

進捗報告 卒業研究

2121057 清 恵人

目次

1. 中間発表のイメージ(提案手法まで)
 - 1.1 研究背景
 - 1.2 研究目的
 - 1.3 提案手法
2. (予備)実験 (今回行ったこと)
 - 2.1 Data-driven
 - 2.2 Graph neural network
 - 2.3 考察、今後の課題

グラフ構造を扱うニューラルネットワーク
近傍ノードの特徴→ノード分類・グラフ分類・リンク予測 [1]

具体例 [2]

1. ノード分類: 社会ネットワークから民主党か共和党分類
2. グラフ分類: 化学化合物の毒性の有無
3. リンク予測: ソーシャルメディアから商品と購入ユーザーの予測
交通量予測、組み合わせ最適化、**COVID-19** (感染予測・薬剤設計)

[1] Z. Wu, S. Pan, F. Chen, G. Long, C. Zhang and P. S. Yu, "A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks," in IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, vol. 32, no. 1, pp. 4-24, Jan. 2021, doi: 10.1109/TNNLS.2020.2978386.

keywords: {Deep learning;Neural networks;Task analysis;Kernel;Feature extraction;Data mining;Learning systems;Deep learning;graph autoencoder (GAE);graph convolutional networks (GCNs);graph neural networks (GNNs);graph representation learning;network embedding},

[2] Jie Zhou, Ganqu Cui, Shengding Hu, Zhengyan Zhang, Cheng Yang, Zhiyuan Liu, Lifeng Wang, Changcheng Li, Maosong Sun, Graph neural networks: A review of methods and applications, AI Open, Volume 1, 2020, Pages 57-81, ISSN 2666-6510, <https://doi.org/10.1016/j.aiopen.2021.01.001>.
(<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666651021000012>)

研究背景 最適化

- ・工学設計 (コイルの設計 [3]) など現実世界の多くの問題に最適化
- ・大規模・複雑化の最適解

→メタヒューリスティック

代表例)

- ・差分進化・遺伝的アルゴリズム・粒子群最適化・人工蟻コロニー

高次元の場合→コストが大きい

探索個体をグループ分け→分割基準 (探索の影響度が強い)

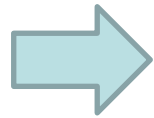
非線形な複雑な関数

ブラックボックス化

[3] Takahiro Sato, A Data-Driven Optimization Method for Strongly Non-Separable Mixed-Integer Problems, 2024

従来研究 Surrogate model

- 評価値を計算するのにコスト(時間を要する)



Surrogate modelが注目

Surrogate model[4]

⇒ 代理モデルを用いることで評価値の近似解

代表例

- Data-driven Approach[5]
- Radial Basis Function (RBF)

[4] Liu.Y, Wang,Handing , Ma.Jingjing , Infill Criterion Ensemble in Multi-Objective Evolutionary Algorithm for Mixed-Variable Problems

[5] Y. Jin, H. Wang, T. Chugh, D. Guo and K. Miettinen, "Data-Driven Evolutionary Optimization: An Overview and Case Studies," in IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol. 23, no. 3, pp. 442-458, June 2019, doi: 10.1109/TEVC.2018.2869001.

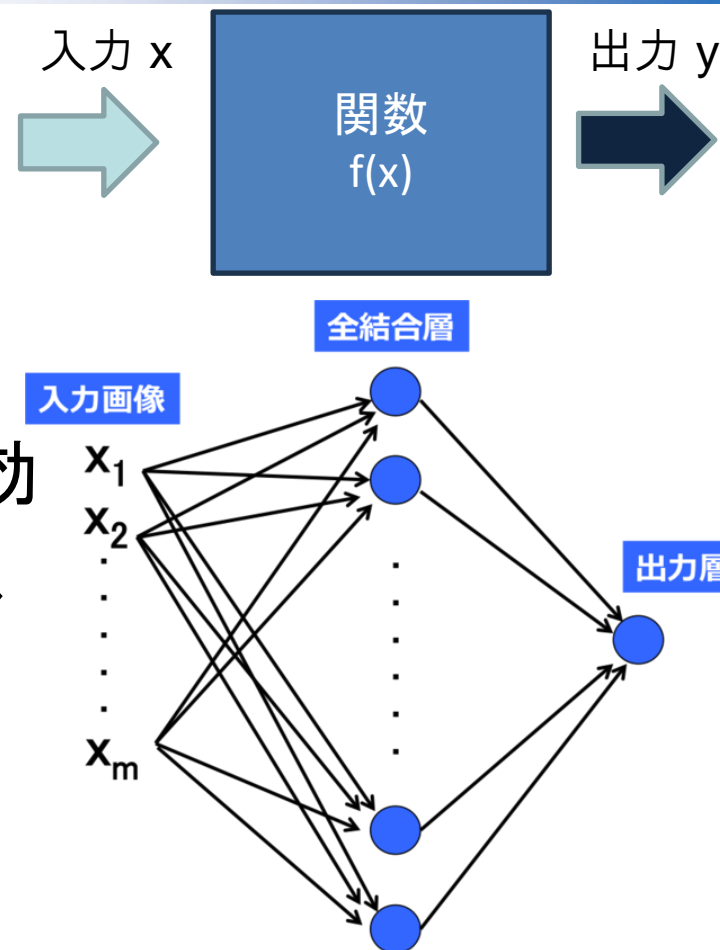
keywords: {Optimization;Data models;Computational modeling;Data mining;Sociology;Statistics;Machine learning;Data science;data-driven optimization;evolutionary algorithms (EAs);machine learning;model management;surrogate},

従来研究 Data-driven

- ・目的関数の形状
 - 非線形
 - 高次元
 - ブラックボックス化

→ ニューラルネットワークが有効
データに基づいて関数を近似

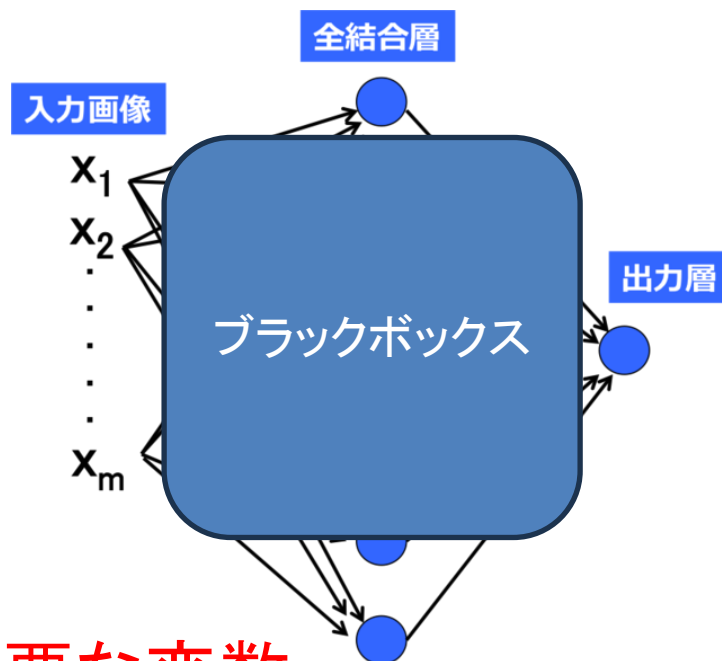
Surrogate modelでの近似



問題点：ブラックボックス化

- ・ニューラルネットワークはブラックボックス

変数間同士の関係
すべての変数最適化→高コスト



目的関数に対して重要な変数
部分的に最適化

目次

1. 中間発表のイメージ(提案手法まで)
 - 1.1 研究背景
 - 1.2 研究目的
 - 1.3 提案手法
2. (予備)実験 (今回行ったこと)
 - 2.1 Data-driven
 - 2.2 Graph neural network
 - 2.3 考察、今後の課題

研究目的

Data-drivenにおけるブラックボックスを
解決するために
グラフニューラルネットワークを用いた
変数間の重要度から
非線形かつ高次元な複雑な関数を
部分的？低コスト？最適化する

目次

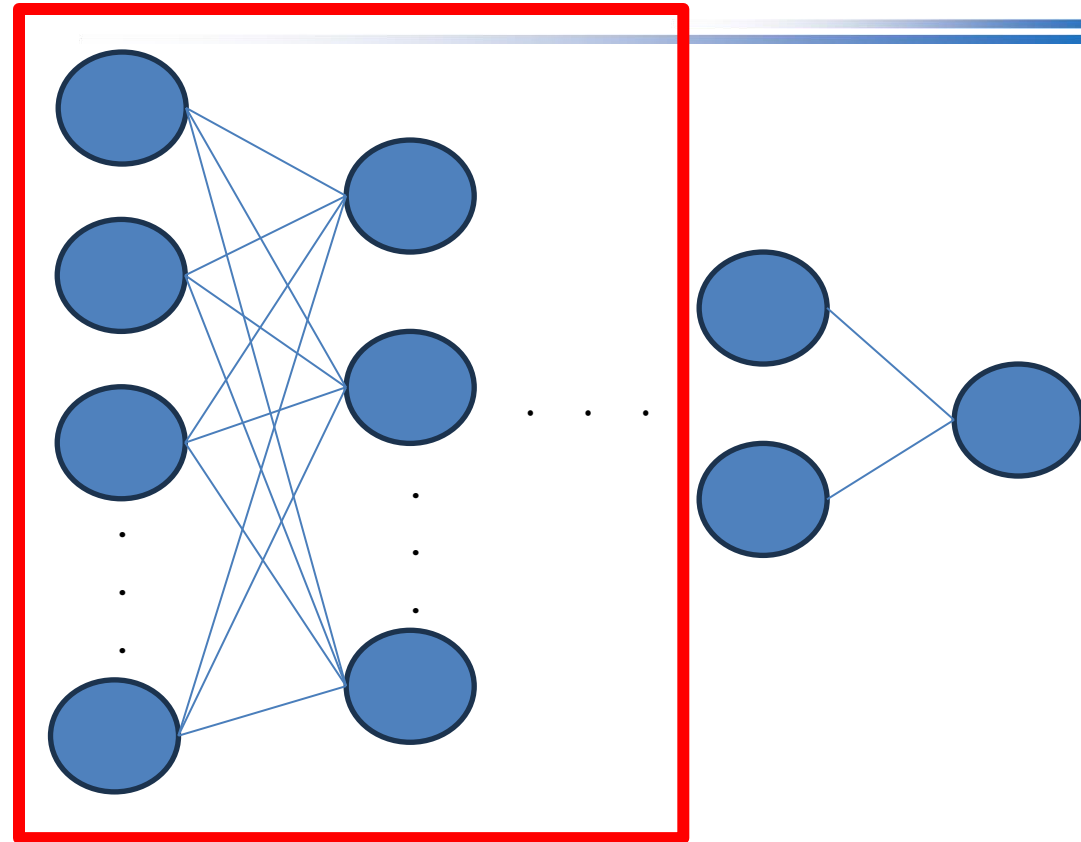
1. 中間発表のイメージ(提案手法まで)
 - 1.1 研究背景
 - 1.2 研究目的
 - 1.3 提案手法
2. (予備)実験 (今回行ったこと)
 - 2.1 Data-driven
 - 2.2 Graph neural network
 - 2.3 考察、今後の課題

