1M-5

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に関する検証*

辻本陽平† 鈴木育男† 山本雅人† 古川正志†
北海道大学大学院 情報科学研究科‡

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，クラスター性などの興味深い性質を有することが調査されている．

近年，ネットワークの大規模化により，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用いられている．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．そこで，ネットワークの可視化を行うことで，人間の高い認識能力を利用した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平衡状態に陥ることを防ぐことを目的とする．

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，また，明確な解が存在しない．従って，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くことで，準最適なグラフレイアウトを求める．

現在，様々なレイアウトアルゴリズムが提案されているが，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，これは，P.Eades[1] によって提案されたばねモデルが基礎になっている．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問題となる計算コストを抑え，高速にレイアウトできる手法である．一度に計算する範囲を限定し，局所的にエネルギーを最小化させることで，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．

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

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．

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

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．

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

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

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．

---

* Effectiveness of Neighborhood Radius in Local Energy Minimization
† Yohei TSUJIMOTO, † Ikuo SUZUKI,
† Masahito YAMAMOTO, † Masashi FURUKAWA
‡ Graduate School of Information Science and Technology, Hokkaido University

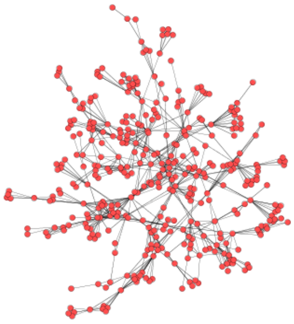

Fig. 1 FR method

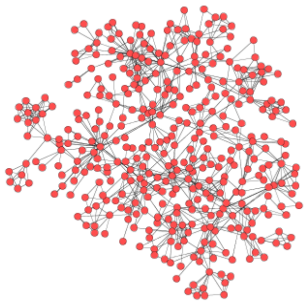

Fig. 2 VR-LEM

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で本来小さくできるはずのエネルギーが下がりきらない状態を指す．

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調整することを提案する．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．

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

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，グラフレイアウトが力の平衡状態に陥ることを防ぐための周期関数は $M = 2 \sim 9$ をとる sin 関数とする．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 Newman が作成したネットワーク科学の共著ネットワークデータを用いて，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 と，VR-LEM とで比較を行う．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 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 4〜3）** に示す．図 3 から，VR-LEM は LEM よりポテンシャルエネルギーを下げることができるが，可視化時間は大きくなることがわかる．しかしながら FR 法と比較すると，エネルギーは小さくなり，高速である．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る．

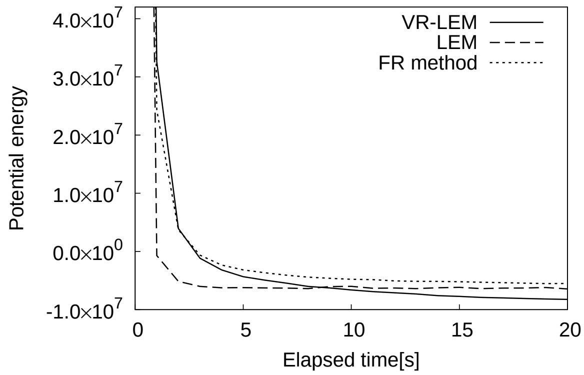

Fig. 3 Potential energy

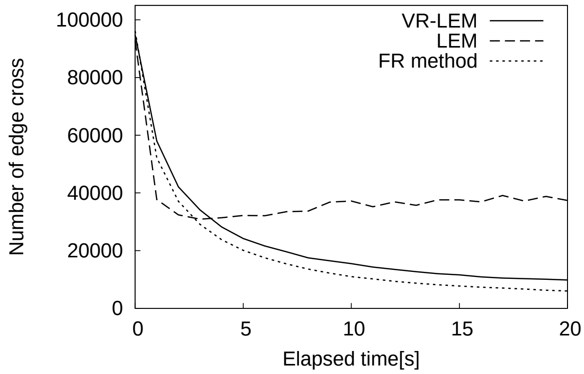

Fig. 4 Number of edge cross

4 まとめ

グラフレイ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．本研究では，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の，局所範囲を一時的に拡大し広域的な力学計算を行う VR-LEM を提案した．検証として，ポテンシャルエネルギーを比較し，VR-LEM は，FR 法や，LEM よりエネルギーを小さく出来ることを示した．

今後の課題として，VR-LEM アルゴリズムの大規模なネットワーク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.