

分散確率モデル遺伝的アルゴリズムにおける 解探索メカニズムとパラメータの検討

下坂 久司[†] 平井 聡[†]
廣安 知之^{††} 三木 光範^{††}

我々は、これまでに分散確率モデル遺伝的アルゴリズム (Distributed Probabilistic Model-Building Genetic Algorithm: DPMBGA) を提案した。DPMBGA は確率モデル遺伝的アルゴリズムの分割母集団モデルであり、実数値 GA の 1 つである。DPMBGA は、解探索において解の依存関係を考慮するために高い解探索能力を有する。本論文では、まず DPMBGA の最適なパラメータ値を検討する。DPMBGA はいくつかの固有のパラメータを持ち、高い解探索性能を実現するためには多くの予備実験を必要とする。この問題を解決するために、DPMBGA の改良を行った。改良された DPMBGA は予備実験が不要であり、かつ、従来の DPMBGA と同等の解探索性能を有する。次に、本論文では DPMBGA の解探索メカニズムについて検討を行った。数値実験を通じて、多峰性関数においては、島モデルを採用することによる、解の多様性の維持が重要であることが明らかとなった。一方で、設計変数間に依存関係を有する関数においては、島モデルを採用することで、主成分分析 (Principal Component Analysis: PCA) が効果的な解探索能力を達成することが分かった。これらの結果により、DPMBGA は多峰性関数や設計変数間に依存関係を有する関数においても、高い解探索能力を実現できることが明らかとなった。

Consideration of Searching Mechanism and Parameters for the Distributed Probabilistic Model-Building Genetic Algorithm

HISASHI SHIMOSAKA,[†] SATOSHI HIRAI,[†] TOMOYUKI HIROYASU^{††}
and MITSUNORI MIKI^{††}

In the previous research, we have proposed the Distributed Probabilistic Model-Building Genetic Algorithm (DPMBGA). DPMBGA is a distributed population model of probabilistic model-building GA and is a real-coded Genetic Algorithm. As it can search for the solution taking into consideration the correlation between solutions, the DPMBGA has high search ability. First, this thesis presents a discussion of the optimum parameter values for the DPMBGA. The DPMBGA requires many specific parameters and parameter setting experiments to realize high search ability. To resolve this problem, the DPMBGA has been improved. The improved DPMBGA can achieve the same performance as the conventional DPMBGA without setting the parameters. Second, this thesis discusses the search mechanism of the DPMBGA. The results of numerical experiments indicated that in a function with many subpeaks, it is important to maintain the diversity of the population using the island model. On the other hand, in functions with correlations among design variables, Principal Component Analysis (PCA) using the island model can be used to achieve effective search ability. In conclusion, the DPMBGA can achieve high search ability in both of these functions.

1. はじめに

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA)¹⁾
は、生物進化を模倣した確率的な最適化アルゴリズム

である。GA で効率的な探索を行うためには、以下の
3 つの要素を考慮する必要がある。

第 1 の要素は、母集団の多様性を維持することである。GA では、母集団に異なる要素を持つ個体が多数存在することにより、解探索空間を広く探索することができる。これを実現する手法の 1 つとして、分散遺伝的アルゴリズム (Distributed Genetic Algorithm: DGA)^{2),3)} がある。DGA は母集団を複数のサブ母集団 (島) に分割し、島間で個体を交換する移住操作に

[†] 同志社大学大学院
Graduate School of Engineering, Doshisha University

^{††} 同志社大学工学部
Department of Knowledge Engineering and Computer
Sciences, Doshisha University

より多様性の維持を実現する．DGA では，1 つのサブ母集団が局所解に陥っても，他のサブ母集団からの移住個体により，局所解から抜け出せることを期待できる．

第 2 の要素は，良質な親個体の形質を子個体に継承させることである．これを実現する手法の 1 つとして，確率モデル遺伝的アルゴリズム (Probabilistic Model-Building Genetic Algorithm: PMBGA)⁴⁾ がある．PMBGA では，まず母集団から良質な個体群を抽出し，抽出した個体群の遺伝子情報を用いて確率モデルを構築する．その後，構築した確率モデルに従って子個体を生成する．

第 3 の要素は，設計変数間の依存関係を考慮することである．設計変数間の依存関係を考慮する手法の 1 つとして，主成分分析 (Principal Component Analysis: PCA) の利用があげられる．PCA を用いることにより，依存関係のある設計変数空間を依存関係のない空間に写像することができる．これにより，設計変数間の依存関係を考慮して子個体を生成することができる．

これら 3 つの要素を考慮した手法として，分散確率モデル遺伝的アルゴリズム (Distributed Probabilistic Model-Building Genetic Algorithm: DPMBGA)⁵⁾ がある．DPMBGA では，DGA の各島で PMBGA の操作を行い，母集団の多様性の維持と良質な親個体の形質遺伝を実現する．また，PCA を用いることで，設計変数間の依存関係を考慮する．

すでに複数のテスト関数を用いた数値実験により，DPMBGA の有効性および解探索性能についての検討が行われている⁵⁾．しかしながら，DPMBGA 固有のパラメータや解探索メカニズムについては検討されていない．そのため，本論文では，まず DPMBGA 固有のパラメータである，分散の増幅率とサンプリング率について検討する．次に，分散の増幅率を適応的に調節するメカニズムを提案する．最後に，多峰性関数と設計変数間に依存関係のある関数を用いて，解探索メカニズムを検討する．

2. 分散遺伝的アルゴリズムと確率モデル遺伝的アルゴリズム

2.1 分散遺伝的アルゴリズム

GA では，母集団の多様性を維持することが，良好な解探索を実現するために必要不可欠である．しかしながら，探索序盤において他の個体と比べ極端に適合度の高い個体が存在した場合，その個体は急速に母集団に広がり，多様性を維持できない可能性がある．

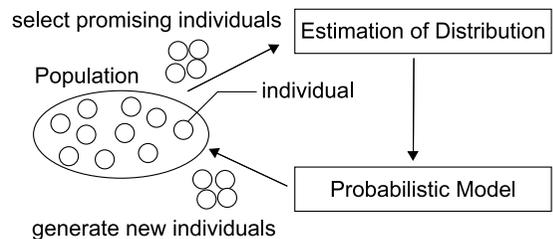


図 1 確率モデル遺伝的アルゴリズム

Fig. 1 Probabilistic Model-Building Genetic Algorithm.