提案手法

入力層から中間層を
グラフニューラルネット
ワークで学習

→ 入力変数間の依存
関係

依存関係から重要な
変数のみを最適化



グラフニューラルネットワーク適用

目次

1. 中間発表のイメージ(提案手法まで)
 - 1.1 研究背景
 - 1.2 研究目的
 - 1.3 提案手法
2. (予備)実験 (今回行ったこと)
 - 2.1 Data-driven
 - 2.2 Graph neural network
 - 2.3 考察、今後の課題

実験1 Data-driven

- Rastrigin function 10次元
- Schwefel function 10次元

個体数300

(0): Linear(10, 8, bias=True)

(1): Linear(8, 6, bias=True)

(2): Linear(6, 4, bias=True)

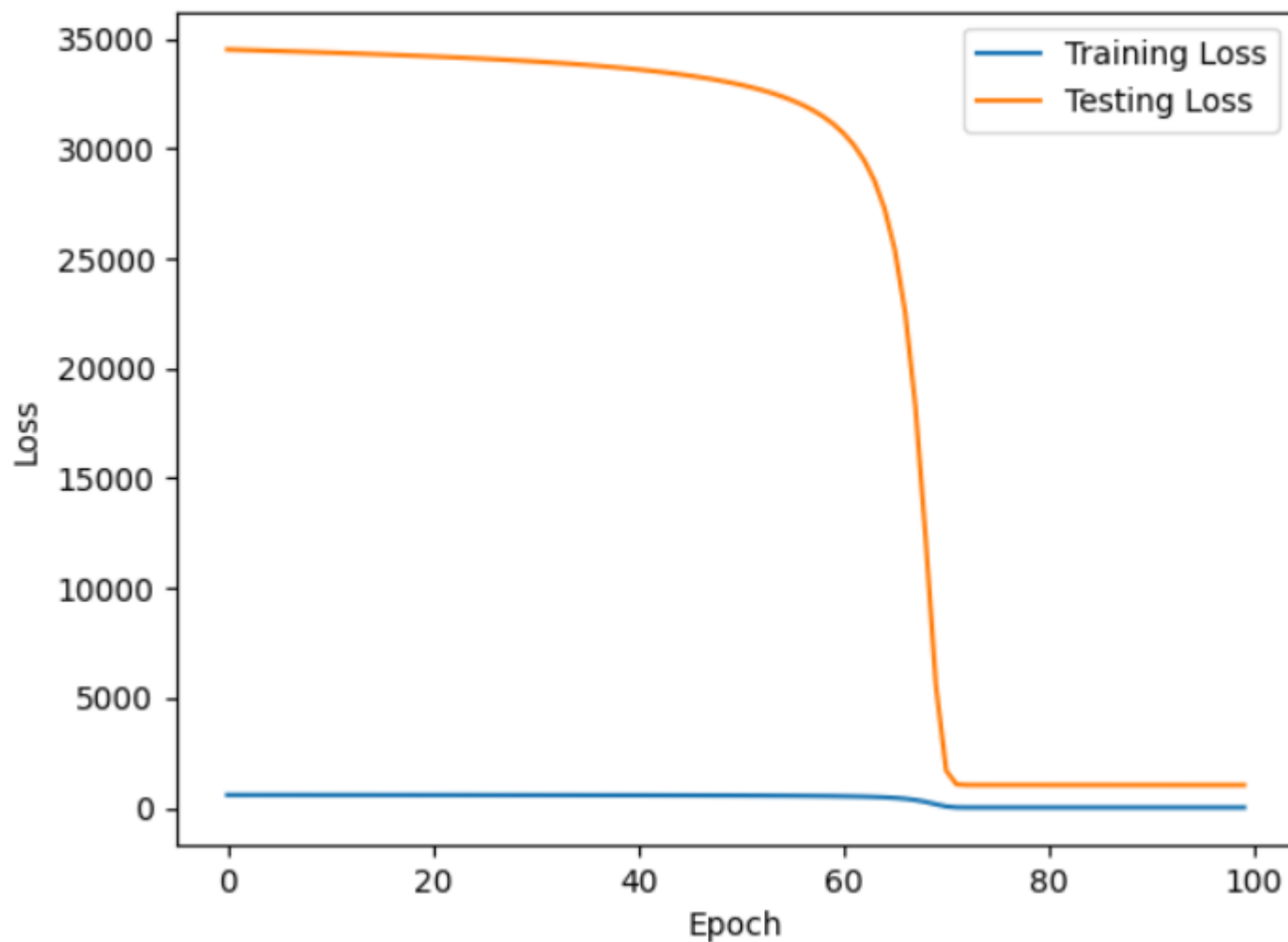
(3): Linear(4, 2, bias=True)

(4): Linear(2, 1, bias=True)

