

擬似焼き鈍し法を導入した分布推定 アルゴリズムに関する検討

前田 陽樹[†] 棟朝 雅晴^{††} 赤間 清^{††}

分布推定アルゴリズム (Estimation of Distribution Algorithms, EDA) は、有望な解集団の分布からその分布を表す確率モデルを構築し、構築されたモデルから新しい解を生成するアルゴリズムである。モデルを用いることで変数間の依存関係を考慮することができ、GA 困難な問題においても有効である。その反面、モデル構築の計算コストが大きくなってしまふという欠点も持っている。そのような最適化手法の開発が進む一方で、それらの手法と局所探索手法の融合手法も研究されている。そこで本論文では、EDA 手法の一つである Bayesian Optimization Algorithm(BOA) に擬似焼き鈍し法 (Simulated Annealing, SA) による局所探索を導入した手法について検討する。

Consideration of Estimation of Distribution Algorithms employing Simulated Annealing

HARUKI MAEDA,[†] MASAHARU MUNETOMO^{††} and KIYOSHI AKAMA ^{††}

Estimation of Distribution Algorithms(EDAs) build a probabilistic model which reflects promising solutions and generate new solutions using the model. Considering the dependencies between the variables with the model, they can solve GA-difficult problems. On the other hand, EDAs have a drawback they need extensive computational cost for building the model. While the development of such optimization methods is advanced, the hybridizations of these methods and local search methods are widely studied. In this paper, we propose a hybrid algorithm of Bayesian Optimization Algorithm(BOA), which is one of EDAs, and a local search employing Simulated Annealing(SA).

1. はじめに

分布推定アルゴリズム (Estimation of Distribution Algorithms, EDA)³⁾ は近年の進化的計算分野の研究の中で登場してきた新しいアルゴリズムである。EDA では従来の GA で用いられる遺伝的操作の代わりに、選択された有望な解集団の分布からその分布を表す確率モデルを構築し、得られたモデルを基に新たな解を生成し、探索を進める。モデルにより依存関係を自動で検出することができるため、コード化の際の専門的知識を必要とせず、変数間に依存関係があるような GA 困難な問題に対しても有効な手法である。一方で、モデルを構築する計算コストが大きという欠点も持っている。

新しい進化的計算手法の開発が進む一方で、それら

手法の融合手法の研究も進められている。その中の一つの枠組みとして、大域探索手法と局所探索手法の融合手法が広く研究されている。このような融合方法は、大まかな大域的構造の探索を行った後に細かな局所的構造の探索を行うという点で、人間が現実における問題で用いる探索手順に似ているため、現実世界の多くの最適化問題に有効であると考えられている。

本論文では、EDA 手法の一つである Bayesian Optimization Algorithm (BOA)¹⁾ に、擬似焼き鈍し法 (Simulated Annealing, SA)²⁾ による局所探索を導入した、BOA+SA 手法について検討する。大域探索手法と局所探索手法の融合により、現実における問題に高い性能を示すような手法を目指し、性能向上による実行時間の削減について検討する。以下では、まず本論文での融合対象の手法である BOA と SA について説明する。続いて、BOA と SA のハイブリッド手法の詳細について述べる。最後に、テスト関数での実験結果を提示し、考察を行う。

[†] 北海道大学大学院 情報科学研究科
Graduate School of Information Science and Technology, Hokkaido University.

^{††} 北海道大学 情報基盤センター
Information Initiative Center, Hokkaido University.