Tanese により提案された DGA は，GA の母集団を複数のサブ母集団 (島) に分割し，各島内で遺伝的操作を行う．そして，島間で個体を交換する移住操作により，多様性の維持を実現する．

2.2 確率モデル遺伝的アルゴリズム

PMBGA では，まず母集団から良質な個体群を抽出し，抽出した個体群の遺伝子情報を用いて確率モデルを構築する．その後，構築した確率モデルに従って子個体を生成し，母集団内の個体と置き換える．PMBGA は，交叉による子個体生成を，良質な個体群による確率モデルの構築と，構築したモデルによる子個体生成に置き換えたものであると考えられる．PMBGA の概念図を図 1 に示す．PMBGA は分布推定アルゴリズム (Estimation of Distribution Algorithm: EDA)⁶⁾ とも呼ばれる．

PMBGA において，設計変数間の依存関係を考慮する手法に，Mutual-Information-Maximizing Input Clustering (MIMIC)⁷⁾，Factorized Distribution Algorithm (FDA)⁸⁾，Bayesian Optimization Algorithm (BOA)⁹⁾ などがあげられる．

3. 分散確率モデル遺伝的アルゴリズム

DPMBGA は母集団を複数のサブ母集団 (島) に分割し，各島内において PMBGA の操作を行う．また一定世代ごとに移住を行う．これにより，多様性の維持と良質な親個体の形質遺伝を実現する．また，設計変数間の依存関係を考慮して子個体を生成するために，PCA を用いて個体分布を写像する．DPMBGA の概念図を図 2 に示す．DPMBGA では，次の手順を各世代 t において実行する．

- (1) エリート個体の保存
- (2) 良好な個体の抽出
- (3) PCA を用いた設計変数の無相関化
- (4) 正規分布による確率モデルの構築
- (5) 構築した確率モデルによる子個体生成
- (6) 設計変数の相関の復元

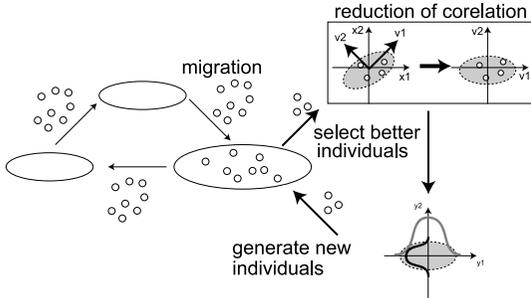


図 2 分散確率モデル遺伝的アルゴリズム
Fig. 2 Distributed PMBGA.

- (7) 突然変異
- (8) 制約条件外の子個体の、実行可能領域境界上への引き戻し
- (9) 島内の個体の置き換え
- (10) 個体の適合度の評価
- (11) エリートアーカイブの更新
- (12) 一定世代ごとの移住操作
- (13) エリートの復帰

以降では、DPMBGA の主要な操作について説明する。

3.1 良好な個体の抽出

各島において、適合度の高い順に、良好な個体を「サンプリング率」で定められた割合だけ選択し、サンプル個体 $S(t)$ として抽出する。 $S(t)$ は島ごとに存在する。子個体はこれらの情報をもとに生成される。

3.2 PCA を用いた設計変数の無相関化

$S(t)$ は PCA により写像される。PCA に利用するサンプル個体は $S(t)$ とは別に用意する。現在の世代までに島内に出現した最良個体群を、PCA の対象とする個体群 $T(t)$ とする。以降、この個体群 $T(t)$ をアーカイブと呼ぶ。アーカイブの更新は毎世代行われる。

アーカイブ $T(t)$ に格納されている個体数を N_T とし、 $T(t)$ の各設計変数 (D 個) から $T(t)$ の平均値を引いたものを、行列 T (N_T 行 \times D 列) とする。また、 $S(t)$ のサンプル個体数を N_S とし、 $S(t)$ の各設計変数 (D 個) から $T(t)$ の平均値を引いたものを、行列 X (N_S 行 \times D 列) とする。

次に、 T の共分散行列 S (D 行 \times D 列) を求め、その固有値と固有ベクトルを算出する。 S は、実数値対称行列となり、次式で求まる。

$$S = \frac{1}{N_T - 1} T^T T \tag{1}$$

S の固有値は大きい順に $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_D$ とし、対応する固有ベクトルを v_1, v_2, \dots, v_D (D 次元) とする。最も大きい固有値は、設計変数の分散が最大とな

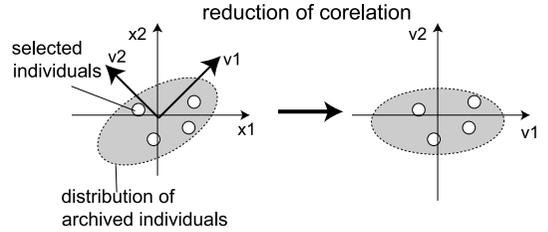


図 3 PCA を用いた設計変数の無相関化
Fig. 3 Reduction operation of correlation between design variables with PCA.

