

# 適応的回転ゲートと局所探索を用いた 量子ビット進化アルゴリズムによる TGNN の説明手法

小原 陸哉<sup>†</sup> 小島 豊<sup>†</sup> 佐々木勇和<sup>†</sup>

<sup>†</sup> 大阪大学大学院情報科学研究科 〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-5

E-mail: †{ohara.rikuya,kojima.yutaka,sasaki}@ist.osaka-u.ac.jp

**あらまし** 時間グラフニューラルネットワーク (TGNN) は動的グラフにおけるイベントの予測に優れる一方、その判断根拠が不透明であるという課題がある。そこで、モデルの予測の根拠となる部分グラフを特定して提示する説明手法が求められる。TGNN の説明生成手法である既存手法 QIEA-TGX は、量子ビット表現に基づく進化アルゴリズムを用いることで、広大な探索空間においても多様性を維持しつつ効率的に探索が可能である。この手法のさらなる精度向上を図るため、適応的回転行列と局所探索による新たな手法 QIEA-TGX+ を提案する。実験では四つの実データセットを用いて、六つのベースライン手法と比較を行い、結果として、提案手法は既存手法と比較し、事実説明では約 0.81%、反実仮想説明では約 1.14%の説明精度の向上を達成したことを示す。

**キーワード** TGNN, 説明手法, QIEA-TGX

## 1 はじめに

時系列ネットワーク (Temporal Network) とは、構造と特性が時間の経過とともに変化するネットワークである [1]。システムの構成要素を表すノード集合と、ノード間の相互作用を表すリンク集合という二つの主要素で構成される。時系列ネットワークでは、時間の経過とともに、新たなノードやノード間のリンクの発生が起り、ある時刻にリンクが発生する事象を「イベント」として表現する。こうした動的特性に基づき、ネットワーク内の将来のリンクを予測する「リンク予測」は、ソーシャルネットワーク [2] や通信ネットワーク [3]、交通予測 [4,5]、知識グラフ [6,7] といった様々な分野への応用が可能である。しかし、従来のグラフニューラルネットワーク (GNN) が扱うことのできるグラフは静的グラフに限定されており、動的グラフを扱うことのできる新たな学習モデルが必要となった。

その問題を解決するため、時間グラフニューラルネットワーク (TGNN) が提案された [8]。TGNN は、GNN を拡張し、時間的な依存関係を学習することで動的なノード、エッジ表現の学習を可能にした深層学習モデルであり、システム内の空間的な依存関係と時間的な変化の両方を捉えることが可能である [8]。TGNN は時間グラフにおけるリンク予測やノード分類といったタスクにおいて高い性能を発揮する。そして、その予測や分類の根拠を提示する説明可能性は、TGNN の重要な要素である。これは、TGNN の説明可能性は TGNN モデルを実世界に展開する際の信頼性に関わり、また、モデルの透明性が高いとシステム内の動的な依存関係を識別しやすくなるためである。したがって、これまで様々な TGNN の説明手法が提案されてきた [9-11]。

QIEA-TGX は、量子ビット表現に基づく進化アルゴリズムである Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm (QIEA) [12] を用いた TGNN の説明手法である [13]。TGNN における説

明手法は、時間グラフの複雑性のために計算コストが高くなりやすいが、QIEA-TGX はこの問題に対する効率的な解法を提供する。QIEA-TGX は量子ビットによって個体表現を行うため、一度に複数の解を表現可能であり、同時に局所最適解を減らすことが可能である。作成された説明グラフを TGNN に入力して評価値を取得し、その評価値に基づいて量子ゲートによる量子ビットの更新を繰り返し、説明ごとの最良の解を探索する。また、探索時にはターゲットイベントの 1hop 近傍を先に評価し、不要な 2hop 近傍を削減して評価するため、不要な探索を削減し、近傍イベントのより適切な評価を可能とする。この大域的かつ効率的な探索能力により、QIEA-TGX は、実世界のデータセットを用いた実験において、最先端のベースラインと比較し、説明の忠実度の向上を達成した。

しかし、QIEA-TGX には主に二つの課題が存在する。一つ目は、量子ビットの更新時に用いる回転ゲートの回転角の大きさが固定されている点である。更新幅が毎回同じ大きさだと、グラフに応じた最適更新ができず、最適解への収束が難しい。二つ目は、QIEA の大域的な探索後でも、存在確率が「0」と「1」の間で揺れ動き、必要性がうまく確定しなかったイベントが存在することがある点である。このように QIEA では決定できなかったイベントに対しては、別の機構でその必要性を決定させる必要がある。

本研究では、QIEA-TGX のさらなる説明精度向上を目的として、QIEA-TGX+ を提案する。QIEA-TGX+ には、前述した二つの課題を解決するための二つの改良が含まれる。一つ目は、適応的な探索を実現する Adaptive Rotation Gate Operator (ARGO) 機構の導入である。ARGO は、QIEA では固定されていた回転ゲートの回転角を、その時点の個体群の評価値に基づいて動的に調整する機構である [14]。新しく得られた解が最適解に近い場合、回転角は細分化され、遠い場合、探索空間をより深く探索するため、回転角を大きくする。現在の解と最適解に基づいて回転角を調整するため、説明対象のイベントである

ターゲットイベントに対して、より適した収束を促進できる。また、これらの角度は最小値と最大値の間で固定されるため、アルゴリズムの発散や早期収束も防ぐことができる。

二つ目は、QIEA の探索後に得られた暫定最良解に対し、局所探索を行う二段階の探索機構である。QIEA の大域的な探索後でも必要性がうまく確定しなかったイベントに対し、各イベントの存在確率を反転させ、説明精度が上昇するような組み合わせを探索する。QIEA の探索後に局所探索を行うような、二段階の探索機構に設計することで、QIEA では必要性の判定が困難だったイベントの選別精度が向上し、全体的な説明精度の向上が期待できる。

実験では、四つの実データセット (Wikipedia, Reddit, MovieLens, Enron) を用いて、提案手法 QIEA-TGX+ と、六つのベースライン手法 (random, T-GNNExplainer [9], GreeDy [11], PGExplainer [15], GA-TGX [13], QIEA-TGX [13]) との比較を行う。評価方法は、存在するイベント、存在しないイベントに対し、事実説明および反実仮想説明を個別に実施し、説明の寄与度 (fidelity)、実行時間を計算する。結果として、既存手法と比較し、事実説明では約 0.81%、反実仮想説明では約 1.14% の説明精度の向上を達成したことを示す。

## 2 関連研究

### 2.1 時間グラフニューラルネットワーク

時間グラフは、離散時間動的グラフ (DTDG) と連続時間動的グラフ (CTDG) の二つに分けることができる [1]。DTDG は、時間グラフをタイムスタンプ付きのスナップショット集合に簡略化し、連続的な時空間を離散的なタイムスタンプに変換する。CTDG は、時空間を離散化せず、グラフをタイムスタンプ付きのイベントのリストで表し、時系列ネットワークの時間的連続性を維持する。本研究における時間グラフは CTDG を対象とする。

