

卒業論文

勾配情報を活用した 粒子群最適化による *な大氣的なパレート解

Chemoinformatics Using Feature Selection and Clustering for
Enzyme Commission Number Prediction in Organic Synthesis

富山県立大学 工学部 情報システム工学科

2120019 柴原壮大

指導教員 奥原 浩之 教授

提出年月: 2024年2月

目次

図一覧	ii
表一覧	iii
記号一覧	iv
第1章 はじめに	1
§ 1.1 本研究の背景	1
§ 1.2 本研究の目的	1
§ 1.3 本論文の概要	2
第2章 制約を考慮した PSO	3
§ 2.1 勾配系を考慮した PSO	3
§ 2.2 制約がある場合の PSO	5
第3章 能力開発のための学習支援システム	8
§ 3.1 接遇マナーと向上のためのアプリ	8
§ 3.2 様々なケースにおける問題自動生成	8
§ 3.3 学習支援における臨場感の提供	8
第4章 提案手法	9
§ 4.1 問題に対する正誤データの蓄積	9
§ 4.2 収集されたデータの傾向と理解度の可視化	9
§ 4.3 能力開発のための教育システムの仕組みの概要	9
第5章 数値実験並びに考察	10
§ 5.1 数値実験の概要	10
§ 5.2 実験結果と考察	10
第6章 おわりに	11
謝辞	12
参考文献	13

圖一覽

表一覽

記号一覧

以下に本論文において用いられる用語と記号の対応表を示す.

用語	記号
LiNGAM における i 番目の観測変数	x_i
LiNGAM における j 番目の観測変数から i 番目の観測変数へのパス係数	b_{ij}
LiNGAM における i 番目の観測変数に対する誤差 (非観測変数)	e_i
主問題における各入力に対する重み	v^T
主問題における各出力に対する重み	u^T
主問題における対象 DMU の評価値	z
CCR モデルにおける DMU _o の入力	x_o
CCR モデルにおける DMU _o の出力	y_o
CCR モデルにおける DMU の入力	X
CCR モデルにおける DMU の出力	Y
双対問題における対象 DMU の評価値	w
入力指向モデルにおける対象 DMU の評価値	θ
入力指向モデルにおける各 DMU に対する重み	λ
出力指向モデルにおける対象 DMU の評価値	η
出力指向モデルにおける各 DMU に対する重み	μ
入力指向モデルにおける対象 DMU の i 番目の入力に対する改善案	\hat{x}_i
入力指向モデルにおける参照集合内の k 番目の DMU の i 番目の入力	x_{ik}
入力指向モデルにおける参照集合内の k 番目の DMU に対する重み	λ
出力指向モデルにおける対象 DMU の j 番目の出力に対する改善案	\hat{y}_j
出力指向モデルにおける参照集合内の k 番目の DMU の j 番目の出力	y_j
出力指向モデルにおける参照集合内の k 番目の DMU に対する重み	μ
提案手法における d 番目の市区町村の i 番目の入力	x_{id}
提案手法における d 番目の市区町村の i 番目の出力	y_{id}
提案手法における d 番目の市区町村に対する重み	λ_d
<i>robust Z-score</i> における正規化後の値	ι
<i>robust Z-score</i> を用いて正規化するデータ集合内の値	x
<i>robust Z-score</i> を用いて正規化するデータ集合	X
<i>robust Z-score</i> を用いて正規化するデータ集合の中央値	$median(x)$
<i>robust Z-score</i> を用いて正規化するデータ集合の正規四分位範囲	$NIQR$
0~1 変換の結果の値	ι'
0~1 変換を行うデータ集合内の値の最大値	$max \iota $

はじめに

§ 1.1 本研究の背景

近年, 教育の場において様々なデジタルトランスフォーメーションが行われており, その重要性が説かれている. デジタルトランスフォーメーションとは, エリック・ストルターマン氏が2004年に提唱した概念であり, ITの浸透が, 人々の生活をあらゆる面でより良い方向に変化させることという定義である [1]. 教育の場で使われているデジタルトランスフォーメーションは以下のようなものがある.

