

混合システムの視点に基づく遺伝的アルゴリズムのモデリング

今井 順一* 塩谷 浩之† 栗原 正仁†

†北海道大学大学院工学研究科 †室蘭工業大学

* E-mail: imagine@main.eng.hokudai.ac.jp

Abstract: 遺伝的アルゴリズム (GA) を理論的に解析する従来の研究は、対象となる GA を限定し、その振舞いを精密に記述する。これに対し本研究では、GA を、現世代の個体群を入力、次世代の個体群を出力とした入出力データを発生する情報源と見なし、データからの学習を行う。GA の入出力関係のみに注目し、その内部構造を捨象することで、多様な GA を共通の形式で記述するとともに、従来にない視点からの解析が可能となる。本研究では、この入出力関係の表現として混合モデルを採用する。GA を混合システムの視点からモデリングすることで、多くの要素が複雑に絡み合う GA を部分システムに分解した表現が得られる。本研究では 2 種類の混合モデルを取り上げ、これらを利用した GA 解析の有効性を検証する。

Modeling of Genetic Algorithms Based on the Viewpoint of Mixture Systems

Jun-ichi IMAI*, Hiroyuki SHIOYA†† and Masahito KURIHARA†

† Graduate School of Engineering, Hokkaido University †† Muroran Institute of Technology

* E-mail: imagine@main.eng.hokudai.ac.jp

Abstract: In this paper, we propose a method for modeling and analyzing genetic algorithms based on the viewpoint of mixture systems. We use a mixture model for estimating deterministic transitions of infinite populations from stochastic data obtained through observing a process of a genetic algorithm for finite populations. The obtained model approximates a mapping (or a vector field) which characterizes the genetic algorithm. Then, the genetic algorithm can be represented as a mixture of some experts. In this paper, we deal two types of mixture models, and investigate how these models are effective for analysis of genetic algorithms through numerical experiments.

1 まえがき

遺伝的アルゴリズム (genetic algorithm; GA) を理論的に解析する従来の研究 [1, 2, 3] は、対象となる GA を限定し、その振舞いを精密に記述する。最も汎用性が高いと考えられる Vose モデル [3] においても、その枠組みに関しては一般の GA に適用できるが、主要な構成部分の定式化は simple GA (SGA) に対してのみ行われている。

これに対して本研究では、GA を、現世代の個体群を入力、次世代の個体群を出力とした入出力データを発生する情報源と見なし、データからの学習を行う。GA の入出力関係のみに注目し、その内部構造を捨象することで、多様な GA を共通の形式で記述するとともに、従来にない視点からの解析が可能となる。本研究では、この入出力関係の表現として混合モデルを採用する。GA を混合システムの視点

からモデリングすることで、多くの要素が複雑に絡み合う GA を部分システムに分解した表現が得られる。本研究では 2 種類の混合モデルを取り上げ、これらを利用した GA 解析の有効性を検証する。

2 準備

2.1 Vose モデルの概要

P をサイズ n の個体群とし、各個体は長さ l のビット列で表現されるとする。このとき P は集合 Ω の要素を n 個含む多重集合として表現される。ここで $\Omega = \{0, 1\}^l$ は長さ l の遺伝子型の集合を表す。各遺伝子型は整数 $0, 1, \dots, 2^l - 1$ の 2 進表現と対応するので、以後、遺伝子型を整数で表す。

P は Ω 上の分布 $\mathbf{x} = (x_0, x_1, \dots, x_{2^l-1})^T$ で特徴付けられる。ここで、 $x_k = n_k/n$ ($k = 0, 1, \dots, 2^l - 1$)、 n_k は遺伝子型 k の個体の数、 T は転置を表す。 Ω 上の分布の集合を

$$\Lambda = \left\{ \mathbf{x} \mid \sum_{k=0}^{2^l-1} x_k = 1, x_k \geq 0 (\forall k) \right\} \quad (1)$$