CTDG モデルでは、イベントや履歴ノード情報を近傍のノードから集約してノード埋め込みを更新する手法が主流である。代表的な手法として、自己注意機構により時間情報を集約する TGAT [16] や、履歴情報を保持するメモリモジュールを導入した TGN [17] が挙げられる。近年の研究では、これらの手法の効率化や大規模言語モデル (LLM) への応用といった試みが行われている。DG-Mamba [18] は、状態空間モデル (Mamba) を導入することで TGNN の課題である計算コストの削減を図った CTDG モデルである。計算負荷の高い Transformer の代わりに Mamba を用いることで、時間計算量を二次から線形へと削減できる。LLM4DyG [19] は、LLM と動的グラフを組み合わせたベンチマークであり、LLM の推論能力を使って動的グラフの時空間パターンを解釈させる仕組みを提案している。

### 2.2 グラフニューラルネットワークの説明手法

GNN の説明の種類は、事実説明と反実仮想説明の大きく二つに分類できる [20]。事実説明は、予測に最大の影響を与えるノード特徴量または部分グラフを見つけることを目指す。一方、

反実仮想説明は、モデルの予測を覆す、入力グラフへの最小の変更を見つけることで説明を提供する。

事実説明の説明手法である GNNExplainer [21] は、入力の一部を変化させ予測出力を観察することで、予測に最大の影響を与える部分グラフを見つける。反実仮想説明の説明手法である CF-GNNExplainer [22] は、摂動後の反実仮想グラフの予測精度と、元のグラフとの距離を考慮した損失関数を最適化することで説明を生成する。また、動的グラフに対して用いられる説明手法として、T-GNNExplainer [9] が挙げられる。T-GNNExplainer は静的グラフ用の GNNExplainer を TGNN に拡張した事実説明手法であり、モンテカルロ木探索を用いて重要なイベント集合を探索する。また、近年提案された TempME [10] は予測に最も寄与する頻出パターンを抽出することで、より解釈性の高い説明を提供する。さらに、近年の研究では、生成 AI 技術の応用が進んでいる。Graph Diffusion Counterfactual Explanation [23] は、拡散モデル (Diffusion Model) を用いてグラフのデータ分布を学習し、より自然な反実仮想グラフを生成する。LLM-GCE [24] は、グラフ説明手法と LLM を統合し、予測の根拠やグラフの構造変化を自然言語で説明させる試みを提案している。このように、最近の生成 AI 技術の進歩により、説明手法も新たな進展を見せている。

### 2.3 Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm

Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm (QIEA) は、量子ビットや状態の重ね合わせといった量子コンピューティングの概念と原理に基づいた進化アルゴリズムである [25]。進化アルゴリズムにおける各個体を量子ビットによる重ね合わせ状態で表現することで、広大な探索空間においても多様性を維持し、効率的に探索が可能である。

QIEA アルゴリズムには、様々な改良が行われている。ARGO [14] は、心音信号から雑音を除去するフィルタの係数を最適化するために QIEA に導入された新たな手法であり、解の評価値に基づいて、量子ゲートの回転角を動的に調整する。最適解に近いときは細かく探索し、遠いときは広く探索するように角度を変えることで、最適な収束が可能になる。QIOA [26] は、QIEA にトンネル効果や量子もつれなどの量子力学的現象を組み込んだ手法である。トンネル効果に基づき、「エネルギー障壁」を透過して向こう側へ移動する確率関数を導入し、局所解からの脱出能力を強化したり、量子もつれを通じて、ある個体が良い解を見つけると、他の個体もその情報を踏まえた動きに調整され、効率的な探索を可能になるなど、QIEA の性能向上に成功している。

また、最新の研究では、その汎用性から QIEA は様々な場面に適用されている。CNN モデルのハイパーパラメータチューニングでは、QIEA は従来の遺伝的アルゴリズムやベイズ最適化を上回る精度と収束速度を達成した [27]。ビッグデータ解析においても、初期段階で多様な組み合わせを探索し徐々に有望なサブセットに収束する挙動が極めて相性がいいとされ、QIEA を用いた手法が、様々な高次元データセットにおいて特徴数を大幅に削減しつつ、分類精度を向上させた [28]。

### 3 事前知識

#### 3.1 時間グラフと時間グラフニューラルネットワーク

連続時間動的グラフ (CTDG) は,  $G = (\mathcal{N}, \mathcal{E})$  と表せる. ここで,  $\mathcal{N}$  と  $\mathcal{E} = \{e_1, e_2, \dots, e_T\}$  はそれぞれノードとイベントの集合を表す. 各イベント  $e_i = (u_i, v_i, t_i)$  は, タイムスタンプ  $t_i$  に発生する, ソースノード  $u_i$  からターゲットノード  $v_i$  へのインタラクションを表す. 時間グラフニューラルネットワーク (TGNN) におけるリンク予測は, グラフ  $G^k = (\mathcal{N}^k, \mathcal{E}^k)$  ( $\mathcal{E} = \{e_1, e_2, \dots, e_{k-1}\}$ ) から, 与えられたリンク  $e_k$  の発生を予測することを目的としている. 時刻  $t_k$  までの時間グラフ  $G^k$  内の全イベント集合  $\mathcal{E}^k$  から, ターゲット  $e_k$  の近傍に存在するイベント集合  $\mathcal{E}^c$  ( $\mathcal{E}^c \subset \mathcal{E}^k$ ) を抽出し, ターゲット  $e_k$  と  $G^c$  を学習済みモデル  $f$  に入力することで, 予測確率  $Y_k = f(G^c)[e_k]$  を得る.

#### 3.2 問題定義

TGNN のリンク予測における説明では, 予測の根拠となる重要なイベントを含む説明グラフ  $G^e = (\mathcal{N}^e, \mathcal{E}^e)$  を特定することを目的としている. 説明には事実説明と反事実説明があり, 対象イベントは存在する場合と存在しない場合がある. したがって, 説明には四つの種類がある. 時系列グラフ  $G^c \subseteq G^k$ , 対象イベント  $e_k$ , TGNN モデル  $f$ , sparsity  $\phi \in (0, 1)$  が与えられた場合, 以下の  $G^e$  を特定することを目的とする.

- 存在するイベントの事実説明:  

$$\text{maximizes } f(G^e)[e_k] \text{ subject to } \frac{|\mathcal{E}^e|}{|\mathcal{E}^c|} \leq \phi$$
  - 存在しないイベントの事実説明:  

$$\text{minimizes } f(G^e)[e_k] \text{ subject to } \frac{|\mathcal{E}^e|}{|\mathcal{E}^c|} \leq \phi$$
  - 存在するイベントの反事実説明:  

$$\text{minimizes } f(G^c \setminus G^e)[e_k] \text{ subject to } \frac{|\mathcal{E}^c \setminus \mathcal{E}^e|}{|\mathcal{E}^c|} \leq \phi$$
  - 存在しないイベントの反事実説明:  

$$\text{maximizes } f(G^c \setminus G^e)[e_k] \text{ subject to } \frac{|\mathcal{E}^c \setminus \mathcal{E}^e|}{|\mathcal{E}^c|} \leq \phi$$
- ここで,  $G^c \setminus G^e = (\mathcal{N}^c, \mathcal{E}^c \setminus \mathcal{E}^e)$  である. sparsity  $\phi$  は説明グラフに使用するイベント数を制限するために設定し, 元グラフのイベント集合  $\mathcal{E}^c$  内のイベントと  $\phi$  の積の値が選択可能な最大イベント数である.

事実説明は, 元の予測結果を再現する最小限の部分グラフを説明グラフ  $G^e$  として提示する. 存在するイベントに対する説明の場合, 予測値を最も高く出力可能な説明グラフ  $G^e$  を探索する. 存在しないイベントに対する説明の場合, 予測値を最も低く出力可能な説明グラフ  $G^e$  を探索する.