るように座標軸をとったときの分散値に等しい。固有ベクトルは、その座標軸自身を示す。

求めた固有ベクトルを用いて、抽出した個体群 $S(t)$ の設計変数 X を無相関化する。固有ベクトルを並べて、座標軸変換のための行列 $V = [v_1, v_2, \dots, v_D]$ を作成する。 X に対して座標軸変換行列 V をかけた行列を、 Y とおく。 Y (N_S 行 \times D 列) は、無相関化された設計変数を示す。 Y の座標軸は、固有ベクトルに等しい。図 3 に、抽出した個体群 $S(t)$ の設計変数を無相関化する操作について示す。

PCA と同様に設計変数間の依存関係を考慮する手法として、進化戦略 (Evolution Strategy: ES) の correlated mutation^{10),11)} がある。correlated mutation は突然変異手法の 1 つであり、分布の方向を示すパラメータを導入している。このパラメータを用い、多次元正規分布によって、個体の変数を変更する。DPMBGA では、設計変数間の依存関係に関する情報を、最良個体群のアーカイブとして (サブ) 母集団全体で保持しているのに対し、correlated mutation では各個体が保持している。

3.3 確率モデルの構築と子個体生成

島内の個体数 N_P と同じ数だけ子個体を生成する。 Y の分布に従い、各設計変数ごとに D 個の正規分布を用意する。各正規分布の分散値は、 Y における各設計変数 (各列) の分散に倍率 Amp をかけたものである。ここで倍率 Amp を「分散の増幅率」と呼ぶ。また、各正規分布の平均値は Y における各設計変数の平均に等しい。用意した正規分布に従い、生成した子個体の設計変数を Y_{offs} (N_P 行 \times D 列) に格納する。その後、次式のように Y_{offs} に V の逆行列をかけ、座標軸を元に戻す。

$$X_{offs} = Y_{offs} V^{-1} \tag{2}$$

$T(t)$ の平均値を足すことで、 X_{offs} の平均値を元に戻し、それらの子個体とする。

3.4 突然変異

あらかじめ定めた突然変異率に従って、子個体の各

設計変数を定義域内の無作為な値に変更する．

3.5 エリートアーカイブの更新

3.2 節で述べたように、現在の世代までに島内に出現した最良個体群はアーカイブ $T(t)$ として格納される．アーカイブは各島に存在する．また、アーカイブに格納できる最大の個体数をアーカイブサイズと呼ぶ．アーカイブに格納されている個体数がアーカイブサイズに満たない場合には、島内に出現した個体をそのまま追加する．反対にアーカイブサイズを超えた場合には、適合度の低い個体を順に削除する．

4. DPMBGA のパラメータ検討

DPMBGA は、すでに複数のテスト関数を用いた数値実験により、その有効性や解探索性能に関する検討が行われている．しかしながら、DPMBGA の解探索メカニズムや、分散の増幅率およびサンプリング率などの固有のパラメータについては検討されていない．一方で、文献 5) では、PCA を行うモデルと行わないモデルについて検討しており、設計変数間に依存関係のある問題では PCA を行うモデルが、設計変数間に依存関係のない問題では PCA を行わないモデルが有効に機能すると結論づけている．本論文では、PCA を行うモデルを用い、分散の増幅率およびサンプリング率について検討を行う．

4.1 対象問題

本論文では、Rastrigin 関数、Schwefel 関数、Rosenbrock 関数、Ridge 関数の 4 つのテスト関数を対象とする．

Rastrigin 関数は、最適解の周辺に格子状に局所解を持つ多峰性関数である． n は次元数を表す．

$$F_{Rastrigin}(x) = 10n + \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i))$$

$$(-5.12 \leq x_i < 5.12)$$

Schwefel 関数は、最適解を探索領域の境界付近に持つ多峰性関数である．本検討では、定義域内における関数評価値の最小値を式 (3) から減算し、最適解の関数評価値が 0 となるよう調節した．

$$F_{Schwefel}(x) = \sum_{i=1}^n -x_i \sin\left(\sqrt{|x_i|}\right) \quad (3)$$

$$(-512 \leq x_i < 512)$$

Rosenbrock 関数は、設計変数間に依存関係のある単峰性関数である．

表 1 DPMBGA のパラメータ
Table 1 Parameters of DPMBGA.

Population size	512
Number of islands	32
Number of elites	1
Migration interval	5
Migration rate	0.0625
Archive size for PCA	100
Mutation rate	0.1 / (Dim. of functions)

$$F_{Rosenbrock}(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \left(100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2\right)$$

$$(-2.048 \leq x_i < 2.048)$$

Ridge 関数は、Rosenbrock 関数と同様に設計変数間に依存関係のある単峰性関数である．

$$F_{Ridge}(x) = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^i x_j\right)^2$$

$$(-64 \leq x_i < 64)$$

数値実験に用いた DPMBGA のパラメータを表 1 に示す．これらのパラメータは文献 5) に従った．分散の増幅率およびサンプリング率は、以降の実験により最適な値を検討する．本検討では、関数評価値が 1.0×10^{-10} 以下のとき、最適解に到達したと見なす⁵⁾．また、最良個体が最適解に到達するか、評価計算回数が 3.0×10^6 回を超えた時点で探索を打ち切る．

4.2 分散の増幅率の検討

分散の増幅率を 1.0 から 3.0 まで 0.1 間隔で変化させたときの、試行数 20 における最適解発見回数を図 4 に示す．縦軸は最適解発見回数、横軸は分散の増幅率である．また図 5 に、最適解発見に要した平均の評価計算回数を示す．縦軸は評価計算回数、横軸は分散の増幅率である．サンプリング率は 0.25 を用い⁵⁾、対象問題の次元数を 20 とした．

図 4 より、Rastrigin 関数では分散の増幅率 1.7 以下、Schwefel 関数では 1.9 以下において良好な探索を行えていることが分かる．文献 5) では、PCA を行うモデルは設計変数間に依存関係のない多峰性関数において、効率的な探索を行えないと報告している．しかしながら、この結果より分散の増幅率を適切に調節することで、設計変数間に依存関係のない多峰性関数においても、最適解を発見できることが分かった．また図 5 より、両関数において分散の増幅率が 1.5 を超えると、最適解発見に要する評価計算回数が急増する．そのため、設計変数間に依存関係のない多峰性関数においては、分散の増幅率 1.5 以下が望ましいといえる．

