

局所エネルギー最小化法における近傍半径パラメータの効果

Effectiveness of Neighborhood Radius in Local Energy Minimization

辻本 陽平†

Yohei TSUJIMOTO

鈴木 育男‡

Ikuo SUZUKI

山本 雅人†

Masahito YAMAMOTO

古川 正志†

Masashi FURUKAWA

1 はじめに

様々なデータをノードとエッジ(リンク)の単純な組み合わせで表現するネットワークは、多くの分野において幅広く共通に用いられている。WWW, 電力網, 神経網, 通信網, 知人ネットワーク, 生態系などの関係はネットワークで容易に表現できる。これらネットワークを構成する要素を見ると、単純なルールしかないにもかかわらず、大域的に見ると複雑な振る舞いをしていることから、複雑ネットワークと呼ばれる分野が注目を集めている。従来の研究より、複雑ネットワークにはスモールワールド性, スケールフリー性, クラスタ性などの興味深い性質を有することが研究・調査されている。

近年, こうしたネットワークはますます大規模化しており, ネットワークがどのような構造的特徴を有しているのかを理解するために, 特徴量を計算する方法がよく用いられている。こうした特徴量としては, 次数分布, クラスタリング係数, 平均パス長, 媒介中心性, などがあり, 従来の研究は, これらを基により, スモールワールド性, スケールフリー性, クラスタ性などの性質を導き出している。しかし, 各特徴量を数値化するだけでは, ネットワークの性質の全てを理解することは難しい。一方, ネットワークの可視化は, 人間の高い認識能力を利用したネットワークを直感的に理解する方法として, 新たな知的創出の手助けになることが期待されている。

本研究では力学的手法を基にした, 高速にレイアウトするネットワークの可視化手法である LEM アルゴリズムにおいてエネルギーが下がりきらないことを防ぐためのレイアウトアルゴリズムを開発する。この目的を達成するため, LEM の近傍半径パラメータに注目し, このパラメータの制御により局所最適化と大域的最適化を切り替える方法を提案しその有効性を検証する。

2 グラフレイアウト問題

ネットワークの可視化はグラフレイアウト問題として扱うことができるが, その定量的な評価はいまいであり, 明確な解が存在しない。したがって, 可視化の目的やネットワークの構造に合わせて評価関数を設定し, その最適化問題を解き, 準最適なグラフレイアウトを求めるのが一般的である。

多くの提案されたレイアウトアルゴリズムの中では, 無向グラフのレイアウトを目的とした力学的手法がよく知られている。これは, P.Eades[1] によって提案されたばねモデルが基礎としている。ばねモデルは, ノードをスチールリング, エッジをばねと見なし, そこに働く引力と斥力を力学系の平衡状態へ導くようにレイアウトを行うが, 計算コストが高く, ネットワークのノード集合を N とすると $O(|N|^2)$ の計算量を必要とする。

現在では, ばねモデルを改良した KK 法 [2], FR 法 [3] が, レイアウトを行う際, 幅広く用いられている。これらの力学的手法は複雑な構造を持つネットワークデータをレイアウトできるが, 自己組織化マップを用いた手法などの他の手法に比べレイアウト時間がかかる問題点がある。その理由は, 力学計算における引力と斥力の計算コストが高いためである。

2.1 LEM (局所エネルギー最小化法)

LEM は, 茂尾ら [4] が提案した力学的手法である。LEM は, 計算コストを抑え, 高速にレイアウトできる特徴をもつ。このレイアウトアルゴリズムは, 力学的な計算範囲をランダムに限定し, その範囲の局所的エネルギーの最小化により計算量を削減するとともに, これを繰り返すことで大域的なレイアウト最適化を実現する。

LEM は, ネットワークのノード集合とエッジ集合の関係が与えられたとき, 以下のアルゴリズムで行う。

1. 各ノードをランダムに配置する
2. ランダムにノード i を選択する
3. 近傍定数 M から $\pm M/2$ の範囲でランダムに近傍数 m を定める
4. ノード i の m 次近傍までのノード集合 Γ_i^m を決定する
5. Γ_i^m に対して働く力を計算する
6. 座標値 x_i を更新する
7. 終了条件を満たせば終了, そうでなければ (2) へ戻る