反事実説明は, 入力に対する最小限のイベント削除によって, 予測が覆るような部分グラフを説明グラフ  $G^e$  として提示する. 存在するイベントに対する説明の場合, イベントの削除によって予測値を最も低く出力する説明グラフ  $G^e$  を探索する. 存在しないイベントに対する説明の場合, イベントの削除によって予測値を最も高く出力する説明グラフ  $G^e$  を探索する.

#### 3.3 QIEA-TGX

QIEA-TGX [13] は, TGNN のリンク予測結果に対する説明

生成手法である. Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm (QIEA) を応用して, イベントの組み合わせを効率的に探索する. 図 1 に QIEA-TGX の概略図を示す. 図 1 における QIEA-TGX の全体的な流れは以下の通りである.

- 初期化:** 全てのイベントの存在確率 (量子ビット) を均等な確率 (0.5) で初期化.
- 観測:** 量子ビットを観測し, バイナリビットに変換して存在, 不存在を確定.
- 評価:** TGNN にグラフ (バイナリビット列) を入力し, 適応度を計算.
- 更新:** 評価結果に基づき, ゲート操作で量子ビットを更新.
- 出力:** 終了条件を満たすまで 2, 3, 4 の手順を繰り返し, 適応度の最も高いグラフを説明グラフとして出力.

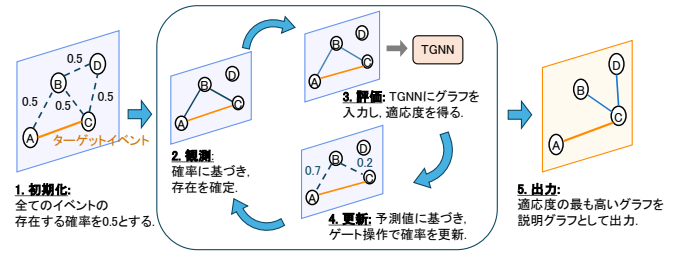


図 1: QIEA-TGX の概略図

まずは, QIEA-TGX における個体表現について説明する. 従来の進化アルゴリズムでは, 個体は通常, 2 進数, 実数, または記号的な表現によって符号化される [29]. 一方, QIEA では確率的な状態を持つ量子ビットで個体を表現する. 量子ビットは次のように表現する.

$$|q\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

ここで,  $\alpha$  と  $\beta$  は確率振幅であり, 正規化条件  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  を満たす.  $|\alpha|^2$  および  $|\beta|^2$  は, それぞれ量子ビットが「0」, 「1」として観測される確率を表す. 長さ  $n$  の量子ビットにおける個体  $Q$  は, 以下のように表現される.

$$Q = \{|q_1\rangle, |q_2\rangle, \dots, |q_n\rangle\}$$

この表現により, 各量子ビットは「0」および「1」の両方の状態を同時に保持でき,  $2^n$  通りの状態を同時に表現することが可能となる. このように, 一つの個体が複数の解の状態を同時に表現することで, 探索の多様性と効率性が大幅に向上する.

次に, QIEA-TGX の操作手順について説明する. まずは, 各量子ビットを「0」と「1」が等確率で存在する重ね合わせ状態に初期化する. 具体的には, 長さ  $n$  の量子ビット列において, 各量子ビット  $|q_i\rangle$  を以下の式で初期化する.

$$|q_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

ここで係数  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  は, 観測確率  $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = 0.5$  を意味する. これにより, 探索空間全体を均等に探索することが可能となり, 初期段階での解空間の多様性が確保される. 本研究では, 量子

ビット列の長さ  $n$  はイベント集合内のイベント数  $|\mathcal{E}^c|$  に対応する。

次に、観測操作を行う。観測では、量子ビットの状態を具体的なバイナリビットに変換する。各量子ビット  $|q_i\rangle = \alpha_i|0\rangle + \beta_i|1\rangle$  は、以下の確率に基づいて「0」または「1」に決定される。

$$P(0) = |\alpha_i|^2, \quad P(1) = |\beta_i|^2$$

この観測によって生成されたバイナリビット列が評価対象のグラフとなり、適応度の評価に使用される。

次に、評価操作を行う。観測によって確定したバイナリビット列を TGNN に入力し、その出力を適応度とする。適応度とは、生成されたグラフがターゲットイベントの予測にどれだけ寄与しているかを示す指標であり、具体的には TGNN によるリンク予測の予測値等に対応する。

次に、更新操作を行う。QIEA-TGX における量子ビットの更新操作は、Q ゲートによる更新と H ゲートによる更新の二つが存在する。

Q ゲートによる更新は、回転操作を通じて量子ビットの確率振幅  $\alpha, \beta$  を調整し、解の確率分布を動的に変化させる操作である。新たに観測された個体の適応度が、その時点での観測された最良個体の適応度よりも高く、かつ対応するビットが異なる場合、量子ビットの状態を最良個体に近づけるように回転させる。回転行列  $R(\theta_Q)$  は以下のように定義される。

$$R(\theta_Q) = \begin{bmatrix} \cos(\theta_Q) & -\sin(\theta_Q) \\ \sin(\theta_Q) & \cos(\theta_Q) \end{bmatrix}$$

これを用いて、量子ビットは以下のように更新される

$$\begin{bmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{bmatrix} = R(\theta_Q) \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

回転行列を用いることで、更新された量子ビット  $|q'_i\rangle = \alpha'_i|0\rangle + \beta'_i|1\rangle$  は正規化条件を満たす。この操作により、優良な解の出現確率を増加させ、大域的な最適解の探索が促進される。

H ゲート (Hadamard ゲート) による更新は、量子ビットの基底状態を重ね合わせ状態に変換し、探索空間の多様性を向上させる重要な役割を担う [30]。H ゲートは、量子ビットを操作して「0」と「1」の両方の状態が同時に存在する重ね合わせの状態を生成するため、「0」か「1」の両者が観測される最低確率を保ち、探索の多様性を確保できる。QIEA-TGX では、回転操作により確率振幅が極端に偏った場合に、確率振幅を強制的に  $\sqrt{\theta_H}$  に設定する。例えば、 $\alpha^2$  が 0 に近づいた場合、つまり特定の閾値  $\sqrt{\theta_H^2}$  を下回った場合、H ゲートを適用して、 $\alpha^2$  を  $\sqrt{\theta_H^2}$  に、 $\beta^2$  を  $\sqrt{1-\theta_H^2}$  に設定する。このように H ゲートの適用に条件を付けることで、各量子ビットの偏りを緩和し、特定の基底状態への収束を防ぐことができる。

以上の「観測」、「評価」、「更新」からなる一連の探索プロセスを一定回数だけ繰り返す。その過程で、観測時にそれまでに最も高い適応度を示した個体が、暫定的な最良解として各回(世代)で更新され続ける。一定回数の反復が終了した時点で、

観測結果が最も高い適応度となる個体をバイナリビット列に変換し、説明グラフとして出力する。この説明グラフは、予測モデルの判断に最も寄与したイベント集合であり、予測の根拠として提示する。

## 4 提案手法

本研究では、QIEA-TGX に対し「ARGO による適応的更新」、「局所探索による事後最適化」の二つの改良機構を導入した手法 QIEA-TGX+ を提案する。図 2 に QIEA-TGX+ の概略図を示す。