2. Bayesian Optimization Algorithm

Pelikan によって提案された Bayesian Optimization Algorithm(BOA)¹⁾ は、複数の変数間に依存があるような問題にも有効な EDA 手法である。BOA のアルゴリズムを図 1 に示す。

- (1) 初期集団 (個体数 N) をランダムに生成する
- (2) 適応度の評価を行う
- (3) 親個体集団 (個体数 M) の選択を行う
- (4) 選択された集団の分布から Bayesian Network(BN) を構築する
- (5) BN に基づいて子個体集団を生成する
- (6) 集団の一部を子個体集団に置き換えたものを次世代集団とする
- (7) 終了条件を満たしていれば終了、それ以外は 2 へ戻る

図 1 BOA のアルゴリズム

BOA が構築する確率モデルは Bayesian Network(BN) と呼ばれる。BN は変数を表すノードと変数間の依存関係を表すアークで構成される。 πx_i から x_i へアークがあるときに πx_i を x_i の親ノードといい、 πx_i は x_i の状態決定に直接影響する変数であることを意味する。このとき x_i の状態は、その親ノード集合 Πx_i の条件付確率によって決定されるので、全ての確率変数の同時確率分布は

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^l p(x_i | \Pi x_i) \quad (1)$$

と表すことができる。

3. Simulated Annealing

擬似焼き鈍し法 (Simulated Annealing, SA)²⁾ は金属の焼き鈍し過程を模した最適化手法である。SA は Local Search と同様の近傍遷移による探索を行うため、局所探索に長けた手法である。SA のアルゴリズムを図 2 に示す。

Metropolis 規則では、次状態 x' の受容確率を以下の式で設定する。

$$\text{accept}(x') = \begin{cases} 1 & \Delta E < 0 \\ \exp(-\frac{\Delta E}{T}) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

このように、SA では評価が改善する遷移だけでなく、そのときの温度に応じた確率で、評価が悪化する遷移も受容される。このため、局所最適解があるよ

- (1) 初期設定
 - (a) 初期温度を T_0 に設定する
 - (b) 初期状態 x_0 を生成し、エネルギー E を計算する
- (2) 一定温度でアニーリング
 - (a) 現在の状態 x の近傍状態 x' を生成し、エネルギー E' を計算する。
 - (b) Metropolis 規則に従って遷移判定
- (3) 冷却計画に従って温度を下げる (クーリング)
- (4) 終了条件を満たしていれば終了、それ以外は 2 へ戻る。

図 2 SA のアルゴリズム

うな問題でも、局所解を回避しながら最適解を得ることができる。

SA では温度パラメータの冷却スケジュールが重要となってくる。ゆっくり下げれば時間がかかってしまい、逆に急激に下げると局所解に陥ってしまう。現実時間で解が獲得できて実施が容易である方法としては幾何冷却法などが広く用いられている。

3.1 平衡温度二分木探索法

SA の問題点としてパラメータの設定が煩雑であることが挙げられるが、適切な初期温度の設定もその一つである。そこで、SA の初期温度推定手法として平衡温度二分木探索法 (Equilibrium Binary Search, EBS)⁴⁾ が提案されている。

EBS ではある状態において遷移の際の評価値変動の期待値が等しくなるような温度 T を探索する。EBS の手順を以下に示す。

- (1) 与えられた解について SA の生成処理を繰り返し適用し頻度分布 $P(\Delta E)$ を計測する。この際に遷移処理は行わない。
- (2) 温度を任意の初期値 T_s に設定する。
- (3) T_s と $P(\Delta E)$ より E_+ と E_- を計算する。
- (4) $E_- < E_+$ であれば、 T_s を減少させ、3 へ。
 $E_- > E_+$ であれば、 T_s を増加させ、3 へ。
 $E_- = E_+$ であれば、 T_s は平衡温度であるので終了する。

図 3 平衡温度二分木探索法のアルゴリズム

このようにして最終的に得られる温度を初期温度として用いることで、自動で初期温度を設定することが可能となる。

4. 提案手法

本論文ではEDA手法の一つであるBOAに局所探索手法であるSAを導入したBOA+SA手法を提案する。BOA+SAは大域探索と局所探索の融合手法であり、現実おける問題で高い性能を示すことができるものとする。BOA+SAの手順を図4に示す。