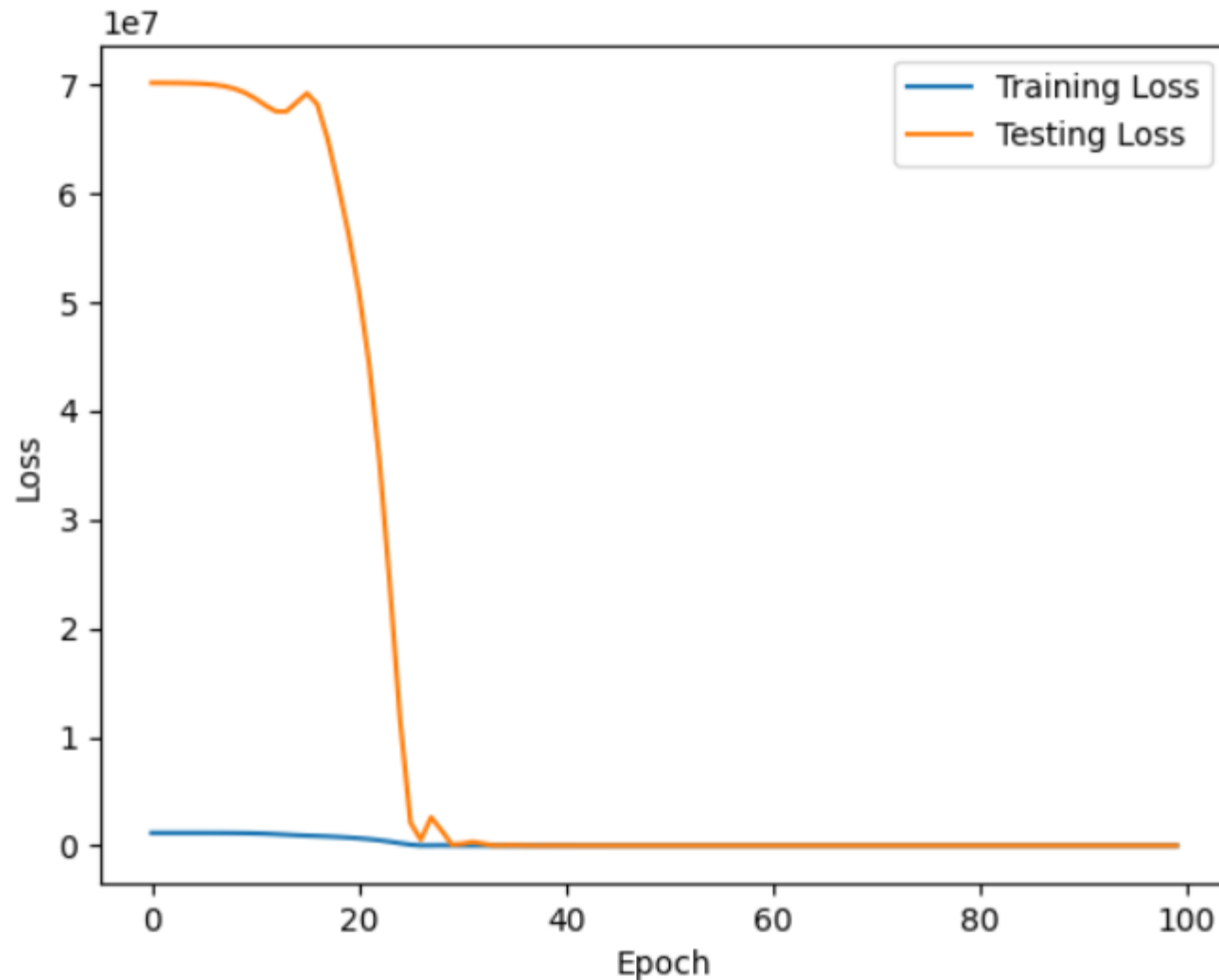
epoch:100 lr=0.01

batch_size=65 optimizer=Adam

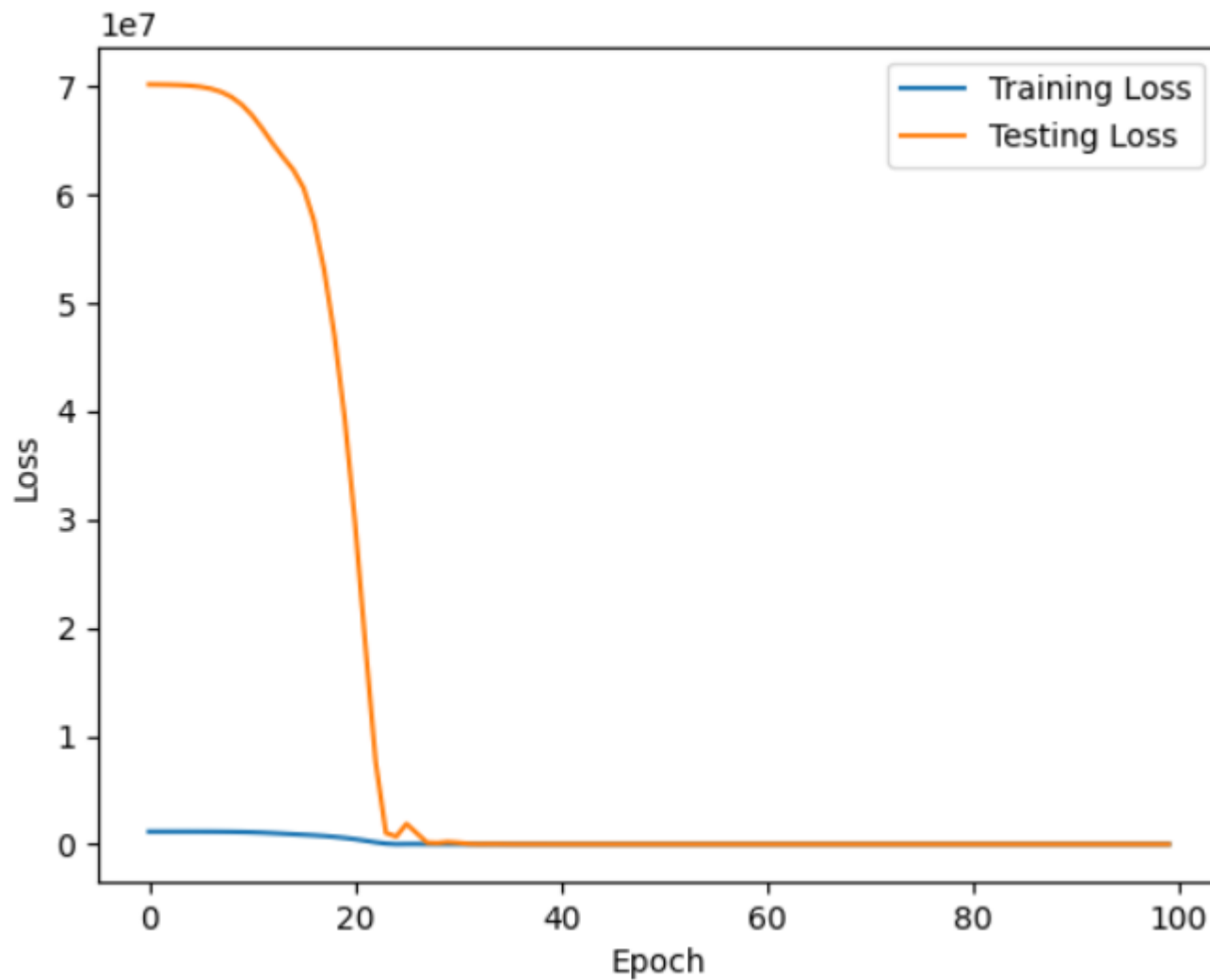
実験1 Rastrigin data-driven



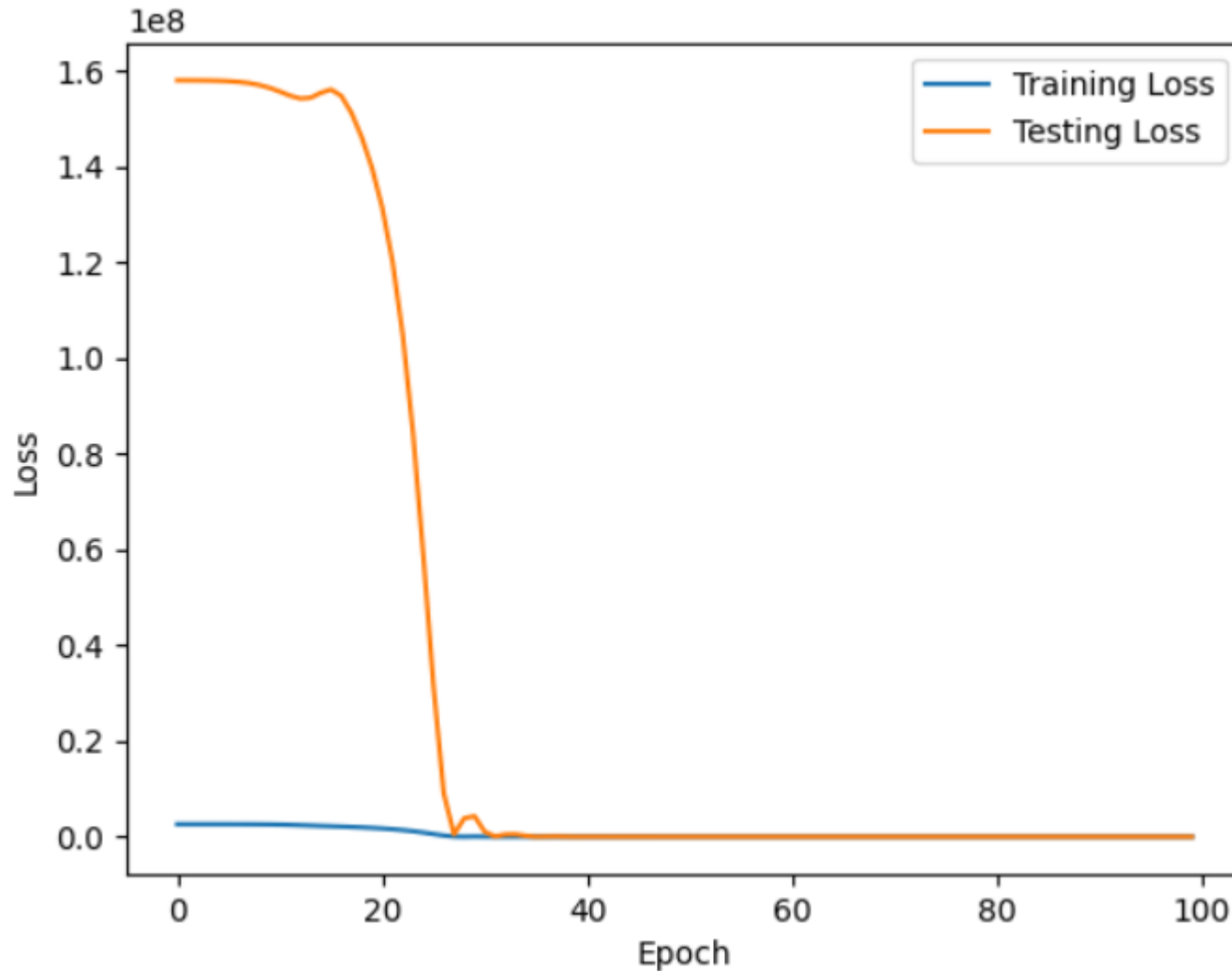
実験1 Schwefel10data-driven



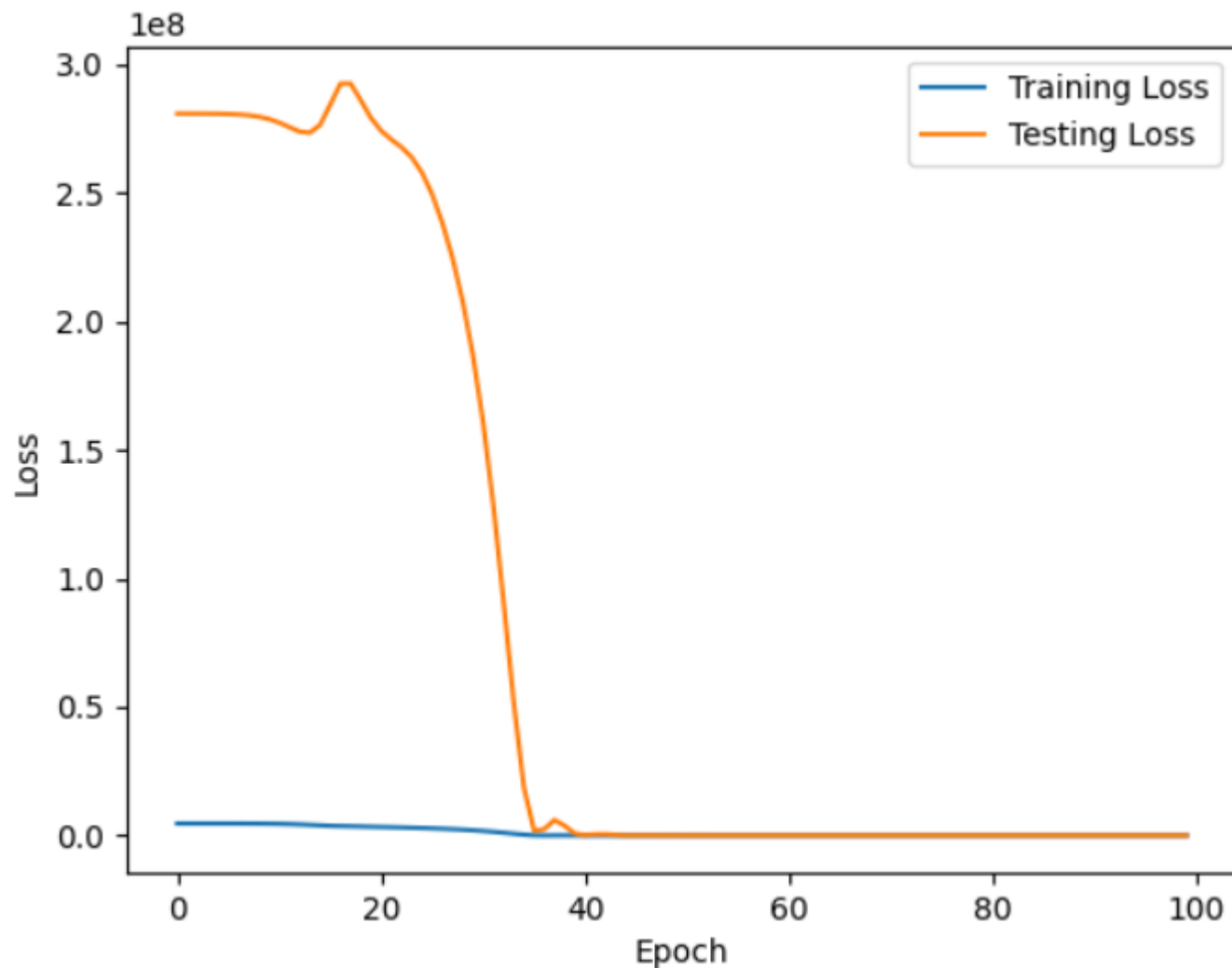
実験1 Schwefel20data-driven



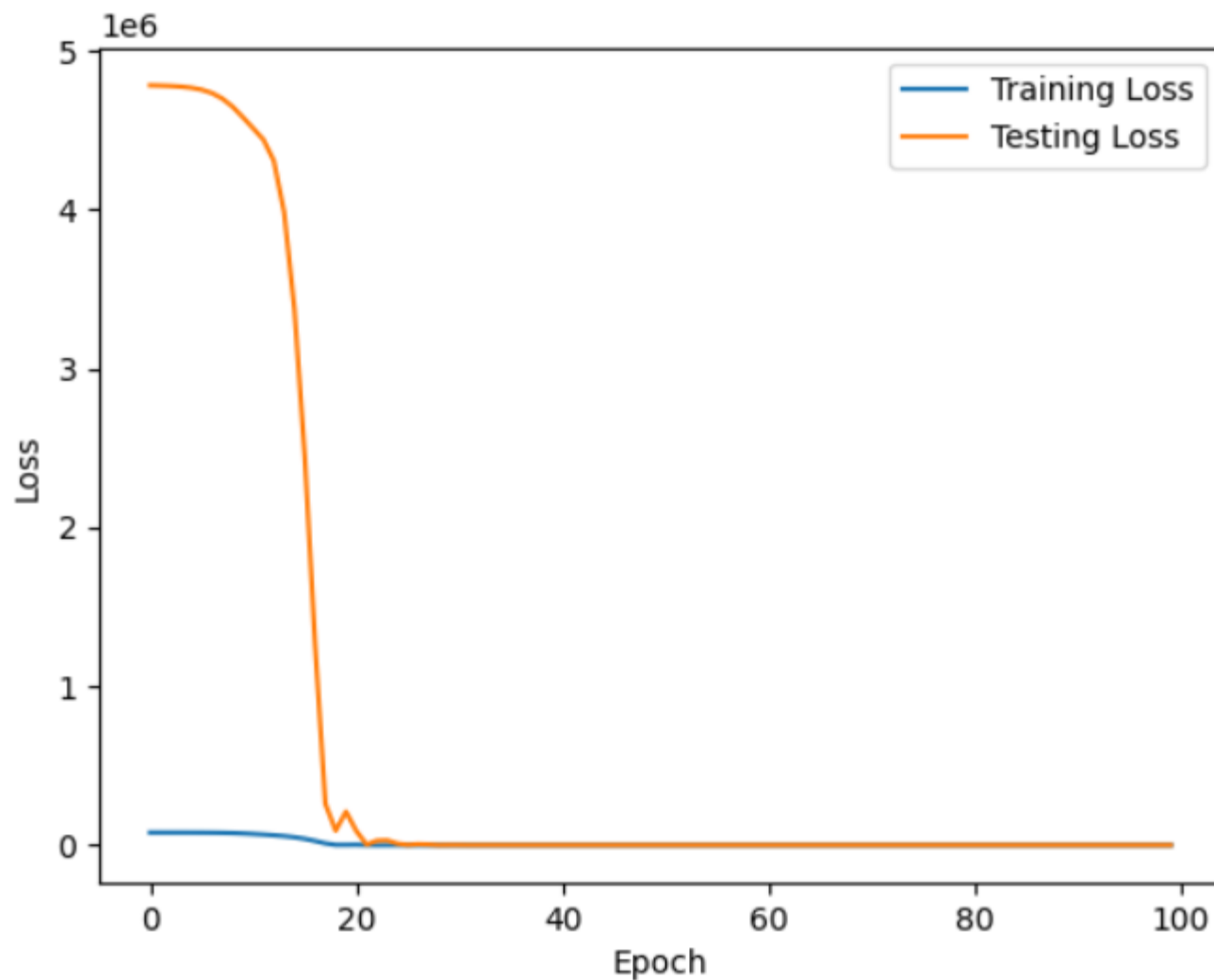
