

自己組織化を取り入れた複雑ネットワーク生成法

日大生産工(院) ○寺山 敬佑
日大生産工 山内 ゆかり

1 まえがき

近年注目されている複雑ネットワークには、現実のネットワークの特徴を表現した代表的なモデルとして、スモールワールドネットワークとスケールフリーネットワークがある。

スモールワールドネットワークの生成は、Watts と Strogatz らによってレギュラグラフからの再結合により構成する手法(WS モデル)が提案されている 1)。また、スケールフリーネットワークの生成は、Barabasi と Albert らにより、新規ノードの結合に制約を持たせながらネットワークを成長させる手法(BA モデル)が提案されている 2)。

BA モデルでは現実のネットワークで現れる次数分布がべき則となるスケールフリー性が見られるが、もう一つの現実のネットワークの特徴である、近くのノードと結合されやすいというクラスター性を満たしていない。このことから、ネットワークを成長させてクラスター性の高いスケールフリーネットワークを生成する手法が盛んに研究されてきた。代表的なモデルに頂点コピーモデル 3) 4) 5) 6)、Holme-Kim モデル 7) 8)、適応度モデル 9) 10)、頂点非活性化モデル 11)、階層化モデル 12)などが知られている。

また現実のネットワークはスモールワールド性を示すこと知られている。脳は細胞分裂により成長させながらネットワークを構成し、学習により動的に構造を変化させ、シナプス結合の物理的構造や機能のネットワークでスモールワールド性やスケールフリー性を持つことが知られている。13) 14)

しかし、Watts と Strogatz らが提案した WS モデルのような、再結合によるネットワークはあまり存在しない。

本研究では、新規ノードの結合に自己組織化を取り入れた制約を与え、成長させながらネットワークを構成し、スモールワールドネットワークを生成する方法を提案する。提案手法の自己組織化は大脳皮質の視覚野をモデルにしたKohonenによる自己組織化マップのアルゴリズム15)を基にしている。

提案手法により構成したネットワークと従来の構成法によるネットワークを複雑ネットワークの指標を用いて比較し、スモールワールド性およびスケールフリー性について検討する。

2 ネットワーク特徴量

ネットワークの特徴量について説明する。ネットワークの特徴量としては、クラスター係数、平均頂点間距離、次数分布が挙げられる。これらについて、ネットワークのノード数を N 、平均次数を K とし、説明を行う。

2. 1 クラスター係数

クラスター係数 C とは、自分と繋がっている頂点同士が繋がっているかどうかを表す係数である。クラスターとは群れ、集団といった意味である。クラスター係数は以下の式で求められる。

$$C = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i \quad (1)$$

C_i は i 番目のノードと繋がっているノード同士が結合されている枝の本数 m を、 $k_i \times (k_i - 1) / 2$ で割ったものと定義する。 k_i は i 番目のノードが持つ枝の本数(次数)である。

C_i は次の式で求められる。

$$C_i = \frac{m}{k_i \times (k_i - 1) / 2} \quad (2)$$

A method for generation of complex network based on self-organization

Keisuke TERAYAMA and Yukari YAMAUCHI

2. 2 平均頂点間距離

平均頂点間距離 L は 2 点間最短距離 d_{ij} の全体にわたる平均である。自分への距離は 0 とし、平均には含まない。以上のことより平均頂点間距離は次の式で求められる。

$$L = \frac{1}{N \times (N-1)/2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N d_{ij} \quad (3)$$

3 代表的なネットワーク

複雑ネットワーク研究における代表的なネットワークについて説明を行う。複雑でないネットワークとして、レギュラーグラフ、ランダムグラフ、複雑ネットワークの代表的なモデルとして、スモールワールドネットワーク (WS モデル) 1)、スケールフリーネットワーク (BA モデル) 2)、また成長させながらクラスター性の高いスケールフリーネットワークを生成する頂点非活性化モデル 11) を取り上げる。

3. 1 レギュラーグラフ

レギュラーグラフは、次数が一定であり、グラフの形状が対称もしくは規則的である。本研究では N 個のノードを輪状に並べ、それぞれのノードの左右 $K/2$ 個までのノードと結合を行うことにより生成する。