次に、設計変数間に依存関係のある単峰性関数に着

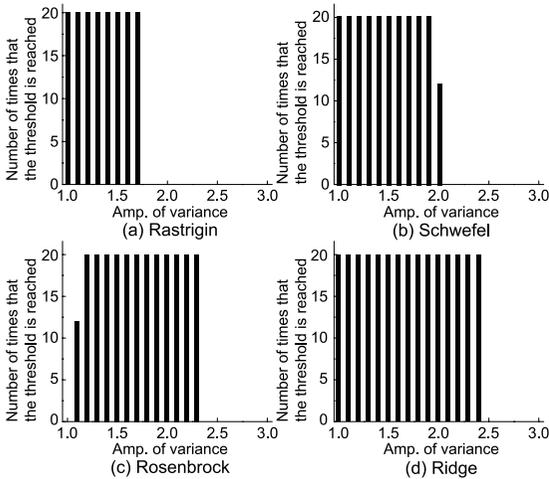


図 4 20 試行中で最適解に到達した回数

Fig. 4 Number of times that the threshold is reached.

目すると、Rosenbrock 関数では分散の増幅率 1.5 から 2.0 付近で、Ridge 関数では 1.0 から 2.0 付近において、より少ない評価計算回数で最適解を発見できていることが分かる。そのため、設計変数間に依存関係のある単峰性関数では、分散の増幅率を 1.5 から 2.0 の間に定めることが望ましいといえる。また、これらの結果から、分散の増幅率は対象問題に依存して適切な値が異なることも明らかとなった。

さらに、いずれの関数においても分散の増幅率が大きすぎる場合に、急激に最適解を発見できなくなることも分かった。これは、終了条件として定めた評価計算回数においても、個体群が最適解もしくは特定の局所解に収束できないためであると考えられる。

4.3 サンプリング率の検討

次に、サンプリング率を変化させた際の、試行数 20 における最適解発見回数を表 2 に示す。分散の増幅率は、前節の検討において比較的良好な性能を得られた 1.5 を用いた。対象問題の次元数は 20 である。

表 2 より、いずれの関数においても、サンプリング率 0.25 以下の際に効率的な探索を行えていることが分かる。これにより、文献 5) において推奨されているサンプリング率 0.25 は、比較的妥当な値であることが分かった。また、サンプリング率が 0.25 を超えた場合には、対象問題に依存して解探索性能が悪化する。サンプリング率が高すぎる場合、確率モデル構築に用いる統計情報に劣悪な個体情報が多く含まれることにより、効率的な探索が難しくなるものと考えられる。これらから、サンプリング率は 0.25 以下に定めることが望ましいといえるが、1 島の個体数や分散の増幅率などの他のパラメータにも依存することが懸念

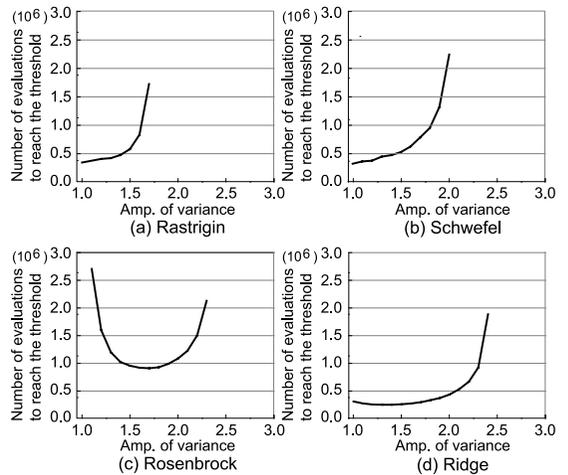


図 5 最適解に到達するまでの平均評価計算回数

Fig. 5 Average number of evaluations to reach the threshold.

表 2 20 試行中で最適解に到達した回数

Table 2 Number of times that the threshold is reached.

Sampling Rate	0.125	0.25	0.375	0.5	0.75
Rastrigin	20	20	0	0	0
Schwefel	20	20	0	0	0
Rosenbrock	20	20	20	20	0
Ridge	20	20	20	20	0

されるため、今後もより詳細な検討が必要であると考えられる。

4.4 分散の増幅率の適応的調節メカニズム

4.2 節および 4.3 節の検討により、DPMBGA 固有のパラメータにおいて、分散の増幅率は対象問題に依存して適切な値が異なること、適切な値を求めるためには多くの予備実験が必要であることが分かった。そのため、本論文では分散の増幅率を適応的に調節するメカニズムを提案する。

4.4.1 適応的調節メカニズムの詳細

分散の増幅率は、子個体の生成範囲に大きな影響を及ぼす。分散の増幅率が小さい場合、子個体は狭い範囲に生成され、逆に大きい場合は広い範囲に生成される。そのため、分散の増幅率が小さすぎる場合は母集団が早熟収束し、また大きすぎる場合は収束しないため、結果として解探索性能が悪化する。これらから、子個体は母集団と同等か、やや狭い範囲に生成されることが望ましいと考えられる。DPMBGA は分割母集団モデルを採用しているため、各サブ母集団において生成される子個体が、サブ母集団内の個体群と同等かやや狭い範囲に生成されるメカニズムが必要であるといえる。

分布の広がりを測定する方法の1つに一般化分散がある。ある世代において、あらかじめサブ母集団内の個体群の座標値から一般化分散値を計算する。その値をもとに、子個体生成において目標とする一般化分散値の範囲を定める。以後、この範囲を子個体生成範囲と呼ぶ。子個体生成範囲はサブ母集団内の個体群から得られた一般化分散値と同じか、やや小さい値を含む範囲が望ましい。そのため、本論文ではサブ母集団内の個体群の一般化分散値の50%から100%の範囲を子個体生成範囲とする。各サブ母集団において、子個体生成範囲内に子個体を生成するために、分散の増幅率を適応的に調節する以下のアルゴリズムを提案する。分散の増幅率の初期値は文献5)を参考に2.0とした。また、適応的に変化する分散の増幅率は世代をまたいで保持される。