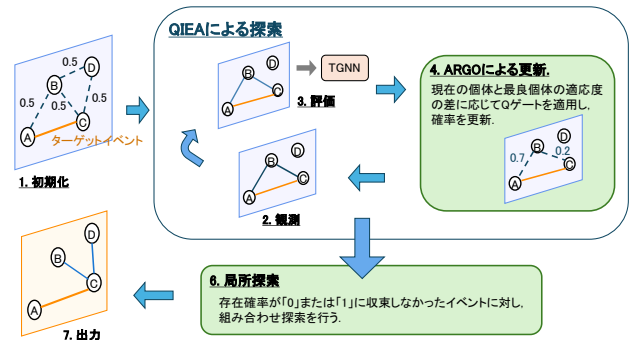


図 2: QIEA-TGX+ の概略図

具体的な処理の流れは以下の通りである。まず、説明対象となるグラフに含まれるイベントの存在確率を 0.5 で初期化する。次に、QIEA-TGX の探索プロセスにおいて、各個体の観測、TGNN による評価、そして ARGO を用いた量子ゲート更新の三つの操作を繰り返す。一定回繰り返された時点で終了し、最後に、QIEA-TGX による探索で得られた暫定解に対し、確率が収束しなかったイベントのみを対象とした局所探索を行い、最終的な説明グラフを出力する。各改良機構の詳細は以降の節で示す。

### 4.1 ARGO

Adaptive Rotation Gate Operator (ARGO) [14] は、QIEA の量子ビットの回転操作における改良手法である。従来の QIEA における回転ゲートは一般に固定された回転角を用いるが、ARGO では個体の適合度に応じて回転角を変化させる。この設計は、大域的な探索と局所的な深化のバランスを動的に調整し、解の早期収束を可能にする。また、回転角がある一定の範囲に収まる設計により、アルゴリズムの安定性が確保される。ARGO における回転角  $\theta_Q$  の計算は以下のように表される。

$$\theta_Q = \begin{cases} \theta_Q \times s, & \text{when bits differ} \\ \theta_Q, & \text{when bits do not differ} \end{cases}$$

$$\theta_Q = \theta_{\min} + \left| \frac{f_{\text{best}} - f_i}{K} \right| \times (\theta_{\max} - \theta_{\min})$$

ここで、 $\theta_{\min}$  および  $\theta_{\max}$  はそれぞれ回転角の下限値と上限値であり、回転角はこの範囲内で制御される。 $K$  は適応度の差分を正規化するためのスケール係数である。適応度の差を

---

**アルゴリズム 1** ARGO による個体の更新手順
 

---

**入力:** 候補イベント集合  $S^c$ , 個体  $Q$ , 個体のバイナリビット列  $P$ , 最良のバイナリビット列  $B$ , 各個体の適応度  $f$ , 最良適応度  $f_{best}$ , 回転角の最小値  $\theta_{min}$ , 回転角の最大値  $\theta_{max}$ , 正規化係数  $K$

**出力:** 更新された個体  $Q$

```

1:  $\Delta f \leftarrow |f_{best} - f|$ 
2:  $\theta_{argo} \leftarrow \theta_{min} + (\Delta f / K) \times (\theta_{max} - \theta_{min})$    ▷ 回転角を計算
3: if  $f < f_{best}$  then   ▷ 各個体の最良適応度より悪い場合のみ更新
4:   for  $j \leftarrow 1$  to  $|S^c|$  do
5:     if  $P[j] \neq B[j]$  then   ▷ 観測ビットと最良ビットが異なる場合
6:       if  $P[j] = 0$  and  $B[j] = 1$  then
7:          $s \leftarrow 1$    ▷ 正方向へ回転
8:       else if  $P[j] = 1$  and  $B[j] = 0$  then
9:          $s \leftarrow -1$    ▷ 負方向へ回転
10:      end if
11:       $Q[j] \leftarrow Q\_gate(Q[j], s \times \theta_{argo})$    ▷ 最良個体に近づくように回転
12:    end if
13:  end for
14: end if
15:  $Q \leftarrow H\_gate(Q)$    ▷ H ゲートの適用
16: return  $Q$ 

```

---

取ることにより、最良個体から遠い個体には大きな回転角が適用され、大域的な「探索」が促進される。一方、最良個体に近い個体には小さな回転角が適用され、解の近傍を細かく探索する「深化」が行われる。 $s$  は量子ビットが異なる場合の回転方向を決定するための符号で、現在の個体の量子ビットの観測値  $Obs(|q_{new}\rangle)$  と最良個体の量子ビット  $Obs(|q_{best}\rangle)$  の値に基づいて、以下のように決定される。

$$s = \begin{cases} 1, & Obs(|q_{new}\rangle) = 0, Obs(|q_{best}\rangle) = 1 \\ -1, & Obs(|q_{new}\rangle) = 1, Obs(|q_{best}\rangle) = 0 \end{cases}$$

すなわち、 $s$  により、現在の観測値が最良解と一致している場合は回転を行わず、異なる場合は最良解へ近づく方向へ回転を加える。この適応的な制御により、探索の初期段階では多様性を維持しつつ、終盤では高精度な収束を可能にする。

ARGO を導入した QIEA の更新機構のアルゴリズムをアルゴリズム 1 に示す。入力の  $P$  は個体を観測してバイナリビットに変換したビット列、 $B$  は最良個体を観測してバイナリビットに変換したビット列である。まず、2 行目と 3 行目で ARGO における回転角  $\theta_Q$  を計算する。4 行目と 6 行目では Q ゲートを適用する際の条件判定を行っている。更新は適応度が各個体の最良適応度より悪い個体のみに行う。また、観測したビットと最良個体のビットを比較して、異なる量子ビットのみに更新を行う。7 行目から 11 行目では  $s$  を計算し、ビットが異なる場合の回転方向を決定する。最後に、12 行目で Q ゲート、16 行目で H ゲートを適用し、更新操作を終了する。

## 4.2 局所探索

QIEA による大域的な探索が終了した後、すべての量子ビッ

トが 0 または 1 に完全に収束するとは限らず、0.5 付近で停滞し必要性が定まっていないビットが存在する場合がある。このようなビットを確率的に観測して最終解とすることは、最終的な説明グラフの評価を低下させるリスクがある。

この問題に対処するため、QIEA の探索後も必要性が確定しなかったイベントに対し、局所的な最適化を行い、その必要性を確定させる。まず、QIEA による探索で得られた最良個体  $Q_{best}$  の量子ビットから存在確率  $\beta^2$  を算出し、未確定イベント  $e$  の集合  $U$  を特定する。

$$U = \{e_j \in Q_{best} \mid \tau_{low} < \beta_j^2 < \tau_{high}\}$$

ここで  $\tau_{low}, \tau_{high}$  は閾値であり、存在確率がこの範囲内に収まるイベントを未確定として扱う。その後、 $U$  に含まれる未確定イベント  $e_j$  について、ビットを反転させたときの適応度の変化量  $\Delta f$  を計算し、 $e_j$  が 0 なら反転ビット 1 を追加候補リスト  $L_{add}$  に、 $e_j$  が 1 なら反転ビット 0 を削除候補リスト  $L_{drop}$  に  $\Delta f$  と一緒に追加する。すなわち、 $L_{add}$  は、これを選ぶとイベントの使用数が増加 ( $0 \rightarrow 1$ ) する  $e_j$ 、 $L_{drop}$  は、これを選ぶとイベントの使用数が減少 ( $1 \rightarrow 0$ ) する  $e_j$  である。二つのリストは  $\Delta f$  の降順にソートを行う。リスト作成後は、以下の二つの段階で処理を行う。