実験1 Schwefel30data-driven

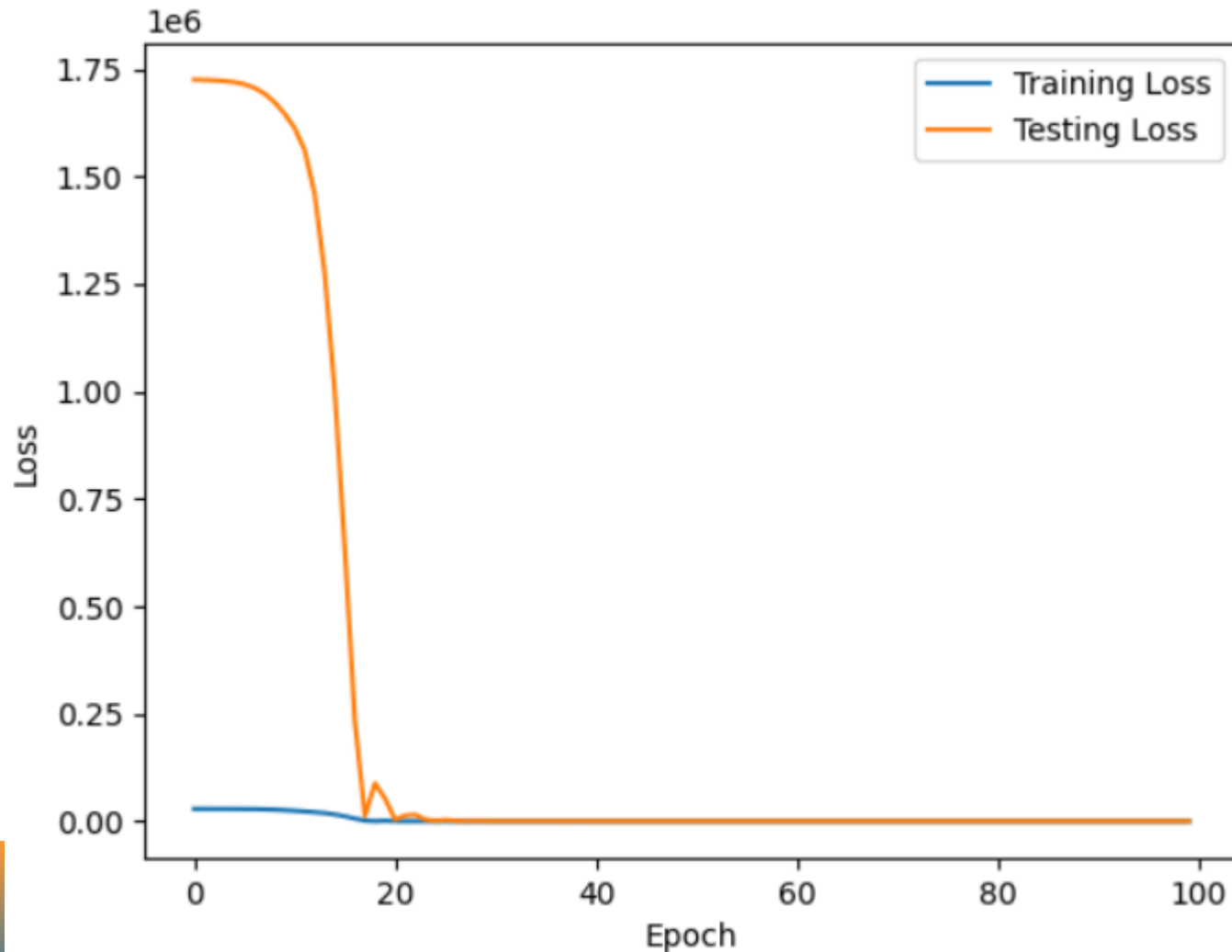


実験1 Schwefel40data-driven



実験1 Rastrigin+Schwefel

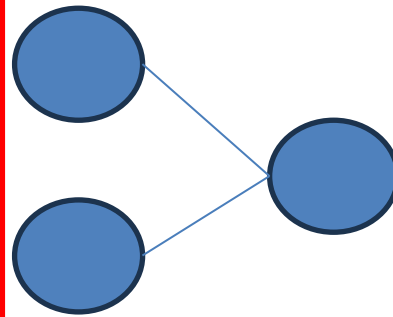
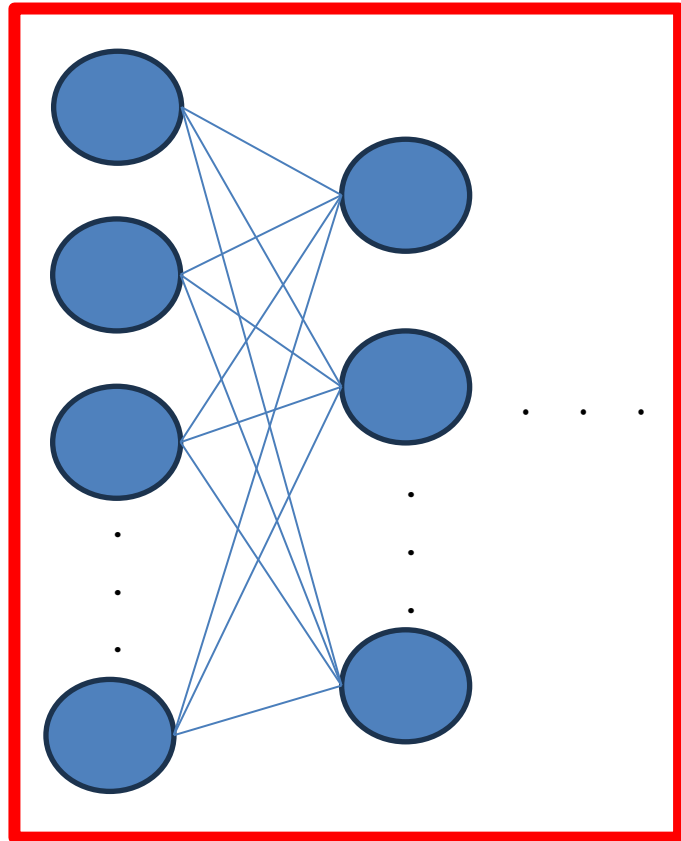




目次

1. 中間発表のイメージ(提案手法まで)
 - 1.1 研究背景
 - 1.2 研究目的
 - 1.3 提案手法
2. (予備)実験 (今回行ったこと)
 - 2.1 Data-driven
 - 2.2 Graph neural network
 - 2.3 考察、今後の課題