3. 2 ランダムグラフ

ランダムグラフは、1960 年頃に Erdős らによって体系的に研究されたものである 16)。結合の存在が一定の確率によって決定される。

本研究で用いるランダムグラフは以下のアルゴリズムで生成される。

ノード N 個と確率 p を設定する。確率 p は $0 \leq p \leq 1$ とする。2 つのノードの全ての組み合わせにおいて、確率 p で 2 点を繋ぎ、 $1-p$ で 2 点は繋がれないこととする。 $p=1$ で完全グラフが形成され、 $p=0$ で全てのノードが孤立ノードとなる。

3. 3 スモールワールドネットワーク (WS モデル)

スモールワールドネットワークの生成は、Watts と Strogatz らによってレギュラーグラフからの再結合により構成する手法 (WS モデル) が提案されている。

3. 4 スケールフリーネットワーク (BA モデル)

スケールフリーネットワークの生成は、Barabasi と Albert らにより、新規ノードの結合に次数の大きいノードと優先時に結合する、という制約を持たせながらネットワークを成長させる手法 (BA モデル) が提案されている。

3. 5 頂点非活性化モデル

頂点非活性化モデルは、BA モデルのネットワークの成長と優先選択に加え、ノードの非活性化を考慮する。各ノードは加入時点では活性化状態であり、枝を受け取れるが、ある時点で非活性化状態になり、非活性化状態では永久に枝を受け取れなくなる。

4 提案手法

提案手法のネットワークモデルのアルゴリズムについて説明する。

4. 1 提案手法 1

提案手法 1 は自分と似たノードと結合するものである。アルゴリズムは以下ようになる。

- (1) K 個のノードで完全グラフを作成する。
- (2) N 個のノードに、1 つにつき M 個の属性値を与える。今回は $M=2$ で実験を行う。
- (3) $K+1$ 個目のノードと、ネットワーク内の $1 \sim K$ 個目までのノードとの比較を行う。比較に用いる指標は (2) で与えた属性値である。比較対象のノードとネットワーク内のノードの属性との差が最も小さいノードを勝者とし、 $K+1$ 個目のノードと結合を行う。この作業を $K/2$ 個のノードと結合するまで行う。
- (4) (3) の作業を N 個目のノードまで繰り返す。

以上が提案手法 1 のアルゴリズムである。

4. 2 提案手法 2

提案手法 1 では、追加するノードを既存ノードの属性値の近い順に必要な枝数分結合していたが、提案手法 2 では、結合するノードの選択に属性値の類似度に応じた確率的優先選択を取り入れる。アルゴリズムは以下ようになる。

- (1) K 個のノードで完全グラフを作成する。
- (2) N 個のノードに、1 つにつき M 個の属性値を与える。今回は $M=2$ で実験を行う。
- (3) $K+1$ 個目のノードと、ネットワーク内の $1 \sim K$ 個目までのノードとの比較を行う。比較に用いる指標は (2) で与えた属性値である。比較対象のノードとネットワーク内のノードの属性との差が最も小さいノードを勝者とし、 $K+1$ 個目のノードと結合を行う。この作業を $K/2$ 個のノードと結合するまで行う。

- (4) (3)で結合した勝者ノードと結合しているノードを対象として確率選択により結合を行う。選択確率 $P(i)$ は以下の式で求められる。

$$P(i) = \frac{\text{MAX}_M - d_i}{\sum_{j=1}^{k_w} (\text{MAX}_M - d_j)} \quad (4)$$

MAX_M は $1 \sim K+1$ 個目の属性値の最大値、 d_i は属性値の差、 k_w は勝者ノードの次数である。この作業を $K/2-1$ 個のノードと結合するまで行う。

- (5) (4)の作業を N 個目のノードまで行う。

以上が提案手法2のアルゴリズムである。

5 実験方法

提案手法により生成したネットワークを、従来のネットワーク(レギュラーグラフ、ランダムグラフ、スモールワールドネットワーク(WSモデル)、スケールフリーネットワーク(BAモデル)、頂点非活性化モデル)と比較を行い、スモールワールド性、スケールフリー性を検討する。比較には、複雑ネットワークの特徴を図る指標である、クラスター係数 C 、平均頂点間距離 L を用いる。