LEM では, Γ_i^m に対して働く力は 3 つ存在する。第 1 はノード i に働く引力 F_i^a (式 (1)) である。

$$F_i^a = \frac{1}{\alpha} \sum_{i \neq j, j \in E_i}^{|E_i|} \|x_{ij}\| x_{ij} \quad (1)$$

ここで, α は任意定数, $x_{ij} = x_j - x_i$, E_i はノード i の隣接ノード集合である。

第 2 はノード i を中心とした半径 R 内のノードに働く斥力 F_i^r (式 (2)) である。

$$F_i^r = -\alpha^2 \sum_{j=1}^N \begin{cases} \frac{x_{ij}}{\|x_{ij} + \epsilon\|^2} & : \|x_{ij}\| \leq R \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

ここで, N は可視化対象のノード集合である。

第 3 は, ノード集合 Γ_i^m で構成されるサブネットワークに働く力 F_i^s (式 (3)) であり, ノード i からパス長が離れば離れるほど力は弱くなる。ここで, ノード i から近傍距離 k , $k+1$ に存在するノード集合を E_{ij}^k, E_{ij}^{k+1} とし, $[a_{uv}]$ はノード u とノード v の隣接行列, Γ_{k+1} は $E_{ij}^k - E_{ij}^{k+1}$ 間に存在するエッジ本数とする。

$$F_i^s = \sum_{k=2}^{m-1} \frac{m-k+1}{m-1} \frac{1}{\Gamma_{k+1}} \sum_{u \in E_{ij}^k, v \in E_{ij}^{k+1}} F_{uv}^s \quad (3)$$

† 北海道大学 大学院情報科学研究科 Graduate School of Information Science and Technology, Hokkaido University

‡ 北見工業大学 Kitami Institute of Technology

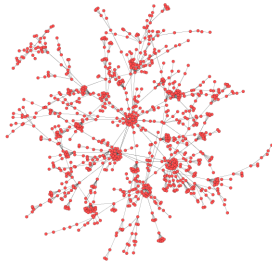


図 1: FR method

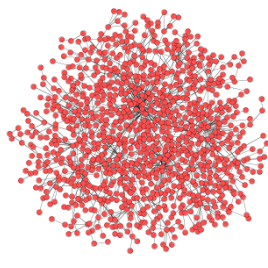


図 2: VR-LEM

$$F_{uv}^s = \begin{cases} \|x_{uv}\| x_{uv} & : a_{uv} = 1 \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases}$$

座標の更新は、上記 3 つの力の合力を重みを乗じて加算することで行う。

3 数値計算実験

LEM は局所的なエネルギーの最小化を目的としているため、好ましいレイアウト結果が得られない場合がある。これは、力の平衡状態に陥ることによって本来小さくできるはずのエネルギーが下がりにくい状態を指す。

本研究では、LEM における力の平衡状態に陥る状態を防ぎながらレイアウトするために、近傍半径パラメータを動的に変化させることを提案する。また、このときのポテンシャルエネルギー Ψ を (式 4) に示す。

$$\Psi = \frac{1}{3\alpha} \sum_{j \neq i}^{|E_j|} \|x_{ij}\|^3 - \frac{\alpha^2}{2} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \log \|x_{ij} + \epsilon\| \quad (4)$$

3.1 提案手法: VR-LEM

LEM における局所最適化の範囲を決定する近傍定数 M を周期的に変化させることで問題解決を図る。近傍定数 M を変化させることにより、一時的に局所範囲を拡大し広域的な力学計算を行うことができる。広域的にエネルギーを計算することで、グラフィケアウトが力の平衡状態に陥ることを防ぐための近傍定数 M 関数は $M = 2 \sim (\text{ネットワーク直径})/2$ の範囲で決定する。以降、パラメータを変化させるアルゴリズムを Variable Region LEM (VR-LEM) と呼ぶ。