実験2 GNNの適用



ノード: ノード

重み: エッジの重み

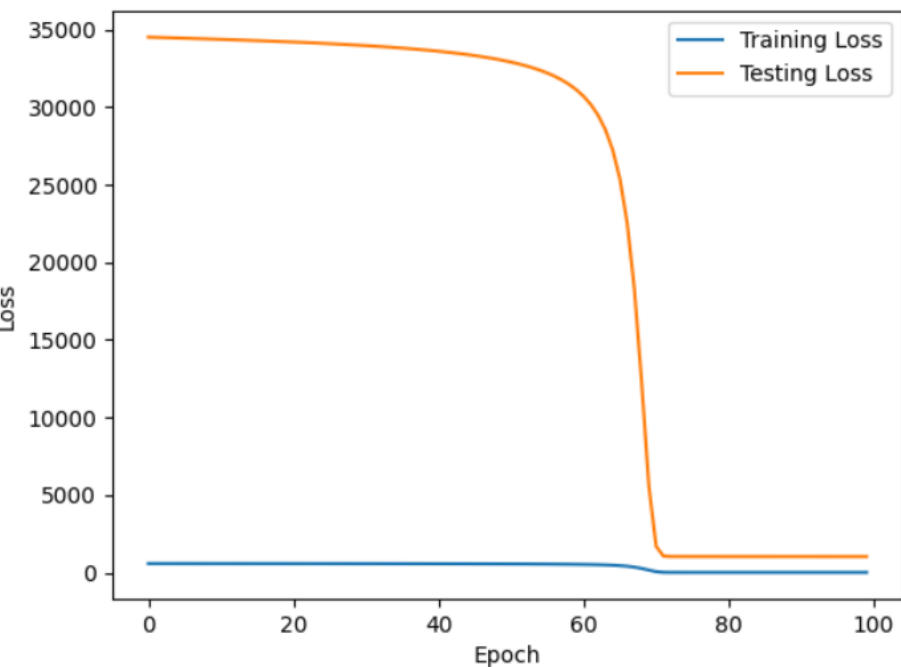
バイアス: ノードの特徴ベクトル

入力(ランダム): 入力層のノードの
特徴ベクトル

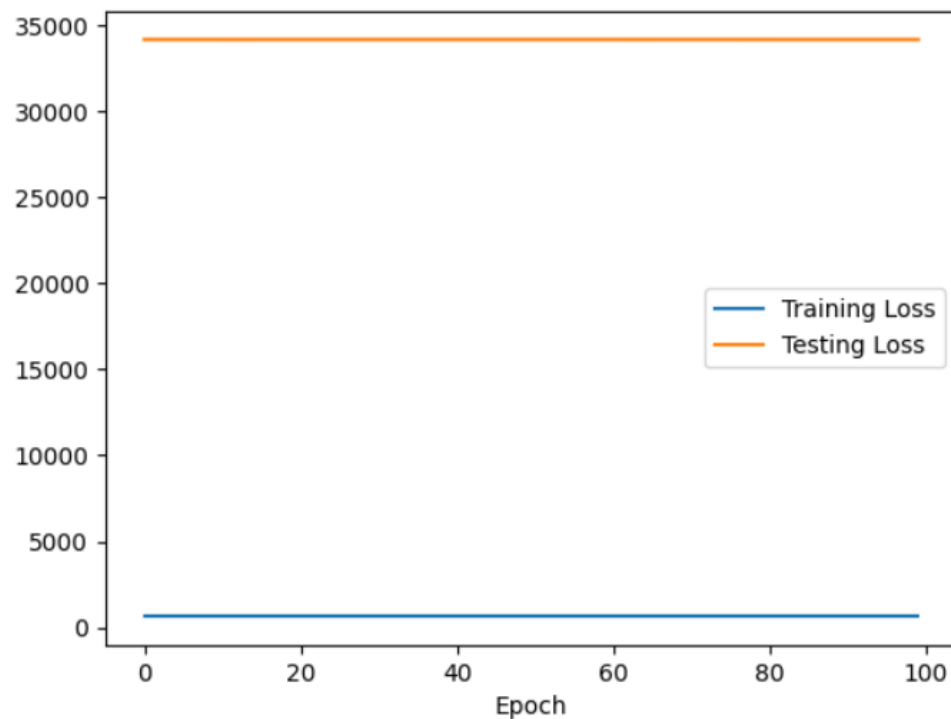
グラフニューラルネットワーク適用

バイアスあり・なし

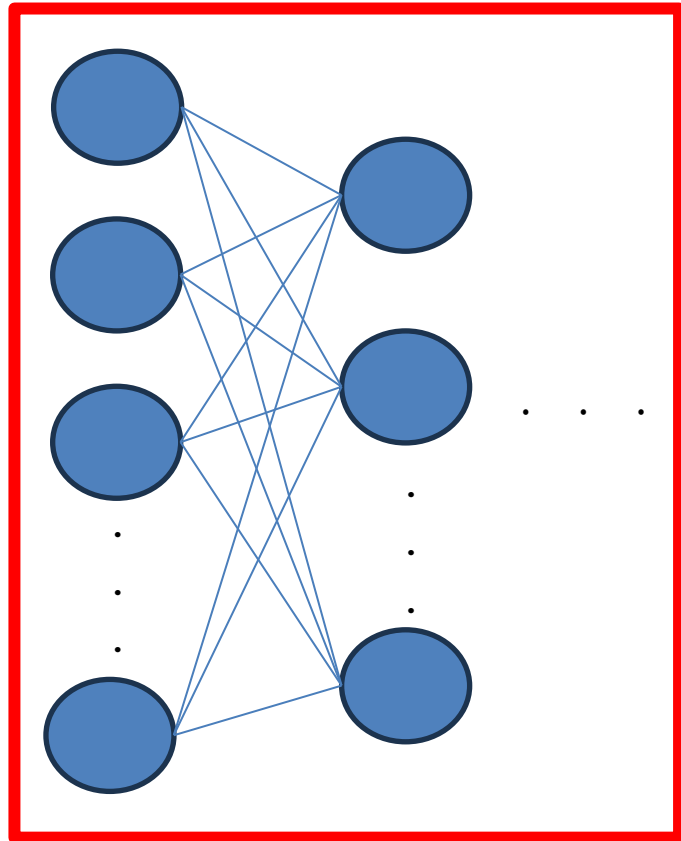
Rastrigin 10次元
あり



なし



実験2 GNNの適用



ノード: ノード

重み: エッジの重み