ランダムグラフ、スモールワールドネットワーク(WSモデル)、スケールフリーネットワーク(BAモデル)、頂点非活性化モデル、提案手法1、提案手法2は、生成モデルに乱数を使用しているため、 C と L の値には100試行の平均値を採用している。WSモデルの張り替え確率 P は C が大きく L が小さい値を示す標準的な値である0.1を採用した。

6 実験結果及び検討

以下に実験結果を示し検討を行う。

ネットワークの特徴量である、クラスター係数 C 、平均頂点間距離 L による比較を行う。まず、平均次数 $K=12$ と固定し、ノード数 N を変化させ比較を行った。 N が大きくなれば枝の密度が疎となるため、 C が小さく L が大きくなる傾向がある。

表1 $N=100$ の時の C と L の値

| モデル | C | L |
|--------------|--------|--------|
| レギュラーグラフ | 0.6818 | 4.6364 |
| ランダムグラフ | 0.1210 | 2.0812 |
| WSモデル(P=0.1) | 0.5174 | 2.4958 |
| BAモデル | 0.2802 | 2.0802 |
| 頂点非活性化モデル | 0.7934 | 2.2790 |
| 提案手法1 | 0.5822 | 2.4999 |
| 提案手法2 | 0.5870 | 2.1957 |

表2 $N=3600$ の時の C と L の値

| モデル | C | L |
|--------------|--------|----------|
| レギュラーグラフ | 0.6818 | 150.4585 |
| ランダムグラフ | 0.0034 | 3.5685 |
| WSモデル(P=0.1) | 0.5011 | 4.8782 |
| BAモデル | 0.0206 | 3.1707 |
| 頂点非活性化モデル | 0.8017 | 20.2374 |
| 提案手法1 | 0.5363 | 5.1709 |
| 提案手法2 | 0.5500 | 3.8770 |

次に $K=\sqrt{N}$ とし、ネットワークの規模を変えて比較を行った。

表3 $N=100, K=10$ の時の C と L の値

| モデル | C | L |
|--------------|--------|--------|
| レギュラーグラフ | 0.6667 | 5.4545 |
| ランダムグラフ | 0.1008 | 2.2314 |
| WSモデル(P=0.1) | 0.4994 | 2.7034 |
| BAモデル | 0.2542 | 2.1895 |
| 頂点非活性化モデル | 0.7881 | 2.5187 |
| 提案手法1 | 0.5683 | 2.6788 |
| 提案手法2 | 0.6064 | 2.3521 |

表4 $N=3600, K=60$ の時の C と L の値

| モデル | C | L |
|--------------|--------|---------|
| レギュラーグラフ | 0.7373 | 30.4918 |
| ランダムグラフ | 0.0167 | 2.3441 |
| WSモデル(P=0.1) | 0.5401 | 2.7813 |
| BAモデル | 0.0641 | 2.2762 |
| 頂点非活性化モデル | 0.8246 | 3.0887 |
| 提案手法1 | 0.5745 | 3.2093 |
| 提案手法2 | 0.2697 | 2.4039 |

提案手法1、提案手法2の C は、頂点非活性化モデルの値より小さいが、ランダムグラフ、BAモデルの値より遥かに大きく、WSモデルとほぼ同じ値を示している。

提案手法2では K が大きくなるにつれ、 C が小さくなる傾向が見られるが、それでもランダムグラフやBAモデルよりは大きな値を示している。

また、提案手法1、提案手法2の L は、ランダムグラフ、BAモデルの値よりは大きい、WSモデルと比較すると、提案手法1モデルはほぼ同じ値、提案手法2モデルは小さい値を示している。

この結果より、新規ノードの結合に自己組織化の概念を取り入れた制約を持たせることで、成長させながらスモールワールドネットワークを生成することができている。

7 まとめ

6で述べたように、成長させながらネットワークを構成することで、スモールワールドネットワークの特徴を示すネットワークを生成することができた。提案手法2は平均次数 K が小さい場合により大きい C 、小さな L となる傾向が見られ、なおかつ次数分布がべき則に従うネットワークが得られた。