- (1) エリートの保存
- (2) サブ母集団の個体群の一般化分散値の計算
- (3) 良好な個体の抽出
- (4) PCAを用いた設計変数の無相関化
- (5) 正規分布による確率モデルの構築
- (6) 構築した確率モデルによる子個体生成
- (7) 設計変数の相関の復元
- (8) 制約条件外の子個体の、実行可能領域境界上への引き戻し
- (9) 子個体の一般化分散値の計算
- (10) 子個体の受理判定
 - (a) 1世代における受理判定回数が10を超える場合、ステップ(11)へ進む。
 - (b) 子個体の一般化分散値が子個体生成範囲内であればステップ(11)へ進む。
 - (c) 子個体の一般化分散値が子個体生成範囲より大きければ、分散の増幅率を0.1減少させステップ(5)に戻る(ただし、分散の増幅率が0.1以下になるならば変化させない)。
 - (d) 子個体の一般化分散値が子個体生成範囲より小さければ、分散の増幅率を0.1増加させステップ(5)に戻る。
- (11) 島内の個体の置き換え
- (12) 個体の適合度の評価
- (13) エリートアーカイブの更新
- (14) 一定世代ごとの移住操作
- (15) エリートの復帰

提案するアルゴリズムでは、子個体に突然変異を適用しない。子個体に突然変異を適用した場合、突然変異適用前と比較して、一般に子個体の一般化分散値は

増加する。そのため、突然変異適用後の子個体を、ステップ(10)の操作により子個体生成範囲内に収めると、必然的に確率モデルから生成された子個体(突然変異適用前の子個体)の一般化分散値は、子個体生成範囲よりも小さな値となる。これにより、サブ母集団の収束が促進され、効率的な探索が難しくなる。

4.4.2 解探索性能の検討

従来型のDPMBGAとの性能比較を通じ、前節で述べた分散の増幅率の適応的調節メカニズムを有するDPMBGAの解探索性能を検討する。以後、提案するメカニズムを有するDPMBGAを「Adaptive DPMBGA」と表記する。本検討で用いたパラメータは表1のとおりであるが、正確な一般化分散値を計算するためには1島の個体数を十分に大きくする必要があるために、Adaptive DPMBGAでは島数を4(1島の個体数を128)とした。

Rastrigin関数およびRosenbrock関数において、対象問題の次元数を10とした際の、従来型のDPMBGAおよびAdaptive DPMBGAの解探索履歴を図6、図7に示す。横軸に評価計算回数、縦軸に関数評価値をとり、20試行中の中央値を示した。最小化問題であるため、低い関数評価値を少ない評価計算回数で得られることが、良好な解探索であることを意味する。また、従来型のDPMBGAでは分散の増幅率1.0、2.0、3.0の3パターンについて示す。図6、図7より、Adaptive DPMBGAは両関数において最適解を発見できていることが分かる。最適解発見に要する評価計算回数に着目すると、Adaptive DPMBGAは、適切な分散の増幅率を適用した従来型のDPMBGAと同等もしくはやや劣るが、不適切な分散の増幅率を適用した従来型のDPMBGAより優れた性能を示している。

次に、ある1試行の解探索における分散の増幅率の履歴を図8、図9に示す。横軸に世代数、縦軸に関数評価値と分散の増幅率をとった。分散の増幅率は4島の平均である。図8、図9より、両関数の履歴には大きな違いがあり、Rastrigin関数では解探索序盤において分散の増幅率1.0から1.5の範囲で、Rosenbrock関数では解探索全般において2.0付近で解探索を行っていることが分かる。これらは、4.2節の検討により得られた、有効な分散の増幅率の範囲に含まれており、提案するメカニズムを用いることで、有効な分散の増幅率を解探索中に特定でき、予備実験なしに比較的良好な解探索性能を得られることが分かった。

また提案するメカニズムの興味深い点として、Rastrigin関数の解探索中盤および終盤において、分散の増幅率が1.5から2.0の範囲に遷移している点があげ

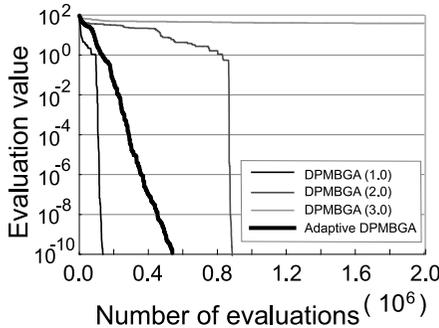


図 6 Rastrigin 関数における解探索履歴
Fig. 6 History of evaluation values (Rastrigin).

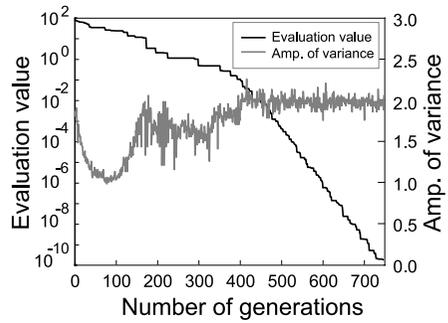


図 8 Rastrigin 関数における解探索と分散の増幅率の履歴
Fig. 8 History of evaluation value and amp. of variance (Rastrigin).

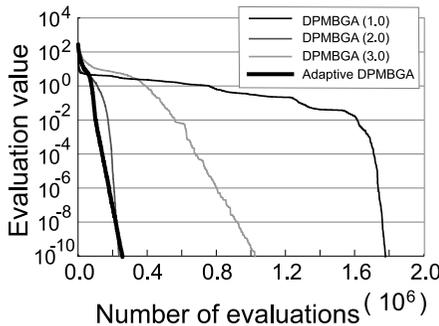


図 7 Rosenbrock 関数における解探索履歴
Fig. 7 History of evaluation values (Rosenbrock).