バイアス: ノードの特徴ベクトル

入力(ランダム): 入力層のノードの
特徴ベクトル

教師データ: 関数のノード

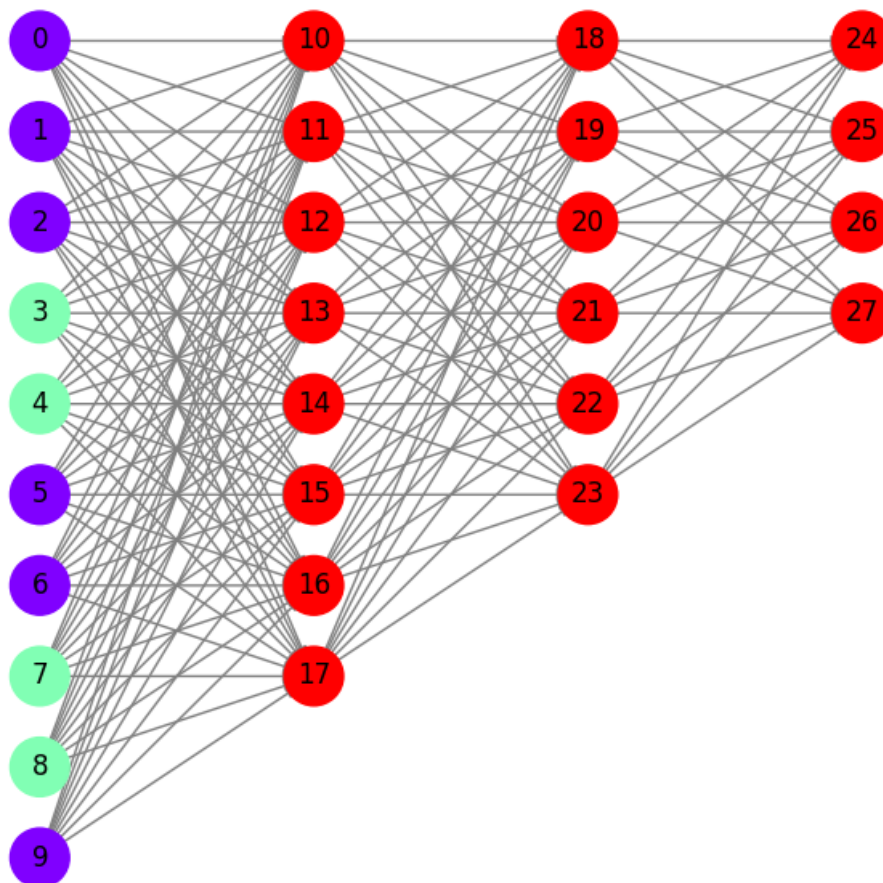
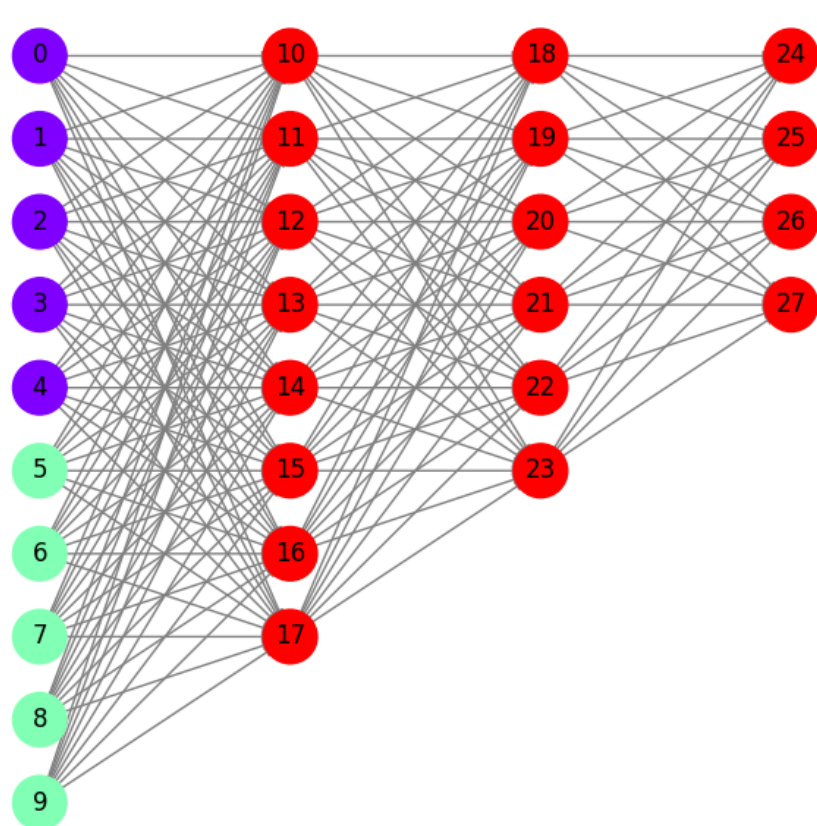
グラフニューラルネットワーク適用

実験2 GNNの実験結果

教師データ

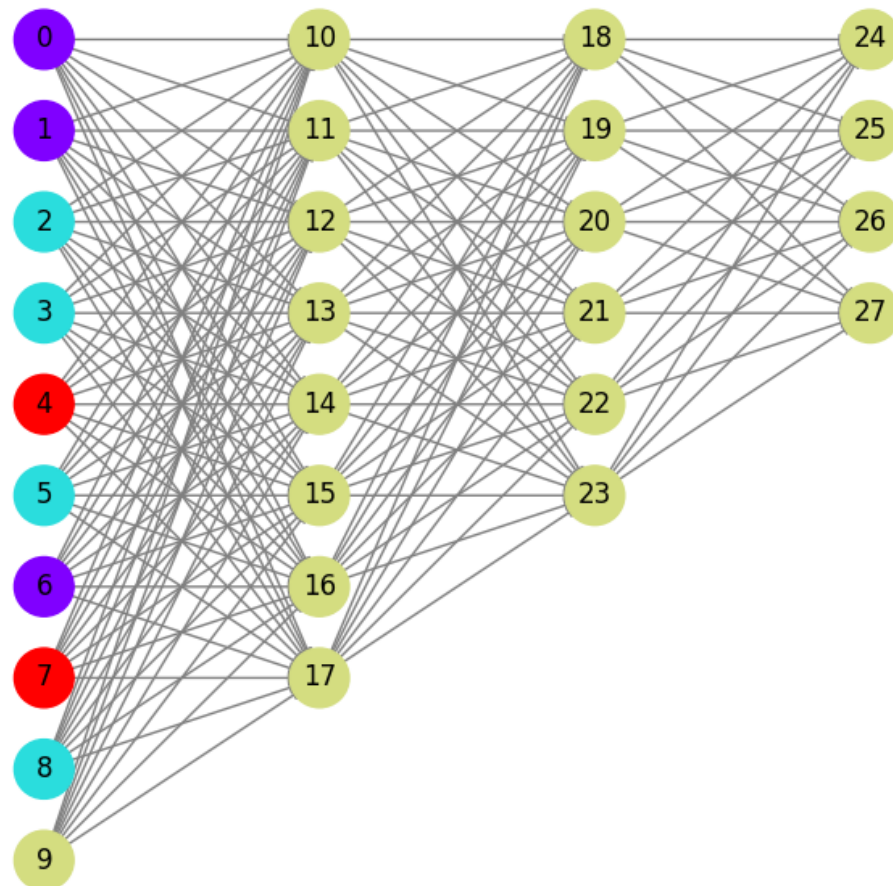
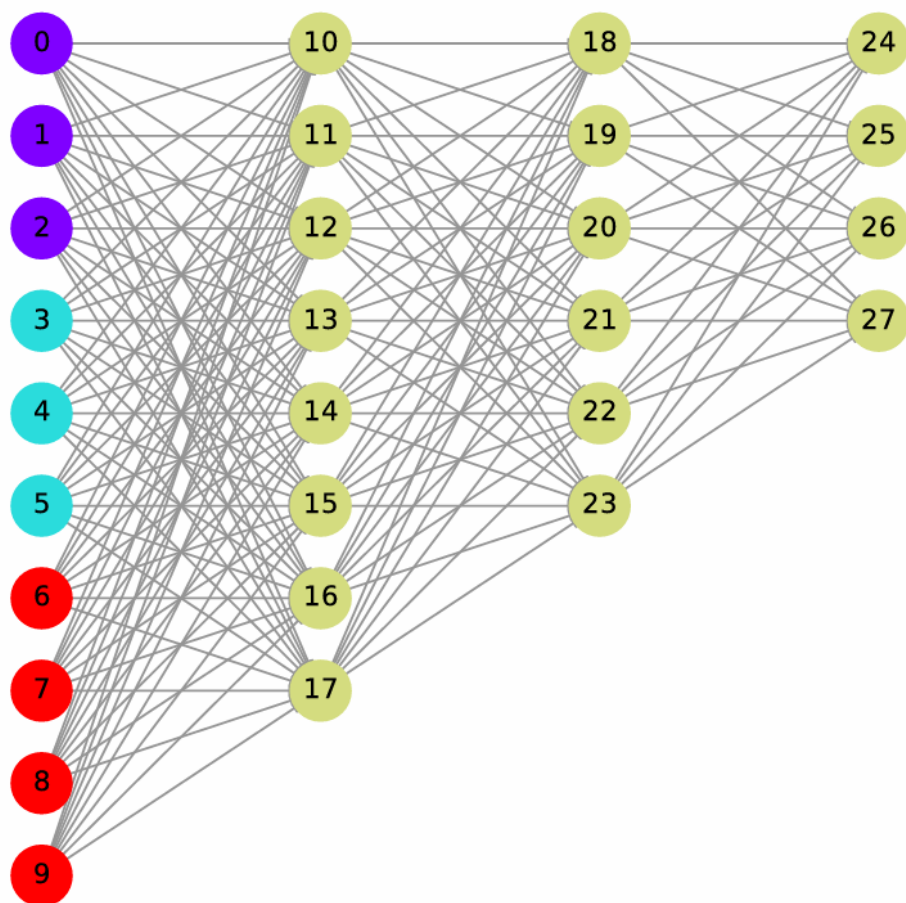
5次元 Rastrigin + 5次元 Schwefel