- (1) 初期集団 (個体数 N) をランダムに生成する
- (2) 適応度の評価をおこなう
- (3) 親個体集団 (個体数 M) の選択をおこなう
- (4) 選択された集団の分布から Bayesian Network(BN) を構築する
- (5) BNに基づいて子個体集団を生成し評価する
- (6) 生成した子個体集団のうち一部の個体群にSA局所探索を適用する
- (7) 集団の一部を子個体集団に置き換えたものを次世代集団とする
- (8) 終了条件を満たしていれば終了、それ以外は3へ戻る

図4 BOA+SAのアルゴリズム

BOAで得られた解はそのときの評価等によって、今の解をあまり壊すべきでなく低い初期温度を設定する方が良い場合もある。しかし初期温度を任意に設定する単純SAでは、移行する際にその解に適した初期温度設定がなされない場合が考えられる。

そこで、解に適切な初期温度を自動で設定することができるEBSを導入することで、BOAで得られた解に適した初期温度からのSA局所探索が行えるようにした。EBSを導入することにより余分なアニーリングの削減や、BOAで得られた解の質の保存などの効果が得られるものと考えられる。以下ではSAだけを組み合わせた手法をBOA+sSA、EBSも導入した手法をBOA+sSA+EBSと呼ぶこととする。

5. 実験

5.1 テスト関数

ここではテスト関数としてRastrigin関数を用いた場合の実験結果を示す。Rastrigin関数は以下の式で与えられる。

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

$$(\min(F_{Rastrigin}(\mathbf{x})) = F(0, 0, \dots, 0) = 0) \quad (3)$$

x_i は、 $-5.12 < x_i < 5.12$ を取る実数で、個体表現

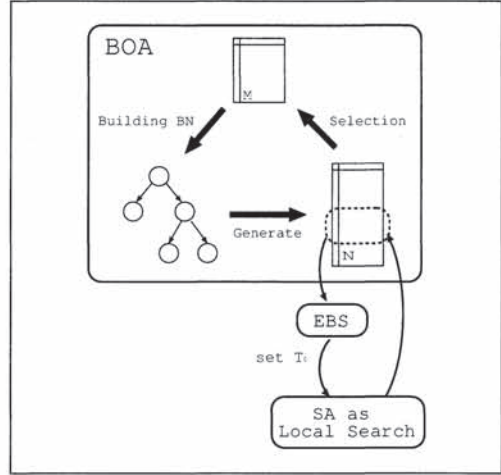


図5 BOA+sSA+EBS概要図

では連続する遺伝子10ビットをデコードした値となる。Rastrigin関数は大域的に深い谷を多数持つため最適解を持つ谷の発見が難しく、局所解に陥りやすくなっている。

5.2 実験結果

テスト関数を用いて、BOA、BOA+sSA、GA+sSA、BOA+sSA+EBSでの実行時間比較の実験を行った。実験は異なる乱数シードで10回の探索を行い、結果はその平均値とする。集団サイズは、10回の探索の全てで解が得られ、かつ、できる限り少ないものを用いることとする。今回の実験では、BOA+sSA、GA+sSA、BOA+sSA+EBS中のSA局所探索は子個体集団中の10%の個体に適用することとする。

全実行時間の比較図を図6に、その他のデータを表1に載せる。表1のモデル構築平均時間、SA局所探索平均時間は世代毎の平均時間を意味している。

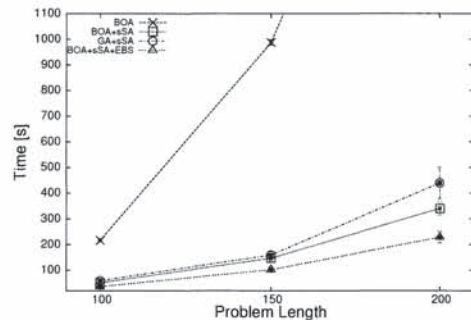


図6 Rastrigin関数での各手法の全実行時間比較

表 1 Rastrigin 関数での各手法の実行時間 (単位:秒)