一つ目は, AIドリルである. 東京都千代田区立麴町中学校では, 2018年より数学のAI型ドリル教材「Qubena」を導入している. 生徒の回答から理解度を判断して次の出題を自動選択してくれるもので, 使えば使うほど個別最適化が進み, 児童一人ひとりの進度に応じた学習が可能である.

二つ目は遠隔教育である. 熊本県高森町の一部の小中学校では, テレビ会議システムを活用した遠隔教育を導入している. これにより, 児童や生徒は, 外国語の授業でネイティブの発音指導を受けたり, 遠隔教育のコンテンツを持った専門機関から外部講師を招いて最新かつ専門的な知識・技能に触れる機会を得られたりするようになった. その他, 海外の学校との交流学习や社会教育施設のバーチャル見学, 病気療養児に対する学習指導などにも遠隔教育を取り入れ, 学習の幅の拡大および学習機会の確保を目指している.

三つ目は, 児童生徒ボードである. 大阪市では, 児童生徒ごとに基本情報・生活情報・学習情報を集約した「児童生徒ボード」を作成・共有している. これにより, 児童生徒の状況を多面的に確認でき, よりきめ細やかな個別指導が可能になった. また児童生徒ボードを共有することで学校内における問題を早期発見し, その後の迅速な対応につなげることも期待されている.[2]

以上のように, 近年教育の場において, デジタルトランスフォーメーションが行われ始めているが, まだ広く浸透しているようには見えない.

§ 1.2 本研究の目的

本研究の目的は, マルチエージェントシミュレータを用いて, 医療現場における教育のデジタルトランスフォーメーションを行い, 教育のさらなる効率化, 発展を目指す. 今回用いるマルチエージェントシミュレータは, FlexSimというソフトウェアである. FlexSimは, 製造ラインや加工プロセス, 物流倉庫, マテリアルハンドリングなどのシミュレーション

モデルを非常に軽量の 3D グラフィックで構築し、モノ・ヒトの流れを計算できるソフトウェアである [3]。FlexSim には、医療モードが存在するので、それを用いる。本研究では、

§ 1.3 本論文の概要

本論文は次のように構成される。

第 1 章 本研究の背景と目的について説明する。背景では、昨今における、教育におけるデジタルトランスフォーメーションの例について説明している。目的では、医療分野に対する、マルチエージェントシミュレータを用いたデジタルトランスフォーメーションについて述べている。

第 2 章

第 3 章

第 4 章

第 5 章

第 6 章 本論文における前章までの内容をまとめつつ、本研究で実現できたことと今後の展望について述べる。

制約を考慮したPSO

§ 2.1 勾配系を考慮したPSO

群知能 (Swarm Intelligence) は、鳥や魚、アリのコロニーなどの自然界の群れの行動に基づく最適化手法である。粒子群最適化 (Particle Swarm Optimization: PSO) はその一つであり、ケネディによって社会的行動に基づいて開発された並列進化計算技術である [?] [?]. PSO は、群れの中の各粒子の最良の情報 (pbest) と集団全体の最適値 (gbest) を用いて、探索を行う確率的最適化手法であり、その収束特性には理論的根拠が不足している。本研究では、PSO と勾配法を組み合わせたハイブリッド動的システムを提案し、より良い最適解を求めるための新しいアプローチを提示する。PSO に勾配法を組み込むことで、連続 PSO アルゴリズムの精度を向上させ、グローバルな情報に基づいた補間探索を実現する。PSO の基本的な更新式は以下の通りである：

$$x_p^{k+1} = x_p^k + v_p^{k+1} \quad (2.1) \quad (2.1)$$

$$v_p^{k+1} = wv_p^k + c_1r_1(x_{pbest} - x_p^k) + c_2r_2(x_{gbest} - x_p^k) \quad (2.2) \quad (2.2)$$