- 追加段階:** 現在のイベントの使用数がイベントの最大採用可能数  $\max_{event}$  以下なら、イベント数が  $\max_{event}$  になるまで、 $\Delta f > 0$  である  $L_{add}$  内のイベントを上位から順にグラフに追加する。
- 入れ替え段階:**  $L_{add}$  内のイベントを採用したときの適応度上昇幅  $\Delta f_{inc}$  と  $L_{drop}$  内のイベントを採用したときの適応度減少幅  $\Delta f_{dec}$  の和を計算し、 $\Delta f_{inc} + \Delta f_{dec} > 0$  となる組み合わせに対し、 $L_{add}$  内のイベントを追加、 $L_{drop}$  内のイベントを削除し、入れ替えを行う。

すなわち、未確定イベント  $e_j$  を反転し、適応度が上昇するなら、 $\max_{event}$  の範囲内でその反転を採用する。また、反転して適応度が上昇するイベントと減少するイベントが二つ存在するなら、それらのイベントを入れ替える。この事後的な探索により、QIEA が大域的に絞り込んだ探索空間の中で、最終的な説明サブグラフを修正し、局所最適解への到達を確実にする。

局所探索機構のアルゴリズムをアルゴリズム 2 に示す。まず、1 行目で最良個体  $Q_{best}$  の量子ビットから存在確率  $\beta^2$  を算出し、2 行目で未確定イベント  $e$  の集合  $U$  を特定する。その後、 $U$  に含まれる未確定イベント  $e_j$  についてのみ、5 行目以降で順次値を確定させる。まず、7 行目で、未確定イベント  $e_j$  を反転した場合の適応度を計算する。そして、10 行目、12 行目で、 $e_j$  が 0 なら追加候補、1 なら削除候補のリストに追加する。これを  $U$  に含まれるすべての  $e_j$  に対して行う。15 行目ではリストのソートを行う。16 から 24 行目は、イベントの追加段階である。現在の最良個体を観測し、採用イベント数が最大値以下で、かつ採用により適応度が上昇するイベントが追加候補リストに存在するなら、20 行目でそのイベントを採用し、21 行目で適応度を更新する。イベント追加後、25 から 36 行目はイベントの入れ替え段階である。追加候補リストのイベント追加による適応

---

**アルゴリズム 2 局所探索の手順**


---

**入力:** 個体  $Q$ , 最良のバイナリビット列  $B$ , 最良のインデックス  $best$ , 最良適応度  $f_{best}$ , 閾値  $\tau_{low}, \tau_{high}$ , 最大イベント数  $max_{event}$

**出力:** 修正後の最良のバイナリビット列  $B$

```

1:  $P \leftarrow \sin^2(Q[best])$  ▷ 確率計算
2:  $U \leftarrow \{j \mid \tau_{low} < P[j] < \tau_{high}\}$  ▷ 未確定ビット集合
3:  $L_{add} \leftarrow \emptyset, L_{drop} \leftarrow \emptyset$ 
4: for  $j \in U$  do
5:    $B' \leftarrow B$ 
6:    $B'[j] \leftarrow 1 - B[j]$  ▷ ビット反転
7:    $\Delta f \leftarrow \text{Evaluate}(B') - f_{best}$  ▷ 反転した場合の適応度を計算
8:   // 最小化問題なら逆の操作を行う
9:   if  $B[j] = 0$  then
10:     Append  $(j, \Delta f)$  to  $L_{add}$  ▷ 0→1: 追加候補リストへ
11:   else
12:     Append  $(j, \Delta f)$  to  $L_{drop}$  ▷ 1→0: 削除候補リストへ
13:   end if
14: end for
15: Sort  $L_{add}$  and  $L_{drop}$  by  $\Delta f$  in descending order
16: // 追加段階
17: for  $(j, \Delta f) \in L_{add}$  do
18:    $k \leftarrow \text{CountOnes}(B)$ 
19:   if  $k < max_{event}$  and  $\Delta f > 0$  then
20:      $B[j] \leftarrow 1$  ▷ イベントを追加
21:      $f_{best} \leftarrow f_{best} + \Delta f$  ▷ 適応度を更新
22:     Remove  $(j, \Delta f)$  from  $L_{add}$ 
23:   end if
24: end for
25: // 入れ替え段階
26: for  $(i, \Delta f_{inc}) \in L_{add}$  do
27:   for  $(j, \Delta f_{dec}) \in L_{drop}$  do
28:     if  $\Delta f_{inc} + \Delta f_{dec} > 0$  then ▷ 適応度が上がる場合
29:        $B[i] \leftarrow 1 - B[i]$ 
30:        $B[j] \leftarrow 1 - B[j]$  ▷ イベントを入れ替え
31:        $f_{best} \leftarrow f_{best} + (\Delta f_{inc} + \Delta f_{dec})$  ▷ 適応度を更新
32:       Remove  $(j, \Delta f_{dec})$  from  $L_{drop}$ 
33:       break ▷ ペア成立のため次の追加候補へ
34:     end if
35:   end for
36: end for
37: return  $B$ 

```

---

度上昇量と削除候補リストのイベント削除による適応度減少量の和が正である場合, 29, 30 行目でイベントの入れ替えを行い, 31 行目で適応度を更新する. これを適応度の変化幅が正である限り繰り返し, すべてのイベントの判定を終えた時点での個体を, 最終的な説明サブグラフとする.

## 5 実験

本章では, [13] で用いられた六つのベースライン手法に加え, 提案手法である QIEA-TGX+ の計七つの手法で精度の検証を行う. 実験は, Intel Xeon Silver 4210R CPU(40 コア, 2.40 GHz), NVIDIA RTX 6000 GPU (40 GB) を搭載したサー

表 1: データセットの概要

データセット	ソース	ターゲット	合計ノード	リンク	特徴量の次元
Wikipedia	8,227	1,000	9,227	157,474	172
Reddit	10,000	984	10,984	672,447	172
MovieLens	200,948	87,585	288,533	32,000,204	1
Enron	158	158	158	517,431	172

バ (OS: Ubuntu 22.04.4 LTS) で行った.

### 5.1 実験設定

**5.1.1 時間グラフニューラルネットワークとデータセット**  
本研究では, 説明対象の TGNN として TGAT [16] と TGN [17] を用いた. データセットには, Wikipedia, Reddit, Movielens, Enron を用いた. データセットの概要は表 1 に示す. TGNN の学習は, 全データを時系列順に 70% : 15% : 15% の割合で分割し, それぞれを訓練データ, 検証データ, テストデータとして用いた.

#### 5.1.2 比較手法

提案手法 QIEA-TGX+ に加えて, 六つの比較手法で実験を行う. 比較手法を以下に示す.

- **random:** sparsity の制約を満たすようにランダムにイベントをサンプリングし, 評価を規定回数繰り返して, 最適なイベント集合を作成する.
- **T-GNNEExplainer [9]:** PGExplainer [15] をナビゲータとして利用し, モンテカルロ木探索によって最適なイベント集合を探索する.
- **GreeDy [11]:** イベントを 1 本ずつ追加, 削除した場合の推論結果を確認し, 予測値が最も良くなるイベントの追加, 削除を繰り返す.
- **PGExplainer [15]:** 入力グラフの各イベントに対する重要度を推定し, 重要度が高い順にイベントを説明グラフに追加する.
- **GA-TGX [13]:** 遺伝アルゴリズムをベースに, 交叉や突然変異操作を通して最適なイベント組み合わせを探索する.
- **QIEA-TGX [13]:** QIEA による量子ビット表現と量子ゲート操作により, 多様な解表現で効率的に最適なイベント組み合わせを探索する.