3.2 実験条件

本稿では BA モデルで作成したノード数 1000 ($m = 1$) のデータを用いて、ネットワーク可視化を行い (図 1~2)、既存手法である FR 法、LEM、VR-LEM で比較を行う。VR-LEM の近傍定数関数は矩形波関数を用い、矩形波関数におけるデューティ比 d を $d = (0.3, 0.5, 0.7)$ の 3 つ用意する。初期配置はランダム配置とし、一定時間を経過するまで可視化処理を実行する。また、LEM、VR-LEM 共通のパラメータは $\alpha = 32$, $\Delta t = 0.01$ とする。

3.3 結果・考察

3 種のアルゴリズムで、ポテンシャルエネルギーおよび、エッジクロス数の推移を (図 3~4) に示す。図 3 から、VR-LEM は LEM よりエネルギーを下げることができる。さらに、LEM の可視化終了時においてもエネルギーは低く、以降、下がり続けていることがわかる。VR-LEM のデューティ比 d による差は、可視化の速度にあらわれており、デューティ比が

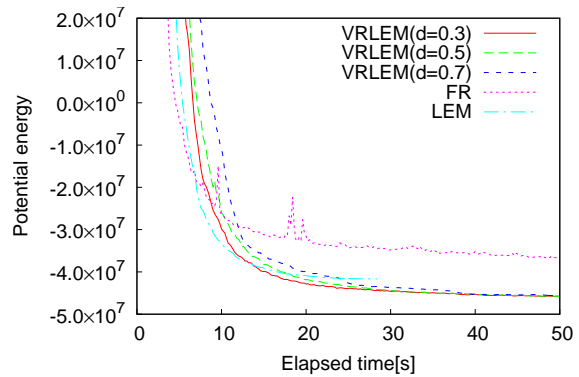


図 3: Potential energy

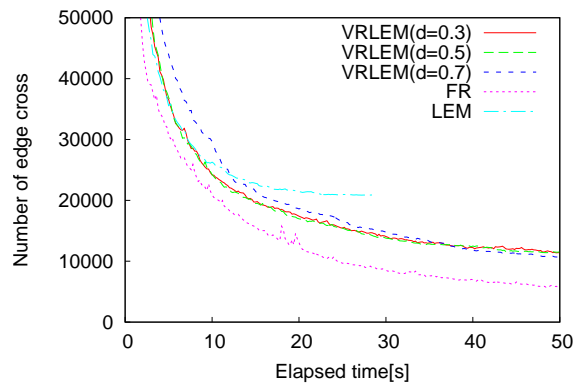


図 4: Number of edge cross

小さいほどエネルギーが早く下がることがわかる。また、図 4 から、VR-LEM は FR 法に近いエッジクロス数の減少が見られ、デューティ比による差はほぼないことがわかる。

4 まとめ

グラフィケアウトは大規模で複雑なネットワークの特徴を理解するのに重要な問題である。本稿では、LEM アルゴリズムにおける局所最適化から起こりうる力の平衡状態に陥る問題を解消するため、局所最適化と大域的最適化を切り替える VR-LEM を提案した。検証として、ポテンシャルエネルギーでは、VR-LEM は、LEM よりエネルギーを小さくできることを示した。また、計算時間では、VR-LEM は、LEM より下回るが、FR 法より早くエネルギーが下がることを示した。

今後の課題として、大規模なネットワークへの適用、LEM、VR-LEM の並列演算への適用が挙げられる。

参考文献

- [1] P.Eades: A Heuristic for Graph Drawing, *Congressus Numerantium*, 42, pp.149-160, 1984.
- [2] T.Kamada and S.Kawai: An Algorithm for Drawing General Undirected Graphs, *Information Processing Letters*, 31, pp.7-15, 1989.
- [3] T.Fruchterman and E.Reingold: Graph Drawing by Force-directed Placement, *Software-Practice and Experience*, 21, pp.1129-1164, 1991.
- [4] 茂尾亮太, 鈴木育男, 山本雅人, 古川正志: 局所エネルギー最小化による可視化の高速化情報処理北海道シンポジウム 2009, pp.60-65 2009.