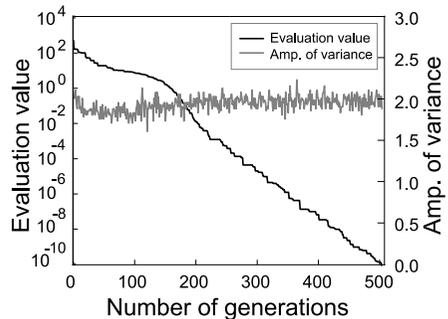


図 9 Rosenbrock 関数における解探索と分散の増幅率の履歴
Fig. 9 History of evaluation value and amp. of variance (Rosenbrock).

られる．この範囲は，Rosenbrock 関数などの単峰性関数に有効な範囲であるが，多峰性関数である Rastrigin 関数においても，解探索中盤以降に各サブ母集団内の個体群が特定の局所解に集中したことで，結果として単峰性関数と同様の解探索が行われたものと考えられる．

一方で，提案するメカニズムでは，一般化分散値を得るために鳥数を少なく（1 島の個体数を十分に大きく）しなければならない点が欠点としてあげられる．鳥数を少なくすることは，分割母集団モデルの利点を有効に活用できないことを意味する．そのため，別の尺度を用いた分布の比較について，今後検討する必要がある．

5. 解探索メカニズムの検討

多峰性関数および設計変数間に依存関係のある関数は，一般的に最適解を発見することが難しい．DPMBGA はこのような特徴を持つ関数においても，高い解探索性能を示すことがすでに明らかとなっている．しかしながら，その解探索メカニズムについては不明な部分が多い．本検討では Rastrigin 関数と Rosenbrock 関数の 2 つのテスト関数を用い，DPMBGA の

解探索メカニズムを検討する．検討には，従来型の DPMBGA および表 1 のパラメータを用いた．鳥数は 32（1 島の個体数は 16）である．また 4.2 節および 4.3 節のパラメータ検討に基づき，分散の増幅率は 1.5，サンプリング率は 0.25 とした．DGA の効果を検討するために，鳥数を 1（1 島の個体数を 512）としたモデルを用意し，従来型の DPMBGA と区別するために「PMBGA」と表記する．また PCA の効果についても検討するために，PCA による設計変数の無相関化を行わない DPMBGA を用意し，「DPMBGA without PCA」と表記する．

5.1 Rastrigin 関数における検討

多峰性関数の 1 つである Rastrigin 関数を用い，DPMBGA の解探索メカニズムを検討する．対象問題の次元数を 20 とした際の，PMBGA と DPMBGA の解探索履歴を図 10 に示す．横軸に評価計算回数，縦軸に関数評価値をとり，20 試行中の中央値を示した．最小化問題であるため，低い関数評価値を少ない評価計算回数で得られることが，良好な解探索であることを意味する．

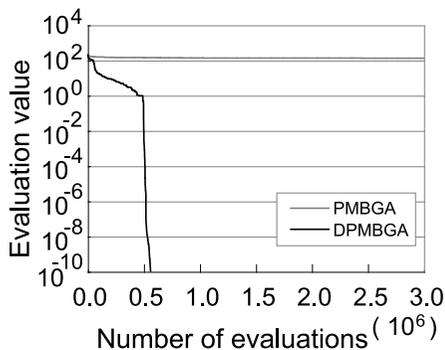


図 10 Rastrigin 関数における解探索履歴
Fig. 10 History of evaluation values (Rastrigin).

図 10 より、DPMBGA は PMBGA より良好な解探索を行っていることが分かる。多峰性関数である Rastrigin 関数において、分割母集団モデルを採用する DPMBGA では、母集団の多様性が維持されたことにより、解探索性能が向上したものと考えられる。対象問題の次元数を 2 とし、DPMBGA の島数を 2 (1 島の個体数を 16) とした際の、各島の個体分布の変遷を図 11 に示す。図 11 の背景は目的関数のランドスケープを示しており、白い部分は関数評価値が低い領域を、黒い部分は関数評価値の高い領域を表している。また移住の効果を明らかにするために、分散の増幅率を 0.5 とし、各島の個体群が急速に局所解に収束するよう設定した。

図 11 より、解探索序盤において DPMBGA の各島の個体群は局所解に収束していることが分かる。しかしながら、移住操作により島間で個体を交換することで、局所解から抜け出すことができ、最終的に最適解に収束できていることが分かる。そのため、Rastrigin 関数のような多峰性の関数においては、分割母集団モデルが有効に機能し、解探索性能の向上に寄与していることが分かる。

5.2 Rosenbrock 関数における検討

次に、設計変数間に依存関係のある Rosenbrock 関数を用い、DPMBGA の解探索メカニズムを検討する。対象問題の次元数を 20 とした際の、PMBGA、DPMBGA および DPMBGA without PCA の解探索履歴を図 12 に示す。

図 12 より、Rosenbrock 関数では DPMBGA のみ最適解を発見でき、その他のモデルでは最適解を発見できないことが分かる。そのため、設計変数間に依存関係のある単峰性関数においては、PCA による設計変数の無相関化だけでなく、分割母集団モデルも良好な解探索に寄与しているものと考えられる。しかし

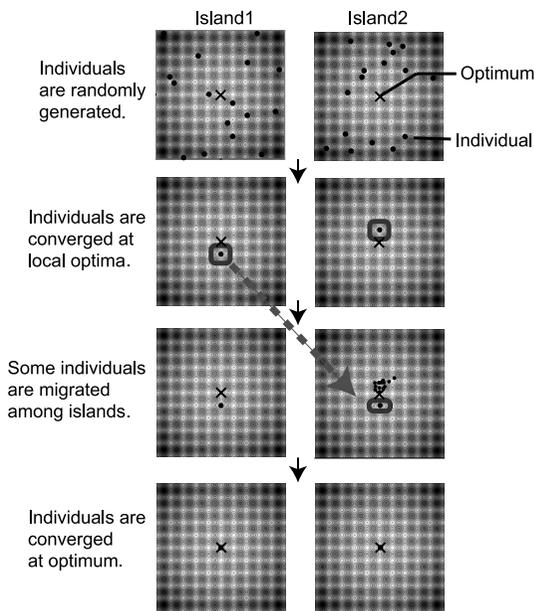


図 11 Rastrigin 関数における個体分布の変遷
Fig. 11 Transition of sub-population distributions (Rastrigin).