比較手法と実験設定は [13] と同様である. 全ての説明手法の最大実行時間を 10 分とし, sparsity は 0.2 とした. random, GA-TGX, QIEA-TGX は説明グラフの作成回数は 500 回に限定する. GreeDy は, イベントの追加または削除によって予測値が改善しなくなるか, sparsity によるイベント数上限に達した場合に実行を終了する. さらに, TGNN の学習には 2hop までの近傍イベント集合を使い, neighbor sampling [17] は 10 本とした. QIEA-TGX の観測操作は 2hop までのイベントを考慮し, 使用する量子ビット個体を 1 個, 回転行列と H ゲートのパラメータを  $\theta_Q = 0.01\pi, \theta_H = 0.01$  とした. また, QIEA-TGX+において, ARGO 機構における回転角の最大値  $\theta_{max}$  と最小値  $\theta_{min}$  は,  $\theta_{max} = 0.05\pi, \theta_{min} = 0.001\pi$ , スケーリング係数は  $K = 1.0$  とした. 局所探索における閾値

表 2: fidelity (Movielens, Enron)

	事実説明				反実仮想説明			
	Movielens		Enron		Movielens		Enron	
	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN
random	0.083 $\pm$ 0.12	0.003 $\pm$ 0.15	0.189 $\pm$ 0.11	0.075 $\pm$ 0.16	0.239 $\pm$ 0.20	0.171 $\pm$ 0.15	0.131 $\pm$ 0.13	0.262 $\pm$ 0.20
GreeDy	0.099 $\pm$ 0.12	0.023 $\pm$ 0.16	0.145 $\pm$ 0.15	0.082 $\pm$ 0.17	0.366 $\pm$ 0.22	0.228 $\pm$ 0.17	0.312 $\pm$ 0.20	0.355 $\pm$ 0.25
PGExplainer	-0.080 $\pm$ 0.18	-0.090 $\pm$ 0.14	-0.098 $\pm$ 0.22	-0.104 $\pm$ 0.24	0.069 $\pm$ 0.17	0.081 $\pm$ 0.13	0.068 $\pm$ 0.13	0.100 $\pm$ 0.17
T-GNNEExplainer	0.052 $\pm$ 0.17	-0.013 $\pm$ 0.16	0.173 $\pm$ 0.11	0.098 $\pm$ 0.12	0.172 $\pm$ 0.21	0.160 $\pm$ 0.15	0.100 $\pm$ 0.12	0.235 $\pm$ 0.17
GA-TGX	0.132 $\pm$ 0.10	0.059 $\pm$ 0.12	0.188 $\pm$ 0.11	0.071 $\pm$ 0.17	0.226 $\pm$ 0.12	0.125 $\pm$ 0.08	0.106 $\pm$ 0.11	0.254 $\pm$ 0.19
QIEA-TGX	0.181 $\pm$ 0.11	0.087 $\pm$ 0.12	0.199 $\pm$ 0.11	0.130 $\pm$ 0.13	0.414 $\pm$ 0.16	0.256 $\pm$ 0.12	0.348 $\pm$ 0.20	0.419 $\pm$ 0.26
QIEA-TGX+	0.185 $\pm$ 0.11	0.088 $\pm$ 0.07	0.199 $\pm$ 0.09	0.131 $\pm$ 0.10	0.413 $\pm$ 0.28	0.258 $\pm$ 0.14	0.349 $\pm$ 0.12	0.424 $\pm$ 0.07

表 3: fidelity (Wikipedia, Reddit)

	事実説明				反実仮想説明			
	Wikipedia		Reddit		Wikipedia		Reddit	
	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN
random	-0.015 $\pm$ 0.19	-0.023 $\pm$ 0.15	0.155 $\pm$ 0.14	0.079 $\pm$ 0.15	0.297 $\pm$ 0.19	0.163 $\pm$ 0.13	0.204 $\pm$ 0.14	0.256 $\pm$ 0.20
GreeDy	0.002 $\pm$ 0.20	-0.005 $\pm$ 0.16	0.139 $\pm$ 0.15	0.090 $\pm$ 0.15	0.435 $\pm$ 0.21	0.236 $\pm$ 0.15	0.473 $\pm$ 0.23	0.366 $\pm$ 0.25
PGExplainer	-0.210 $\pm$ 0.17	-0.103 $\pm$ 0.13	-0.174 $\pm$ 0.24	-0.095 $\pm$ 0.23	0.168 $\pm$ 0.18	0.090 $\pm$ 0.12	0.113 $\pm$ 0.14	0.110 $\pm$ 0.19
T-GNNEExplainer	-0.032 $\pm$ 0.19	-0.043 $\pm$ 0.16	0.152 $\pm$ 0.13	0.095 $\pm$ 0.11	0.242 $\pm$ 0.20	0.157 $\pm$ 0.13	0.151 $\pm$ 0.13	0.246 $\pm$ 0.18
GA-TGX	0.111 $\pm$ 0.10	0.047 $\pm$ 0.11	0.161 $\pm$ 0.14	0.071 $\pm$ 0.15	0.223 $\pm$ 0.16	0.121 $\pm$ 0.08	0.183 $\pm$ 0.13	0.248 $\pm$ 0.18
QIEA-TGX	0.132 $\pm$ 0.11	0.074 $\pm$ 0.11	0.179 $\pm$ 0.14	0.123 $\pm$ 0.12	0.456 $\pm$ 0.23	0.253 $\pm$ 0.16	0.490 $\pm$ 0.22	0.421 $\pm$ 0.25
QIEA-TGX+	0.134 $\pm$ 0.13	0.075 $\pm$ 0.08	0.180 $\pm$ 0.06	0.122 $\pm$ 0.11	0.465 $\pm$ 0.13	0.256 $\pm$ 0.12	0.497 $\pm$ 0.18	0.430 $\pm$ 0.05

$\tau_{low}$ ,  $\tau_{high}$  は,  $\tau_{low} = 0.1$ ,  $\tau_{high} = 0.9$  とした.

## 5.2 評価指標

評価指標には, fidelity [31] および実行時間を使用する. fidelity は, 説明として抽出された部分グラフが予測結果に与える影響度 (忠実度) を測定する指標であり, 以下のように定義される.

$$\mathcal{F}(f(\cdot), \mathcal{G}^c, \mathcal{G}^e, e_k) = \mathbb{1}(Y_k = 1)(f(\mathcal{G}^e)[e_k] - f(\mathcal{G}^c)[e_k]) \\ + \mathbb{1}(Y_k = 0)(f(\mathcal{G}^c)[e_k] - f(\mathcal{G}^e)[e_k])$$

反実仮想説明においては, 現在のグラフ  $\mathcal{G}^c$  から説明部分グラフ  $\mathcal{G}^e$  を除外した場合の影響度として, 以下のように定義される.

$$\mathcal{F}(f(\cdot), \mathcal{G}^c, \mathcal{G}^e, e_k) = \mathbb{1}(Y_k = 1)(f(\mathcal{G}^c)[e_k] - f(\mathcal{G}^c \setminus \mathcal{G}^e)[e_k]) \\ + \mathbb{1}(Y_k = 0)(f(\mathcal{G}^c \setminus \mathcal{G}^e)[e_k] - f(\mathcal{G}^c)[e_k])$$

ここで  $\mathcal{F}(\cdot)$  は個別のイベントに対する fidelity であり, 実験の評価指標としては, 各イベント  $e_k$  の  $\mathcal{F}(\cdot)$  の平均をとったものを用いる. fidelity は  $[-1, 1]$  の範囲で値をとり, 値が大きい方が望ましい.