ここで、 x_d^k は粒子の位置、 v_d^k は速度、 w は慣性係数、 c_1 と c_2 は学習係数、 r_1 と r_2 はランダムな数値である。PSO の速度ベクトルは、 $pbest$ に向かうベクトル、 $gbest$ に向かうベクトル、そして過去の進行方向に基づくベクトルの合成によって決定される。

PSO の更新式を力学系モデルとみなし、その連続化を試みると、

$$\frac{dx_p(t)}{dt} = c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} [F_p(x_p(\tau), \tau) + C(x_p(\tau), \tau)] d\tau \quad (4.22) \quad (4.22)$$

$$\frac{d^2x_p(t)}{dt^2} + a \frac{dx_p(t)}{dt} = c [F_p(x_p(t), t) + C(x_p(t), t)] \quad (4.23) \quad (4.23)$$

またそれぞれの関数 F_p と C は以下のようになる。

$$F_p(x_p, t) = c_1(x_{pbest} - x_p) \quad (4.24) \quad (4.24)$$

$$C_p(x_p, t) = c_2(x_{gbest} - x_p) \quad (4.25) \quad (4.25)$$

また、2 階微分方程式で表される連続時間系モデルの状態変数表現を

$$u_p(t) = x_p(t), \quad v_p(t) = \frac{du_p(t)}{dt} + au_p(t) \quad (2.3) \quad (2.3)$$

とにおいて導入すると、離散時間系に対応した連続系の内部状態表現モデルは、

$$\frac{du_p(t)}{dt} = -au_p(t) + v_p(t) \quad (4.26)$$

$$\frac{dv_p(t)}{dt} = c[F_p(u_p(t), t) + C(u_p(t), t)] \quad (4.27)$$

連続型 PSO アルゴリズム (Continuous Particle Swarm Optimization; CPSO) について述べる。ベクトル y と $\text{sgn}(y)$ の要素によって与えられる対角要素を持つ対角行列を $\text{diag}[y]$ とする。ここで、 $\text{sgn}(y) = 1$ の場合は $y > 0$ であり、 $\text{sgn}(y) = -1$ の場合は $y < 0$ とする。したがって、正の定数であると仮定すると、最小化のために x_p の進化を近似することが提案される。また、CPSO の安定性解析も議論されている [?].

状態変数 x_p, v_p, x_{pbest} はベクトルではなく、以前に定義された適切な次元の行列であるため、上記の表記法は標準状態空間表記法ではない。また以下に CPSO の位置と速度の更新式 (式 (4.7), 式 (4.8)) とアルゴリズムについて示す。問題解決の実行可能領域を考え、行列による連続時間 PSO 動力学を示す (式 (4.9), 式 (4.10), 式 (4.11))。

CPSO アルゴリズム

1. x_p, v_p とパラメータ c_1, c_2, β, a の初期値を設定する。
2. x_{pbest}, x_{gbest} の初期値を導出する。
3. \dot{v} を計算して、 v_p を更新する。
4. x_p を更新して X_{db}, X_{gb} を評価する。
5. 収束すると仮定した場合は終了し、それ以外の場合は 3 から繰り返す。

$$\dot{x} = v_p \quad (4.7)$$

$$\dot{v} = -\beta v_p + c_1(x_{pbest} - x_p) + c_2(x_{gbest} - x_p) \quad (4.8)$$

$$x_{pbest} = a(x_p - x_{pbest}) [I_n + \text{diag}[\text{sgn}(F(x_{gbest}) - F(x_p))]] \quad (4.9)$$

$$x_{gbest} = x_{pbest} Q_j \quad (4.10)$$

$$j = \arg \min_{0 < i \leq n} (f(x_{pbesti})) \quad (4.11)$$

本節では CPSO に勾配情報の要素を加えた勾配 PSO について解説する。PSO の応用法である CPSO の応用法であり、行列 x_p, y_p に加えて z_p を加え、いくつかのパラメータを与えて再急降下法を用いる。以下は z_p を表す式である。