	問題長	集団サイズ	全実行時間	モデル構築 平均時間	SA 局所探索 平均時間
100	BOA	8000	216.3	4.11	-
	BOA+sSA	400	51.6	1.01	2.67
	GA+sSA	400	59.3	-	2.66
	BOA+sSA+EBS	400	36.9	1.03	1.28
150	BOA	14000	987.0	17.34	-
	BOA+sSA	500	146.6	3.02	7.36
	GA+sSA	400	159.1	-	5.87
	BOA+sSA+EBS	400	101.9	2.72	3.22
200	BOA	16000	2537.1	38.91	-
	BOA+sSA	600	340.0	6.39	15.54
	GA+sSA	500	439.1	-	12.91
	BOA+sSA+EBS	500	228.0	5.93	7.18

5.3 考 察

まず、融合手法が BOA 単体より、全ての問題長について集団サイズ、全実行時間の削減ができていくことがわかる。大域探索と局所探索の融合による性能向上を見て取れる。

BOA+SA 手法 (BOA+sSA, BOA+sSA+EBS) の全実行時間削減の要因として、集団サイズ削減によるモデル構築時間の削減はもちろんだが、集団サイズを削減しても探索性能が落ちないために不可欠である SA 局所探索の実行時間も重要になってくる。BOA+SA 手法ではモデル構築時間と SA 局所探索時間が探索全体の時間のほとんどを占めるので、全実行時間が削減されるためには、BOA+SA 手法におけるモデル構築時間と SA 局所探索時間の合計が、BOA のモデル構築時間を下回っていないと難しいと考えられる。そこでこれらの実行時間の比較をしてみると、全問題長において上記条件を満たすことができていることがわかる。全実行時間削減はこの要因によるものであると考えられる。

GA+sSA と BOA+SA 手法を比較してみると、全ての問題長で BOA+SA 手法が少ない実行時間で探索を終えることができている。GA+sSA は BOA+sSA よりも少ない集団サイズで探索できているので、GA+sSA では探索にかかる世代数が多くなっていて、探索の効率で BOA+sSA に劣っていることがうかがえる。また、GA+sSA では問題長が大きくなると結果のばらつきが大きくなるが、BOA+SA 手法ではばらつきも小さく安定性の高さも見て取れる。

そして、全て問題長で BOA+sSA+EBS が BOA+sSA より少ない実行時間での探索ができている。この実行時間削減は、BOA+sSA+EBS の SA 局所探索時間は BOA+sSA の SA 局所探索時間の半分以下に削減されていることによるものであると考えられる。EBS を組み込んだことによって、必要以上に高温な初期温度か

ら SA が始まるようなことが無くなり、余分なアニーリングの時間が削減されたものと考えられる。

6. おわりに

本研究では、分布推定アルゴリズム手法の一つである BOA に局所探索手法である SA による局所探索を導入した BOA+SA 手法を提案した。単純 SA を組み合わせた BOA+sSA、さらに解に適切な初期温度を設定する EBS を導入した SA を組み合わせた BOA+sSA+EBS を提案した。テスト関数による実験により、BOA 単体では困難な問題に対する効果を示し、GA+SA 手法との性能比較により性能の高さを示した。探索の際の集団サイズ、実行時間の面での改善から提案手法の有効性を示した。

参 考 文 献

- 1) Martin Pelikan, David E. Goldberg, Erick Cantú-Paz(1999) "BOA:The Bayesian Optimization Algorithm" IlliGAL Report No. 99003.
- 2) Kirkpatrick S., C.D. Gelatt Jr., M.P. Vecchi(1983) "Optimization by Simulated Annealing" Science 220,671-680
- 3) Larrañaga P.,Lozano J.A.(2002) "Estimation of distribution algorithms:a new tool for evolutionary computation" Boston MA:Kluwer Academic Publishers.
- 4) Rose, J., Klebsch, W., and Wolf, J. (1990) "Temperature measurement and equilibrium dynamics of simulated annealing placement" IEEE Trans. CAD 9, 253-259.