## 5.3 実験結果

### 5.3.1 fidelity の評価

表 2 に Movielens と Enron, 表 3 に Wikipedia と Reddit の実行結果を示す. 各 fidelity の値は, 存在するイベント, 存在しないイベントに対する説明の平均値である. ベースライン手法と比較して, 全 16 パターンの実験設定中 13 パターンにおいて最も高い fidelity を達成した. 四つのデータセット全

てに対して有効性が確認されており, 汎用性の高い手法と言える. QIEA-TGX と比較すると, 同等, もしくはわずかに上回る fidelity を記録した. 反実仮想説明における Wikipedia, Reddit など, 特定のパターンでは比較的大きなスコア上昇が確認できる.

### 5.3.2 fidelity と 実行時間の評価

図 3 に, ベースライン手法との fidelity と 実行時間の比較を示す. データセット Movielens と Enron で比較し, 各グラフで TGAT, TGN の結果をそれぞれプロットしている. QIEA-TGX+ は, 全てのグラフで QIEA-TGX と比べて点がわずかに右寄りに位置しており, QIEA-TGX よりも実行時間が長いことが分かる. これは局所探索機構による影響であり, QIEA による探索で絞り込めなかったイベントが多いと, 探索すべき組み合わせも増大してしまい, 実行時間に影響を及ぼすことを示している.

### 5.3.3 アブレーションスタディ

表 4 に Movielens, Enron, 表 5 に Wikipedia, Reddit における, ARGO と局所探索それぞれの機構のみを導入した場合の fidelity 変化を示す. ほとんどのパターンでは提案手法が最も高い fidelity を記録しているが, 反実仮想説明の Movielens(TGAT) では局所探索のみを導入した場合の方が fidelity が高いことが確認できる. これは ARGO のみを導入した場合が QIEA-TGX よりも fidelity が低いためであると考えられる. ARGO は多くの場合, 動的な回転角調整によりグラフに応じた最適な収束を促進するが, 促進が強すぎると探索の多様性が失われ, 探索空間の広い範囲を調べる前に質の低い局所解に収

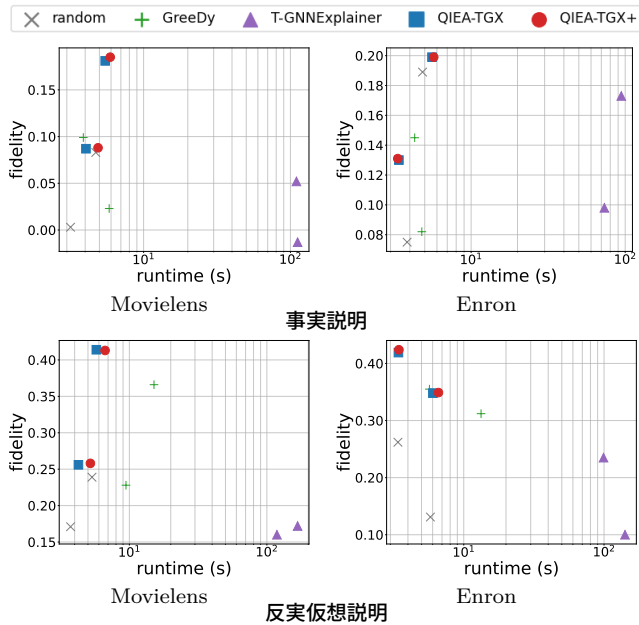


図 3: fidelity と実行時間

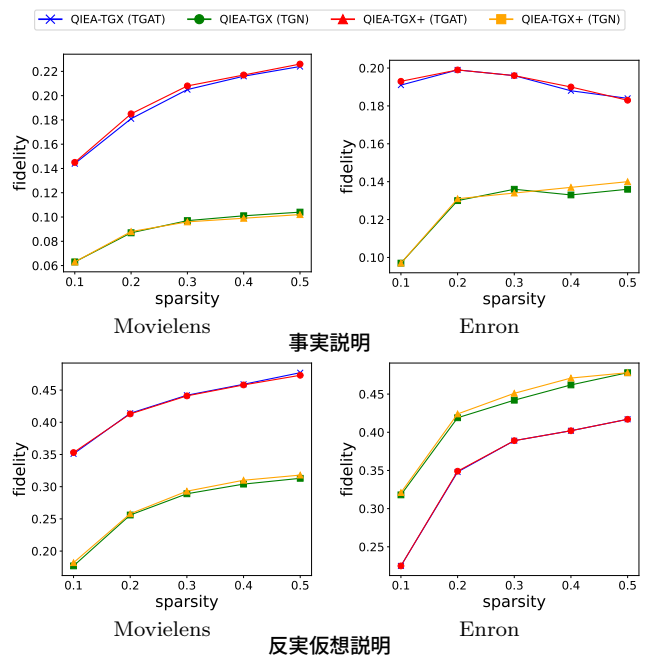


図 4: fidelity と sparsity

表 4: アブレーションスタディ (MovieLens, Enron)

	事実説明				反事実説明			
	MovieLens		Enron		MovieLens		Enron	
	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN
QIEA-TGX	0.181	0.199	0.087	0.130	0.414	0.348	0.256	0.419
ARGO のみ	0.181	0.198	0.084	0.130	0.409	0.340	0.256	0.420
局所探索のみ	0.182	0.199	0.087	0.130	<b>0.416</b>	0.348	0.256	0.419
QIEA-TGX+	<b>0.185</b>	<b>0.199</b>	<b>0.088</b>	<b>0.131</b>	0.413	<b>0.349</b>	<b>0.258</b>	<b>0.424</b>

表 5: アブレーションスタディ (Wikipedia, Reddit)

	事実説明				反事実説明			
	Wikipedia		Reddit		Wikipedia		Reddit	
	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN	TGAT	TGN
QIEA-TGX	0.132	0.047	0.179	<b>0.123</b>	0.456	0.253	0.490	0.421
ARGO のみ	0.133	0.074	0.179	0.122	0.456	0.252	0.489	0.421
局所探索のみ	0.132	<b>0.075</b>	0.179	<b>0.123</b>	<b>0.465</b>	<b>0.256</b>	0.496	0.429
QIEA-TGX+	<b>0.134</b>	<b>0.075</b>	<b>0.180</b>	0.122	<b>0.465</b>	<b>0.256</b>	<b>0.497</b>	<b>0.430</b>

束してしまう可能性がある。したがって、局所探索等の機構で ARGO による早期収束を補正する必要がある。実際に、ARGO のみ、局所探索のみでは QIEA-TGX と比べて fidelity が上昇しない場合でも、両方の機構を導入することによって fidelity が上昇するパターンがいくつか存在する。

### 5.3.4 sparsity による fidelity 変化

図 4 に、sparsity を 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 と変化させたときの fidelity 推移を示す。ほとんどのパターンで QIEA-TGX+ は QIEA-TGX よりも高い fidelity を達成しており、sparsity の変化に対しても堅牢な手法だと言える。事実説明における Enron (TGAT) のグラフでは sparsity が上がると fidelity が下がってしまっているが、これは選択可能なイベント数増加により探索するイベントが増え、大域最適解に行きつかなくなったためだと考えられる。