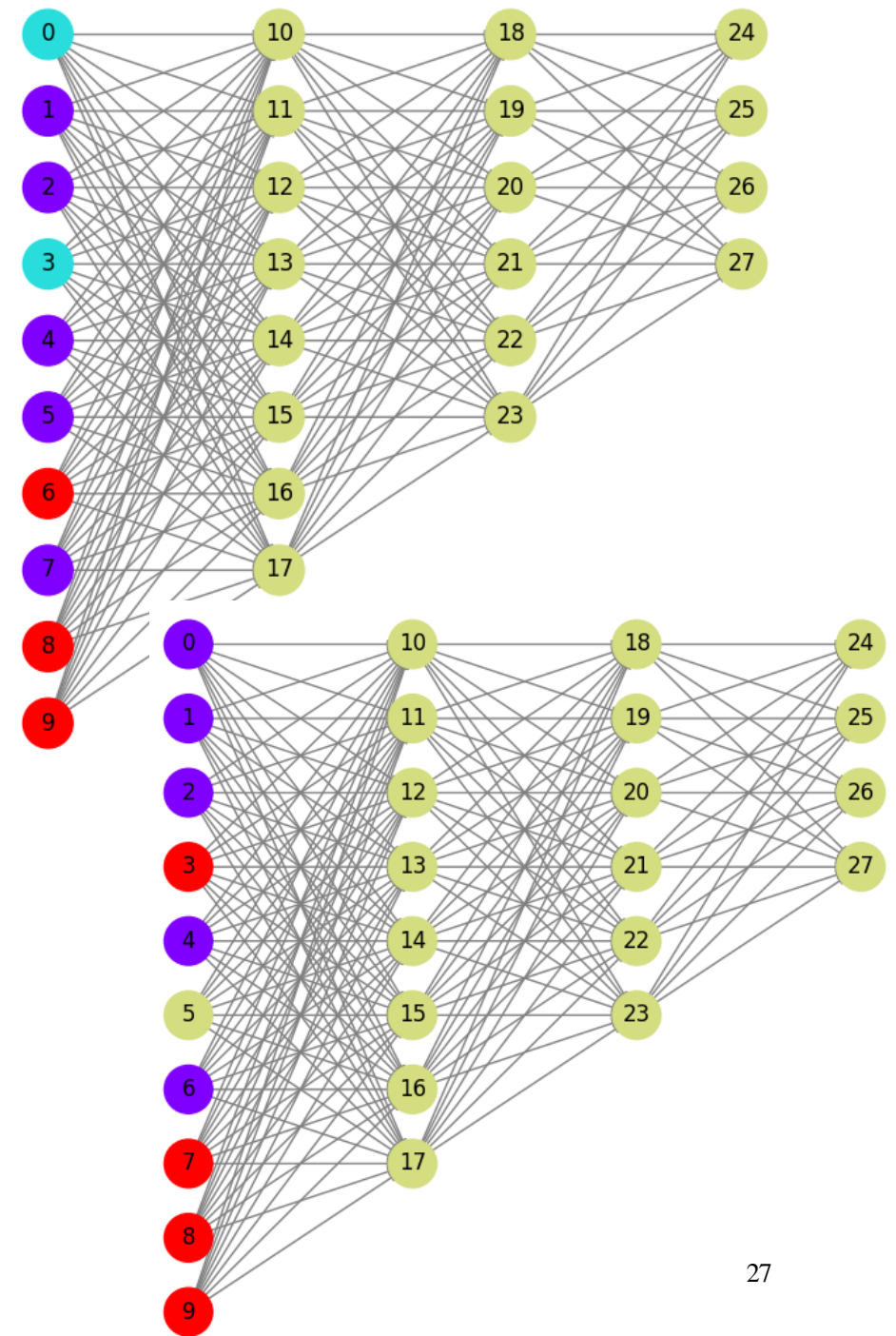
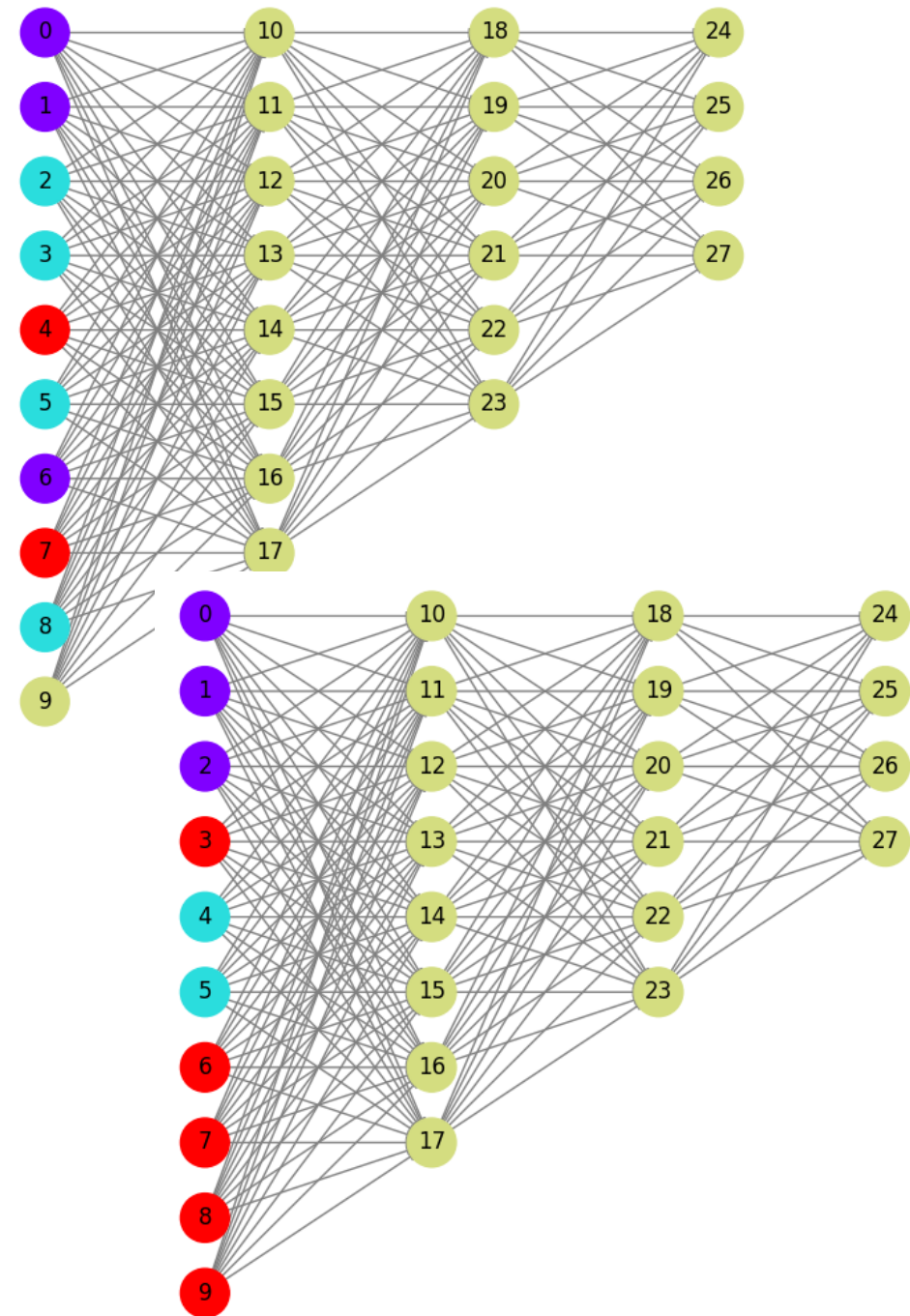
予測結果



実験2 GNNの実験結果

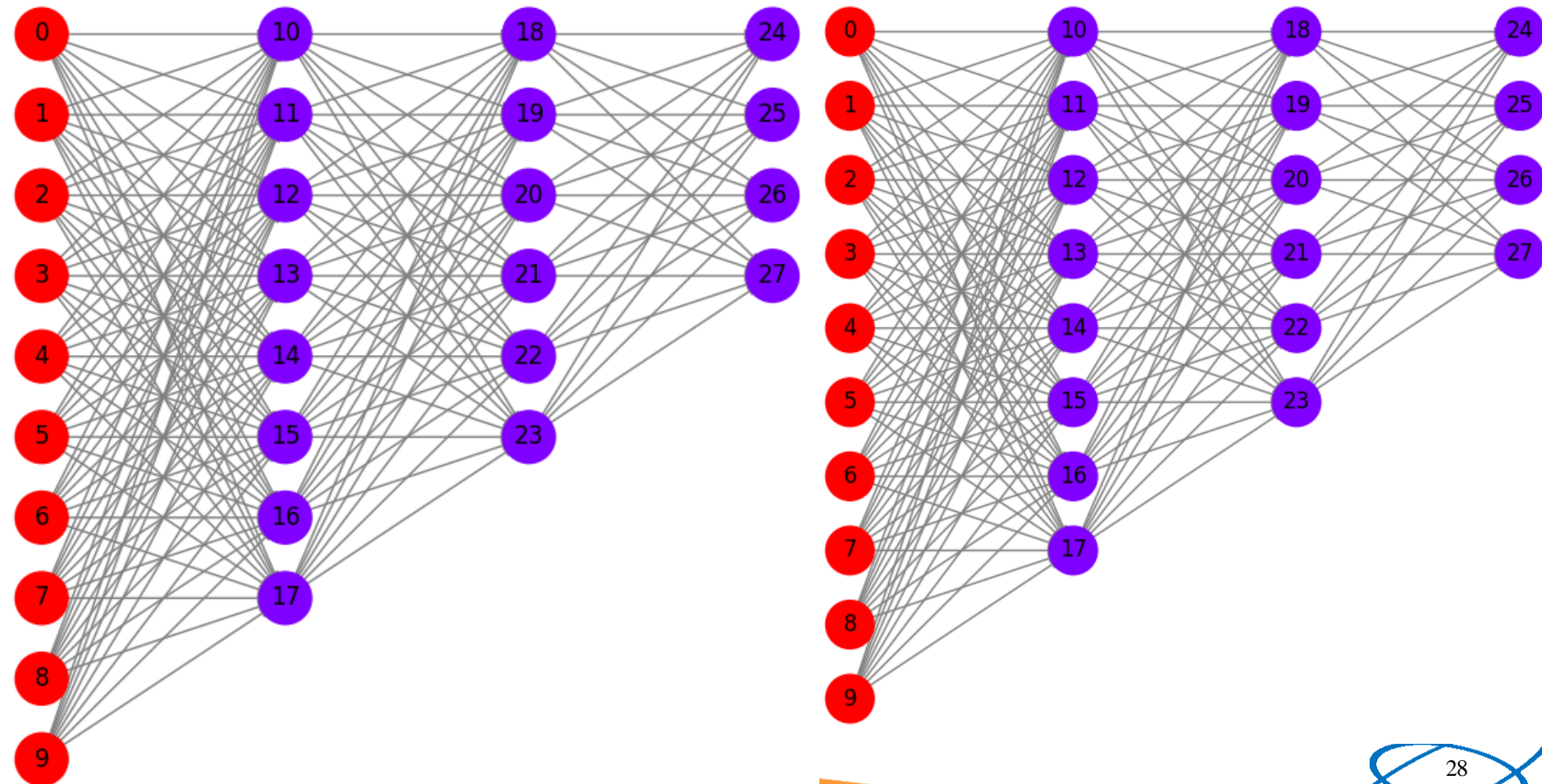
3次元 Rastrigin + 3次元 Schwefel + 4次元 Rosenbrock
教師データ 予測結果