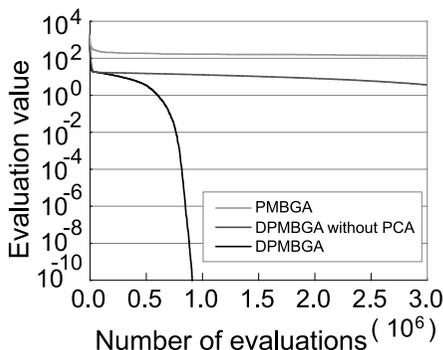


図 12 Rosenbrock 関数における解探索履歴
Fig. 12 History of evaluation values (Rosenbrock).

ながら、本検討では母集団サイズを 512 に統一しており、島数 1 の PMBGA と島数 32 の DPMBGA では、1 島の個体数が異なる。そのため、サンプリング率 0.25 におけるサンプル個体数は PMBGA で 128、DPMBGA で 4 となりモデルにより異なる。サンプル個体数の違いが、解探索性能に影響を及ぼしている可能性を検討するため、PMBGA においてサンプル個体数を変化させた際の最適解発見回数を表 3 に示す。表 3 より、PMBGA ではサンプル個体数を変化させても最適解を発見することができなかった。これらから、分割母集団モデルが良好な解探索に寄与していることが明らかとなった。

表 3 20 試行中で最適解に到達した回数

Table 3 Number of times that the threshold is reached.

Number of selected individuals	4	8	16	32	64	128
PMBGA	0	0	0	0	0	0

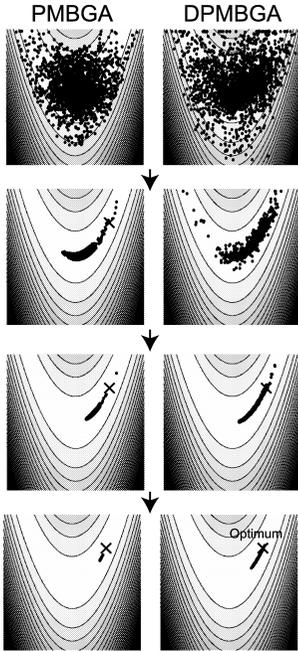


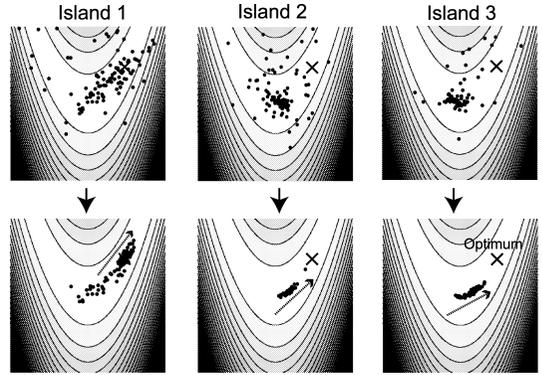
図 13 最良個体群分布の変遷

Fig. 13 Transition of distributions of archived individuals.

分割母集団モデルの解探索に与える影響をより詳細に検討するために、アーカイブに格納された最良個体群の分布に着目する。PMBGA および DPMBGA における最良個体群の分布の変遷を図 13 に示す。図 13 では、対象問題の次元数を 2 とし、アーカイブサイズを PMBGA で 3200、DPMBGA で 100 とした。DPMBGA の島数は 32 である。DPMBGA は島ごとにアーカイブを保持するが、図 13 では全島のアーカイブを統合した分布を示している。また、代表的な 3 島における最良個体群の分布の変遷を図 14 に示す。

図 13 より、アーカイブに格納された最良個体群においても、DPMBGA は PMBGA に比べ多様性を維持できていることが分かる。DPMBGA では分割母集団モデルを用いることにより、母集団全体の多様性を保ちながら探索を行えるため、結果として最良個体群の分布も多様性が保たれたものと考えられる。図 14 において DPMBGA の各島の最良個体群は、初期点に依存した異なる分布を形成していることが分かる。

次に図 14 の下図に着目し、各島の最良個体群の分布から導かれるであろう第 1 主成分ベクトルを想定



(→) : First Principal Component

図 14 各島の最良個体群分布の変遷

Fig. 14 Transition of distributions of archived individuals in each island.

する。DPMBGA における PCA を用いた設計変数の無相関化では、座標軸の平行移動と主成分ベクトルによる座標軸の回転のみ、設計変数間の依存関係を考慮する。そのため、Rosenbrock 関数のように設計変数間に複雑な依存関係を有する関数では、設計変数間の依存関係を正しく把握できないものと考えられる。図 14 の下図において、島 1 の最良個体群は最適解付近に分布しているため、最適解方向を向く第 1 主成分ベクトルを得ることができている。しかしながら、島 2、島 3 のように分布の中心が最適解から離れるにつれ、第 1 主成分ベクトルは最適解方向を指し示さなくなる。一方で、DPMBGA は分割母集団モデルを採用しているため、複数の主成分ベクトルを用いて探索を行うことができる。図 14 の下図において、各島は最良個体群の分布に従い、目的関数の等高線の接線方向を探索している。ここで、すべての島における探索を総合すると、非線形な目的関数の谷部分を探索でき、複雑な依存関係も考慮できているのではないかと考えられる。反対に、PMBGA は単島モデルであるため、座標軸の平行移動と回転でしか依存関係を考慮できず、結果として効率的な探索を実現できないものと考えられる。

これらについて検証するために、図 13 のアーカイブ群を対象とし、各世代の最良個体群の座標値から最小二乗法を用いて近似直線を取得する。取得した近似直線と最適解との距離の履歴を図 15 に示す。図 15 より、PMBGA は探索序盤および終盤において、最適解との距離を単調に縮めることができていない。これは、設計変数間の複雑な依存関係を考慮できていないために、探索状況に応じて最良個体群に偏りが生じているものと考えられる。一方で DPMBGA は、探

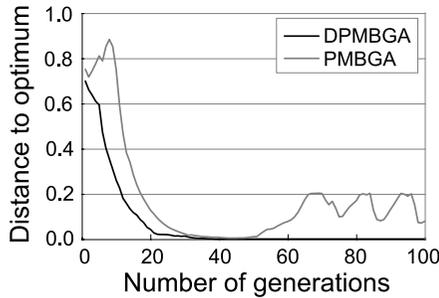


図 15 最小二乗近似直線と最適解との距離の履歴
Fig. 15 History of distance to optimum.