## 6 おわりに

本研究では TGNN の説明手法である QIEA-TGX のさらなる説明精度向上を目的とし、QIEA-TGX に対し「ARGO による適応的更新」と「局所探索による事後最適化」の二つの改良機構を導入した手法 QIEA-TGX+ を提案した。実験の結果、提案手法は全実験設定の平均において、既存のベースライン手法を上回る説明精度を達成した。

## 謝 辞

本研究は ASPIRE JPMJAP2328 および JSPS 科研費 JP23K28096 の支援によって行われた。

## 文 献

- [1] Jiafeng Xiong, Ahmad Zareie, and Rizos Sakellariou. A survey of link prediction in temporal networks. *SN Computer Science*, 7(1):100, 2026.
- [2] Peng Wang, Baowen Xu, Yurong Wu, and Xiaoyu Zhou. Link prediction in Social Networks: The state-of-the-art. *Science China Information Sciences*, 58(1):1–38, 2015.
- [3] P. Borgnat, G. Dewaele, K. Fukuda, P. Abry, and K. Cho. Seven years and one day: Sketching the evolution of internet traffic. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Communications (INFOCOM)*, pages 711–719, 2009.
- [4] C. Vinchoff, N. Chung, T. Gordon, L. Lyford, and M. Aibin. Traffic prediction in optical networks using Graph Convolutional Generative Adversarial Networks. In *Proceedings of the International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON)*, pages 1–4, 2020.
- [5] Chenxi Liu, Zhu Xiao, Dong Wang, Minhao Cheng, Hongyang Chen, and Jiawei Cai. Foreseeing private car transfer between urban regions with multiple graph-based Generative Adversarial Networks. *World Wide Web*,

- 25(2):2515–2534, 2022.
- [6] Maximilian Nickel, Kevin Murphy, Volker Tresp, and Evgeniy Gabrilovich. A review of relational machine learning for Knowledge Graphs. *Proceedings of the IEEE*, 104(1):11–33, 2016.
  - [7] Meihong Wang, Linling Qiu, and Xiaoli Wang. A survey on Knowledge Graph Embeddings for link prediction. *Symmetry*, 13(3):485, 2021.
  - [8] Antonio Longa et al. Graph neural networks for temporal graphs: State of the art, open challenges, and opportunities. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2023.
  - [9] Wenwen Xia, Mincai Lai, Caihua Shan, Yao Zhang, Xinnan Dai, Xiang Li, and Dongsheng Li. Explaining Temporal Graph Models through an explorer-navigator framework. In *International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2023.
  - [10] Jialin Chen and Rex Ying. TempME: Towards the explainability of Temporal Graph Neural Networks via motif discovery. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, volume 36, pages 29005–29028, 2023.
  - [11] Zhan Qu, Daniel Gomm, and Michael Färber. CoDy: Counterfactual explainers for Dynamic Graphs. In *Proceedings of the International Conference on Machine Learning (ICML)*, 2025.
  - [12] Gexiang Zhang. Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms: A survey and empirical study. *Journal of Heuristics*, 17(3):303–351, 2011.
  - [13] Masahiro Mitani and Yuya Sasaki. Explaining Temporal Graph Neural Networks via Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI)*, 2026.
  - [14] Lubna Siddiqui, Ashish Mani, and Jaspal Singh. Adaptive Quantum-Inspired Evolution for denoising PCG signals in unseen noise conditions. *IEEE Access*, 13:106188–106200, 2025.
  - [15] Dongsheng Luo, Wei Cheng, Dongkuan Xu, Wenchao Yu, Bo Zong, Haifeng Chen, and Xiang Zhang. Parameterized explainer for Graph Neural Network. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, volume 33, pages 19620–19631, 2020.
  - [16] Da Xu, Chuanwei Ruan, Evren Korpeoglu, Sushant Kumar, and Kannan Achan. Inductive representation learning on Temporal Graphs. In *International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2020.
  - [17] Emanuele Rossi, Ben Chamberlain, Fabrizio Frasca, Davide Eynard, Federico Monti, and Michael Bronstein. Temporal graph networks for deep learning on dynamic graphs. In *ICML Workshop on Graph Representation Learning*, 2020.
  - [18] Haonan Yuan, Qingyun Sun, Zhaonan Wang, Xingcheng Fu, Cheng Ji, Yongjian Wang, Bo Jin, and Jianxin Li. Dg-mamba: Robust and efficient dynamic graph structure learning with selective state space models. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI)*, volume 39, pages 22272–22280, 2025.
  - [19] Zeyang Zhang, Xin Wang, Ziwei Zhang, Haoyang Li, Yijian Qin, and Wenwu Zhu. LLM4DyG: Can large language models solve spatial-temporal problems on Dynamic Graphs? In *Proceedings of the ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD)*, pages 4350–4361, 2024.
  - [20] Jaykumar Kakkad, Jaspal Jannu, Kartik Sharma, Charu C. Aggarwal, and Sourav Medya. A survey on explainability of graph neural networks. *IEEE Data Engineering Bulletin*, 46(2):33–44, 2023.
  - [21] Zhitao Ying, Dylan Bourgeois, Jiaxuan You, Marinka Zitnik, and Jure Leskovec. GNNExplainer: Generating explanations for Graph Neural Networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, volume 32, pages 9637–9647, 2019.
  - [22] Ana Lucic, Maartje A Ter Hoeve, Gabriele Tolomei, Maarten De Rijke, and Fabrizio Silvestri. CF-GNNExplainer: Counterfactual explanations for Graph Neural Networks. In *Proceedings of the International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS)*, pages 4499–4511, 2022.
  - [23] David Bechtoldt and Sidney Bender. Graph diffusion counterfactual explanation. In *Proceedings of the European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning (ESANN)*, 2026.
  - [24] Yinhan He, Zaiyi Zheng, Patrick Soga, Yaozhen Zhu, Yushun Dong, and Jundong Li. Explaining Graph Neural Networks with Large Language Models: A counterfactual perspective for molecular property prediction. In *Findings of the Association for Computational Linguistics: EMNLP*, pages 7079–7096, 2024.
  - [25] Kuk-Hyun Han and Jong-Hwan Kim. Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm for a class of combinatorial optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6(6):580–593, 2002.
  - [26] Rohit Goyal, Krishan Kumar, Vivek Sharma, Rudramani Bhutia, Arpit Jain, and Munish Kumar. Quantum-inspired optimization algorithms for scalable machine learning in edge computing. In *Proceedings of the International Conference on Technological Advancements in Computational Sciences (ICTACS)*, pages 1888–1892, 2024.
  - [27] Mazyar Taghavi, Amir Paslari, and Mahdi Riazi. Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm for hyperparameter tuning in automatic number plate recognition systems. In *Proceedings of the National Conference on Artificial Intelligence and Emerging Research*, 2025.
  - [28] Vadlamani Ravi and Pisipati Radha Krishna. Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms for feature subset selection: A comprehensive survey. *Quantum Information Processing*, 24(7), 2025.
  - [29] R. Hinterding. Representation, constraint satisfaction and the knapsack problem. In *Proceedings of the Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, volume 2, pages 1286–1292, 1999.
  - [30] Michael A Nielsen and Isaac L Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010.
  - [31] Hao Yuan, Haiyang Yu, Shurui Gui, and Shuiwang Ji. Explainability in Graph Neural Networks: A taxonomic survey. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 45(5):5782–5799, 2023.