実験2 GNN 入力層の検討

3次元 Rastrigin + 3次元 Schwefel + 4次元 Rosenbrock
初期値すべて1



部分最適化

0,1,6のみを最適化

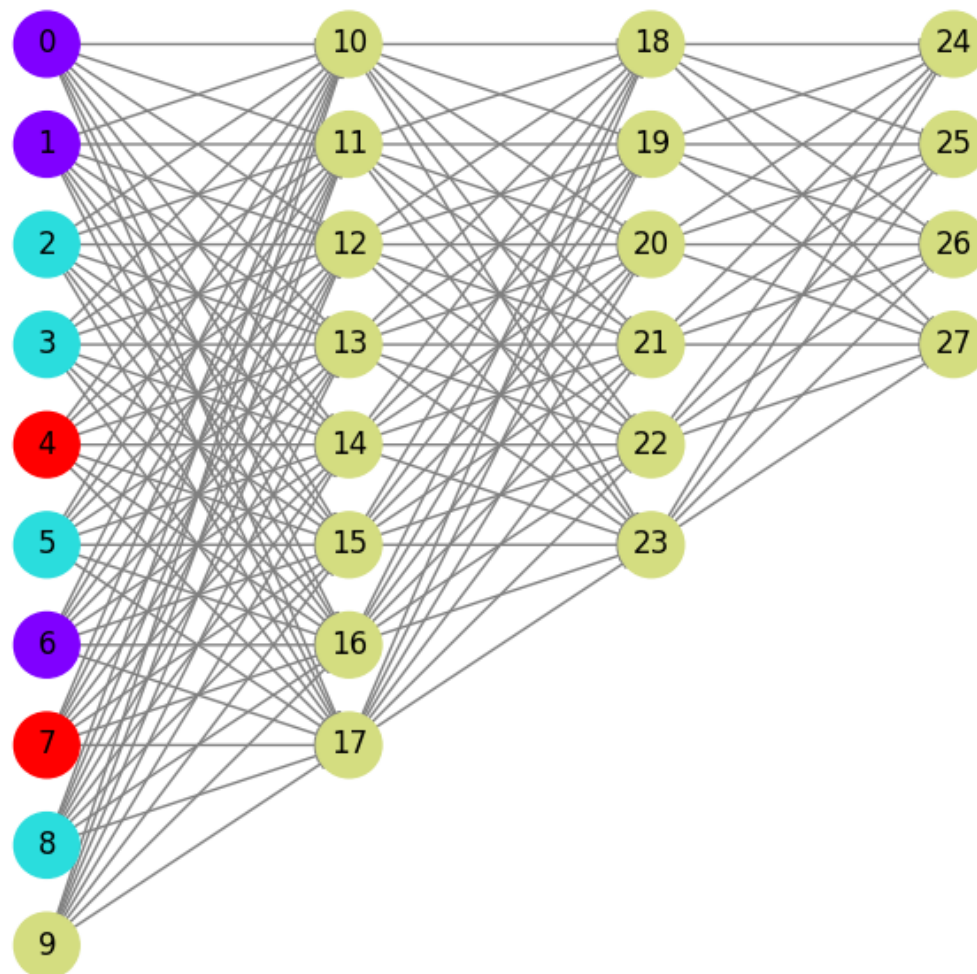
Generation 9900

: Best Fitness =

-4558.9

, Average Fitness =

1668.34314



目次

1. 中間発表のイメージ(提案手法まで)
 - 1.1 研究背景
 - 1.2 研究目的
 - 1.3 提案手法
2. (予備)実験 (今回行ったこと)
 - 2.1 Data-driven
 - 2.2 Graph neural network
 - 2.3 考察
 - 2.4 今後の課題

1. 依存関係の識別→教師データ

未知

クラスタリング（グループ数は指定）

Simplifying Clustering with Graph Neural Networks

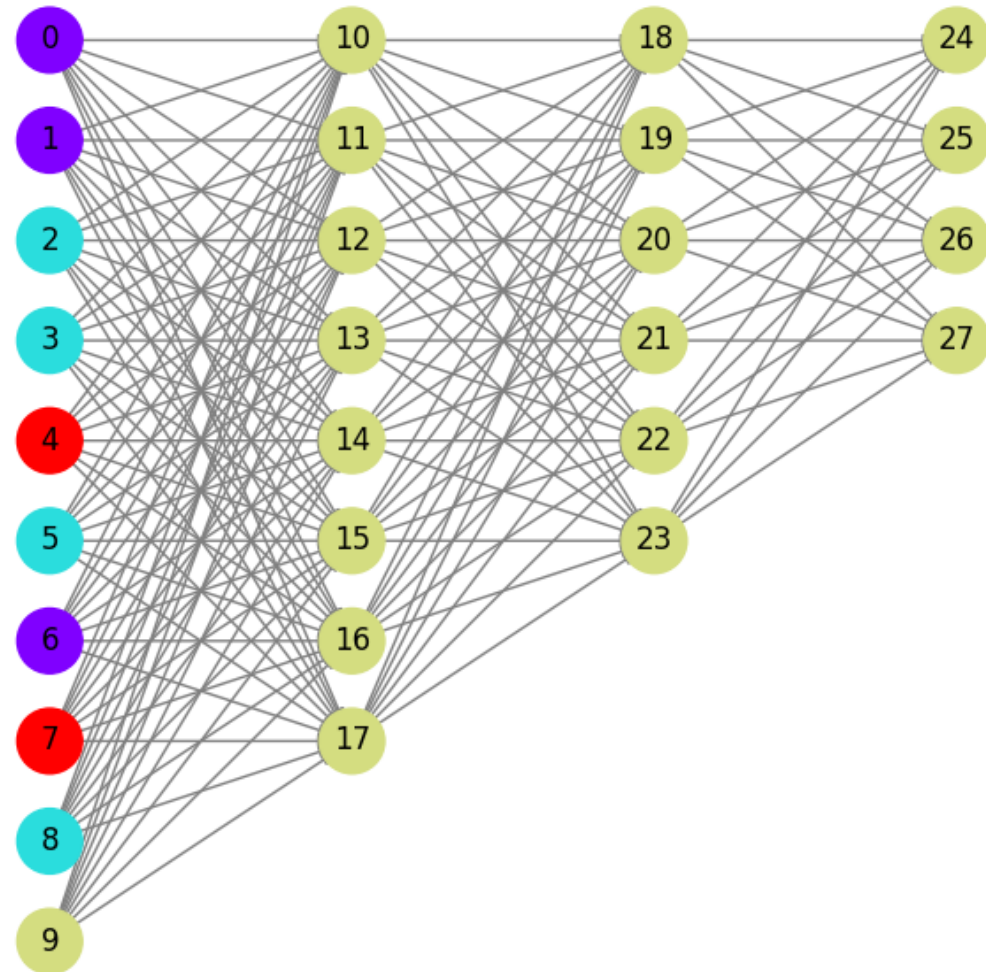
Filippo Maria Bianchi

2. 入力層の特徴ベクトルにおいて個体の選択
ランダム→最良個体

考察2

- 部分最適化
- 繰り返す？
 - 0,1,6を最適化
 - 2,3,5,8を最適化
 - 4,7を最適化
- 0,2,4グループごと？

重要度を決める最適化



目次

1. 中間発表のイメージ(提案手法まで)
 - 1.1 研究背景
 - 1.2 研究目的
 - 1.3 提案手法
2. (予備)実験 (今回行ったこと)
 - 2.1 Data-driven
 - 2.2 Graph neural network
 - 2.3 考察
 - 2.4 今後の課題

今後について

1.部分的に最適化を行なう

すべて最適化 vs 重要部分的に最適化

→より素早い近似解にたどり着く (10次元)または高次元

2.GNNを教師なしのクラスタリングで行う

3.ベンチマーク関数 ZDT[5]で比較

「Infill Criterion Ensemble in Multi-Objective Evolutionary Algorithm for Mixed-Variable Problems」

4.GNNのエッジ結合をNNの構造から自動抽出

5.ML部分の検討

(全結合→RBF)

メタヒューリスティック部分の検討(GA→PSO、個体数)

GNNが使えない? RNFの方が精度がよい?(神野先生)

6.論文読み

[5] (Eckart Zitzler, Kalyanmoy Deb, and Lothar Thiele. Comparison of multiobjective evolutionary algorithms: empirical results. *Evolutionary Computation*, 8(2):173–195, 2000. [doi:10.1162/106365600568202](https://doi.org/10.1162/106365600568202).)