$$z_p = c_1 i(x_{pbest} - x_p) + c_2(x_{gbest} - x_p) + c_3(x_u) \quad (4.12)$$

以下の条件を考慮する (式 (4.13))。 X_0 は初期位置行列である。

$$x_p = x_0 + \int_0^t v(s)ds \quad (4.13)$$

よって勾配 PSO の更新式を以下に示す。ここでは $x_p, v_p, x_{pbest}, x_{gbest}$ の次元は簡略化のため省略する。

$$\dot{x} = v_p \quad (4.14)$$

$$\dot{v} = -\beta v_p + z_p \quad (4.15)$$

$$\dot{z} = c_1(x_{pbest} - \dot{x}) + c_2(\dot{x}_{gbest} - \dot{x}) + c_3(\dot{x}_u) \quad (4.16)$$

$$x_{pbest} = a(x_p - x_{pbest}) [I_n + \text{diag}[\text{sgn}(F(x_{gbest}) - F(x_p))]] \quad (4.17)$$

$$x_{gbest} = x_{pbest} Q_j, \quad j = \arg \min_{0 < i \leq n} f(x_{pbest i}) \quad (4.18)$$

β, c_1, c_2, c_3 などの実数は、PSO と勾配情報を調整するために重み付けするパラメータである。 x_u はニューラルネットワークのダイナミクスに由来する新しい行列である。 x_u は以下で定義する。

$$x_{u_i} = -C \sum_{i=1}^n \frac{\partial E(y_p i(t))}{\partial y_p i} \frac{\partial f(x(t))}{\partial x p_i} \quad (4.19)$$

$$\dot{x}_p i = -\beta x_p i(t) + z_p i(t) \quad (4.20)$$

$$y_p i(t) = f(x_p i(t)) \quad (4.21)$$

§ 2.2 制約がある場合の PSO

次に提案手法であるハイブリッド PSO について解説する。PSO の応用法である連続時間 PSO アルゴリズムの応用法であり、勾配情報を加えることにより、精密な探索を行うことを狙いとしている。

勾配情報を加えると、モデルは以下のようになる。

$$\frac{dx_p(t)}{dt} = c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} [F_p(x_p(\tau), \tau) + C(x_p(\tau), \tau) - \nabla E(x_p(\tau), \tau)] d\tau \quad (4.28)$$

$$\frac{d^2 x_p(t)}{dt^2} + a \frac{dx_p(t)}{dt} = c [F_p(x_p(t), t) + C(x_p(t), t) - \nabla E(x_p(t), t)] \quad (4.29)$$

またそれぞれの関数は以下のようになる。

$$F_p(x_p, t) = c_1(x_p best - x_p) \quad (4.30)$$

$$C_p(x_p, t) = c_2(x_g best - x_p) \quad (4.31)$$

$$\nabla E(x_p, t) = c_3 \frac{\partial E(x_p, t)}{\partial x_p} \quad (4.32)$$

解説したままのモデルでは無制約なので、制約条件に対応したモデルである上下限制約連続時間 PSO モデルを以下の式に示す。

上下限制約付最適化問題は次のように表される。上下限制約領域内に問題の変数を変換して無制約化した新たな変数空間に無制約 PSO モデルを適用した「変数変換モデル」を導入する。非線形変数変換モデルを作成するために、

$$x_i = f_i(y_i) = \frac{q_i + p_i e^{-y_i}}{1 + e^{-y_i}} \quad (4.35)$$

とおく。この変換式を制約条件付き問題に代入して変数 x を消去すると、

$$\min E(f(y)) \quad (4.36)$$

を得ることができる。よって式 (4.29) に対応させると、

$$\frac{d^2 y_p(t)}{dt^2} + a \frac{dy_p(t)}{dt} = c[F_p(y_p(t), t) + C_p(y_p(t), t) - \nabla E(y_p(t), t)] \quad (4.37)$$