索全般を通じて最適解との距離を単調に縮めることができ、複雑な依存関係を正しく考慮できているといえる。これらから、設計変数間に依存関係のある単峰性関数においては、PCA だけでなく分割母集団モデルを用いることで、設計変数間の依存関係を正しく考慮でき、効率的な探索を実現できるといえる。

6. ま と め

DPMBGA は確率モデル遺伝的アルゴリズムの分割母集団モデルであり、主成分分析を用いて設計変数の依存関係を考慮する。複数のテスト関数を用いた数値実験により、DPMBGA の高い解探索性能がすでに明らかとなっているが、DPMBGA 固有のパラメータや解探索メカニズムについては検討されていない。そのため、本論文ではまず DPMBGA 固有のパラメータである分散の増幅率とサンプリング率について検討を行った。その結果、分散の増幅率は対象問題に依存して最適な値が異なり、効率的な解探索には多くの予備実験が必要であることが分かった。この問題を解決するために、分散の増幅率を適応的に調節する新しいメカニズムを提案した。その結果、予備実験なしに従来の DPMBGA と同等の解探索性能を得ることが可能となった。また、本論文では多峰性関数と設計変数間に依存関係のある関数を用いて、DPMBGA の解探索メカニズムを検討した。検討により、多峰性関数においては分割母集団モデルにより多様性を維持することが重要であることが分かった。一方で、設計変数間に依存関係のある問題においては、分割母集団モデルと主成分分析を組み合わせることで、効果的な解探索性能を実現できることが分かった。

参 考 文 献

1) Goldberg, D.E.: *Genetic Algorithms in Search Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley (1989).

- 2) Tanese, R.: Distributed Genetic Algorithms, *Proc. 3rd International Conference on Genetic Algorithms*, pp.434–439 (1989).
- 3) Cantú-Paz, E.: *Efficient and Accurate Parallel Genetic Algorithms*, Kluwer Academic Publishers (2000).
- 4) Pelikan, M., Goldberg, D.E. and Lobo, F.: A Survey of Optimization by Building and Using Probabilistic Models, Technical Report 99018, IlliGAL (1999).
- 5) 廣安知之, 三木光範, 下坂久司, 佐野正樹, 筒井茂義: 分散確率モデル遺伝的アルゴリズム, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, Vol.45, No.SIG2, pp.56–65 (2004).
- 6) Larranaga, P. and Lozano, J.A.: *Estimation of Distribution Algorithms, A New Tool for Evolutionary Computation*, Kluwer Academic Publishers (2001).
- 7) De Bonet, J.S., Isbell, C.L. and Viola, P.: MIMIC: Finding Optima by Estimating Probability Densities, *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol.9, pp.424–431 (1997).
- 8) Mühlenbein, H., Mahnig, T. and Ochoa, A.R.: Schemata, Distributions and Graphical Models in Evolutionary Optimization, *Journal of Heuristics*, Vol.5, No.2, pp.215–247 (1999).
- 9) Pelikan, M., Goldberg, D.E. and Cantú-Paz, E.: BOA: The Bayesian Optimization Algorithm, Technical Report 99003, IlliGAL (1999).
- 10) Rudolph, G.: On Correlated Mutations in Evolution Strategies, *Parallel Problem Solving from Nature — PPSN II*, pp.105–114 (1992).
- 11) Hansen, N.: Invariance, Self-Adaptation and Correlated Mutations and Evolution Strategies, *Parallel Problem Solving from Nature — PPSN VI*, pp.355–364 (2000).

(平成 18 年 2 月 17 日受付)

(平成 18 年 4 月 9 日再受付)

(平成 18 年 5 月 10 日採録)



下坂 久司 (学生会員)

1979 年生。2004 年同志社大学大学院工学研究科修士課程修了。同年同志社大学大学院工学研究科博士課程入学。進化的最適化手法の 1 つである遺伝的アルゴリズム, グリッドにおける並列・分散処理に興味を持つ。人工知能学会学生会員, 超並列計算研究会会員。



平井 聡

1981年生。2004年同志社大学工学部卒業。2006年同志社大学大学院工学研究科修士課程修了。同年TIS株式会社入社。ヒューリスティック最適化手法の1つである遺伝的アル

ゴリズムに興味を持つ。



廣安 知之（正会員）

1997年早稲田大学大学院理工学研究科後期博士課程修了。早稲田大学理工学部助手を経て、1998年同志社大学工学部助手。2003年より同志社大学工学部助教授。進化的計

算、最適設計、並列処理、設計工学等の研究に従事。IEEE、電気情報通信学会、計測自動制御学会、日本機械学会、超並列計算研究会、日本計算工学会各会員。



三木 光範（正会員）

1950年生。1978年大阪市立大学大学院工学研究科博士課程修了、工学博士。大阪市立工業研究所研究員、金沢工業大学助教授を経て、1987年大阪府立大学工学部航空宇宙工学科

助教授、1994年同志社大学工学部教授。進化的計算手法とその並列化、および知的なシステムの設計に関する研究に従事。著書に『工学問題を解決する適応化・知能化・最適化法』（技法堂出版）等多数。IEEE、米国航空宇宙学会、人工知能学会、日本機械学会、計算工学会、日本航空宇宙学会等各会員。通産省産業技術審議会委員等歴任。超並列計算研究会代表。