に2次元レギュラーグラフ、2次元スモールワールドネットワーク(2次元WSモデル)の追加がある。今回の2つの提案手法モデルで属性値を2としたのは、属性値を2次元の座標(x, y)と見なせることができ、自分との距離に近いものと結合することとなる。このため、提案手法モデルが2次元レギュラーグラフ、2次元スモールワールドネットワーク(2次元WSモデル)のCとLに近似することが予想される。

また、提案手法によるネットワークを、連想記憶などの手法を用いて、他のネットワークモデルとの比較及び評価を行うことが挙げられる。6で述べたように、成長させながらも、スモールワールドネットワークが実現できた。しかし、提案手法で得られたネットワークの評価は、CとLの値だけで優劣をつけることは難しい。

今後の課題としては、提案したネットワーク生成モデルの評価を、連想記憶などの手法を用いて、他のネットワークモデルとの比較及び評価を行うことが挙げられる。

また、スケールフリーネットワークモデルのような、次数分布に特徴を持っているネットワークモデルなど、新しいネットワーク生成手法の提案も行っていきたい。

「参考文献」

- 1) Watts, D.J. and Strogatz, S.H., Collective dynamics of small-world networks, *Nature*, 393, (1998), pp. 440-442
- 2) Barabasi, A.-L. and Albert, R., Emergence of scaling in random networks, *Science*, 286, (1999), pp. 509-512
- 3) Kleinberg, M. J., Kumar, R., Raghavan, P., Rajagopalan, S. and Tomkins, A.S., The web as a graph: Measurements, models, and methods, *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 1627, (1999), pp. 1-17
- 4) Krapivsky, L.P. and Redner, S., Network growth by copying, *Physical Review E*, Vol. 71, (2005), article No. 036118
- 5) Kumar, R., Raghavan, P., Rajagopalan, S., Sivakumar, D., Tomkins, A.S. and Upfal, E., Stochastic models for the web graph, *Proceedings of the 41st Annual IEEE Symposium on the Foundations of Computer Science*, (2000), pp. 57-65

- 6) Sole, R. V., Pastor-Satorras, R., Smith, E. and Kepler, T.B., A model of large-scale proteome evolution, *Advances in Complex Systems*, Vol. 5, (2001), pp. 43-54
- 7) Holme, P. and Kim, B.J., Growing scale-free networks with tunable clustering, *Physical Review E*, Vol. 65, (2002), article No. 026107
- 8) Vazquez, A., Flammini, A., Maritan, A. and Vespignani, A., Modeling of protein interaction networks, *ComplexUs*, Vol. 1, (2003) pp. 38-44
- 9) Bianconi, G. and Barabasi, A. -L., Competition and multiscaling in evolving networks, *Europhysics Letter*, Vol. 54, (2001), pp. 436-442
- 10) Bianconi, G. and Barabasi, A. -L., Bose-Einstein condensation in complex networks, *Physical Review Letters*, Vol. 86, (2001), pp. 5632-5635
- 11) Klemm, K. and Eguiluz, V.M., Highly clustered scale-free networks, *Physical Review E*, 65, (2003), 036123
- 12) Barabasi, A.-L., Ravasz, E. and Vicse, T., Deterministic scale-free networks, *Physica A*, Vol. 299, (2001), pp. 559-564
- 13) Bassett, D.S. and Bullmore, E., Small-World Brain Networks, *Neuroscientist*, 12(6), (2006), pp. 512-523
- 14) T. Suzuki, and T. Ikeguchi, Self-Organizing Small-World Structure of Neural Networks by STDP Learning Rule, *同志社大学理工学研究報告*, Vol. 49, No. 4, (2009), pp. 200-204
- 15) Kohonen, T., *Self-Organizing Maps*, Springer, (2000)
- 16) Erdős, P. and Rényi, A.: On random graphs, *Publications Mathematicae*, 6, (1959), pp. 290-297