またそれぞれの関数は以下のようになる。

$$F_p(y_p, t) = c_1(y_p best - y_p) \quad (4.38)$$

$$C_p(y_p, t) = c_2(y_g best - y_p) \quad (4.39)$$

$$\nabla E(y_p, t) = c_3 \frac{\partial E(y_p, t)}{\partial y_p} \quad (4.40)$$

次にプログラムへの実装を考えた時に、連続式のままではプログラムに実装することが難しいので、オイラー法を用いて連続式を離散化し非線形変数変換モデルの離散化 PSO を作成する。それぞれに対応する式を以下に示す。

$$x_p(k+1) = (1 - a\Delta T)x_p(k) + \Delta T v_p(k) \quad (4.41)$$

$$v_p(k+1) = v_p(k) + c\Delta T [F_p(x_p(k), k) + C_p(x_p(k), k) - \nabla E(x_p(k), k)] \quad (4.42)$$

$$F_p(k, k) = c_1(x_p best - x_p(k)) \quad (4.43)$$

$$C_p(k, k) = c_2(x_gbest - x_p(k)) \quad (4.44)$$

$$\nabla E(k, k) = c_3 \frac{\partial E(k, t)}{\partial k} \quad (4.45)$$

$$x_pbest = \arg \min (E(x_p(l)) \mid l = 0, \dots, k) \quad (4.46)$$

$$x_gbest = \arg \min (E(x_pbest) \mid l = 0, 1, \dots, k) \quad (4.47)$$

$$x_p(k) = f(x_p(k)) = \frac{q_i + pie^{-x_p(k)}}{1 + e^{-x_p(k)}}; \quad k = 1, \dots, n \quad (4.48)$$

S

能力開発のための学習支援システム

- § 3.1 接遇マナーと向上のためのアプリ
- § 3.2 様々なケースにおける問題自動生成
- § 3.3 学習支援における臨場感の提供

提案手法

§ 4.1 問題に対する正誤データの蓄積

§ 4.2 収集されたデータの傾向と理解度の可視化

適切なフィードバックを行うには、データの分析が必要になるため、収集されたデータの傾向と理解度の可視化が重要になる。そこで、それぞれの方法について説明する。

データの傾向を可視化する方法としては、ソートによるブロック表示法というものがある。まず、横軸を受験者、縦軸を問題とし、右から点数の高い順として並べる。正解を白色とし、不正解の場合は、それぞれの選択肢ごとに色を決め、その色とする。このままでは、全体の傾向をつかむことは困難であるため、ソートを行い、全体のデータの傾向を見やすくするというものである。[]

理解度を可視化する方法としては、

§ 4.3 能力開発のための教育システムの仕組みの概要

本研究で提案するシステムの概要について説明する。初めに FlexSim を用いて、処方箋問題を提示するシステムを作る。このシステムを用いて、問題を解いてもらうことによって、正誤のデータを取得し、CSV として蓄積する。そのデータを Python を用いて適切に処理することによって明らかになった、回答の特徴をもとに、適切に回答者にフィードバックを行い、学習の効率化を図るというものである。

数値実験並びに考察

§ 5.1 数値実験の概要

§ 5.2 実験結果と考察

おわりに

謝辞

本研究を遂行するにあたり，多大なご指導と終始懇切丁寧なご鞭撻を賜った富山県立大学工学部電子・情報工学科情報基盤工学講座の奥原浩之教授，António Oliveira Nzinga René 講師に深甚な謝意を表します．また，システム開発および数値実験にあたり，ご助力いただいた富山県立大学電子・情報工学科3年生の島部達哉氏に感謝の意を表します．最後になりましたが，多大な協力をしていただいた研究室の同輩諸氏に感謝致します．

