misaki Kitahashi and Hisashi Handa
2. 発表標題 EMO Approach for The L1-Normalization of Neural Networks
3. 学会等名 2018 JPNSEC International Workshop on Evolutionary Computation (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hisashi Handa and Ryoichi Hasegawa
2. 発表標題 Solving Order/Degree Problems by Using EDA-GK
3. 学会等名 GECCO 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考