2022 年 2 月

長瀬 永遠

参考文献

- [1] 杉谷和哉, ”行政事業レビューにおける EBPM の実践についての考察”, 日本評価学会, Japanese journal of evaluation studies, Vol. 21, No. 1, pp. 99-111, 2021.
- [2] 中泉拓也, ”英国の EBPM (Evidence Based Policy Making) の動向と我が国への EBPM 導入の課題”, 関東学院大学経済経営研究所年報, Vol. 41, pp. 3-9, 2019.
- [3] 井伊雅子, 五十嵐中, ”新医療の経済学: 医療の費用と効果を考える”, 日本評論社, 2019.
- [4] Shohei Shimizu, Takanori Inazumi, Yasuhiro Sogawa, ”DirectLiNGAM: A Direct Method for Learning a Linear Non-Gaussian Structural Equation Model”, Journal of Machine Learning Research, Vol. 12, pp. 1225-1248, 2011.
- [5] 末吉俊幸, ”DEA-経営効率分析法-”, 朝倉書店, 2001.
- [6] 国土交通省国土地理院, ”GIS とは”, 閲覧日 2022-02-08, <https://www.gsi.go.jp/GIS/whatisgis.html>.
- [7] 佐藤主光, ”税財政分野における EBPM の基礎と活用”, 閲覧日 2022-02-08, https://www.ipp.hit-u.ac.jp/satom/lecture/localfinance/2019_local_note07.
- [8] 内閣府, ”内閣府における EBPM への取組”, 閲覧日 2022-02-08, <https://www.cao.go.jp/others/kichou/ebpm/ebpm.html>.
- [9] esri ジャパン, ”GIS (地理情報システム) とは”, 閲覧日 2022-02-08, <https://www.esri.com/getting-started/what-is-gis/>.
- [10] 国土交通省国土地理院, ”基盤地図情報の利活用事例集”, 閲覧日 2022-02-08, <https://www.gsi.go.jp/common/000062939>.
- [11] esri ジャパン, ”東日本大震災対応における政策形成支援に GIS を活用”, 閲覧日 2022-02-08, <https://www.esri.com/industries/case-studies/35859/>.
- [12] 田中貴宏, 佐土原聡, ”都市化ポテンシャルマップと二次草原潜在生育地マップの重ね合わせによる二次草原消失の危険性の評価: 一福島県旧原町市域を対象として”, 環境情報科学論文集, Vol. 23, pp. 191-196, 2009.
- [13] 坪井利樹, 西田佳史, 持丸正明, 河内まき子, 山中龍宏, 溝口博, ”身体地図情報システム”, 日本知能情報ファジィ学会誌, Vol. 20, No. 2, pp. 155-163, 2008.
- [14] 杉原豪, 塚井誠人, ”統計的因果探索による社会基盤整備のストック効果の検証”, 土木学会論文集 D3 (土木計画学), Vol. 75, no.6, pp. 583-589, 2020.
- [15] Dentsu Digital Tech Blog, ”Google Colab で統計的因果探索手法 LiNGAM を動かしてみた”, 閲覧日 2022-02-08, <https://note.com/dd.techblog/n/nc8302f55c775>.

- [16] 藤井秀幸, 傅靖, 小林里佳子, ”データ包絡分析を用いたふるさと納税の戦略提案-K市のふるさと納税への適用事例-”, 日本経営工学会論文誌, Vol. 71, No. 4, pp. 149-172, 2021.
- [17] 刀根薫, ”包絡分析法 DEA”, 日本ファジィ学会誌, Vol. 8, No. 1, pp. 11-14, 1996.
- [18] 金成賢作, 篠原正明, ”DEA における入力指向と出力指向の比較 (その 1) ”, 日本大学生産工学部第 42 回学術講演会, 2009.
- [19] 日本オペレーション・リサーチ, ”第 4 章 包絡分析-入力と出力と”, 閲覧日 2022-02-08, <http://www2.econ.tohoku.ac.jp/~ksuzuki/teaching/2006/ch4>.
- [20] pork_steak, ”folium 事始め”, 閲覧日 2022-02-08, https://qiita.com/pork_steak/items/f551fa09794831100faa.
- [21] 保母敏行ほか, ”日本分析学会における標準物質の開発”, 日本分析化学会誌, vol. 57, No. 6, pp. 363-392, 2008.
- [22] 射水市役所, ”総合戦略-射水市”, 閲覧日 2022-02-08, <https://www.city.imizu.toyama.jp/appupload/EDIT/054/054185>.
- [23] 射水市役所, ”共通課題-射水市”, 閲覧日 2022-02-08, <https://www.city.imizu.toyama.jp/appupload/EDIT/024/024383>.