とする。また、サイズ n の個体群に対応する分布の集合を $\Lambda_n (C \Lambda)$ とする。

$n \rightarrow \infty$ の極限では、ある個体群の遺伝子型分布から次世代の個体群の分布へは決定論的に推移する。現代の分布が \mathbf{x} のとき、その次世代の分布を写像 $G: \Lambda \rightarrow \Lambda$ を用いて $G(\mathbf{x})$ と書く。このとき GA は

$$\mathbf{x}(t+1) = G(\mathbf{x}(t)) \quad (2)$$

という差分方程式の反復による離散力学系で記述される。ここで $\mathbf{x}(t)$ は第 t 世代の個体群の分布を表す。

n が有限のとき、遺伝子型分布 \mathbf{x} をもつ個体群から次世代の個体群を生成する GA の動作は、分布 $G(\mathbf{x})$ にしたがって Ω から n 個のサンプルを抽出することと同等と見なせる。現代の個体群の分布が \mathbf{x} のとき、次世代の個体群の分布が \mathbf{y} となる条件付き確率 $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ は次の多項分布で与えられる。

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = n! \prod_{k=0}^{2^l-1} \frac{(G(\mathbf{x})_k)^{ny_k}}{(ny_k)!} \quad (3)$$

有限の個体群サイズ n をもつ GA は、 Λ_n を状態集合、式 (3) を状態 $\mathbf{x} (\in \Lambda_n)$ から状態 $\mathbf{y} (\in \Lambda_n)$ への推移確率とする Markov 連鎖で記述される。

Vose は SGA に対して写像 G を定式化した。 G は選択オペレータに関する写像 $F: \Lambda \rightarrow \Lambda$ と遺伝子組換えに関する写像 $M: \Lambda \rightarrow \Lambda$ の合成 $G = M \circ F$ として記述される。選択オペレータとして適応度比例選択を用いた場合、 F は次のような写像となる。

$$F(\mathbf{x}) = \frac{F\mathbf{x}}{\mathbf{1}^T F\mathbf{x}} \quad (4)$$

ここで、 F は遺伝子型に与えられる適応度から定まる 2^l 次対角行列、 $\mathbf{1}$ はすべての成分が 1 の 2^l 次元ベクトルである。また、 M はその第 k 成分が

$$M(\mathbf{x})_k = (\sigma_k \mathbf{x})^T M(\sigma_k \mathbf{x}) \quad (5)$$

と記述される写像となる ($k = 0, 1, \dots, 2^l - 1$)。ここで M は交叉率 p_c と突然変異率 p_m から定まる 2^l 次対称行列であり、成分 $M_{i,j}$ は遺伝子型 i と j の個体から遺伝子型 0 の個体が生成される確率を表す。また σ_k は k に依存する 2^l 次置換行列である。

2.2 GA を特徴付ける写像、ベクトル場

Vose モデルで重要な役割を果たすのが写像 G である。これを知ればあらゆるサイズの個体群の振舞いを記述できるという意味で G は対象の GA を特徴付け、これを通じて GA を解析できる。ここで、

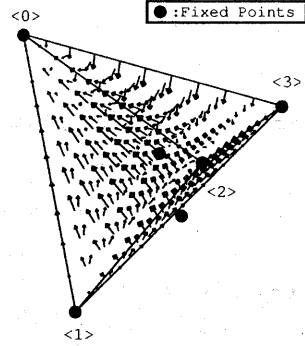


図1 Λ 上のベクトル場

SGA 以外に対しても写像 G は存在し、 G の定式化以外の Vose モデルの枠組みは一般の GA に対しても適用できる点に注意する。

例として、ある $l=2$ の最適化問題を解く GA について、点 $\mathbf{x} \in \Lambda$ にベクトル $V(\mathbf{x}) = G(\mathbf{x}) - \mathbf{x}$ を対応させたベクトル場を G の不動点とともに図 1 に示す。適応度比例選択、一点交叉、突然変異を用い、交叉率 $p_c = 0.6$ 、突然変異率 $p_m = 0.001$ とした。 Λ は \mathcal{R}^4 内の 3 次元部分空間であり、図 1 では正四面体で表される。 Λ の頂点は同じ遺伝子型の個体が占める個体群の遺伝子型分布を表し、その遺伝子型 k を “ $\langle k \rangle$ ” と示した。ベクトル場 V は写像 G と 1 対 1 に対応するため、以後、これらを同一視する。

3 学習による GA のモデリング

対象が SGA 以外であったり、適応度関数や使用オペレータなどが未知の場合には G を陽に得られない。これを解決するため、本研究では「入出力データからの学習」によるモデリング手法を利用する。

対象となる GA (ビット長 l) に対し、可変なパラメータ $\theta (\in \mathcal{R}^u)$ をもち、入力 $\mathbf{x} (\in \mathcal{R}^{2^l})$ に対して $f(\mathbf{x}; \theta) (\in \mathcal{R}^{2^l})$ を出力するモデルを用意する。以下の手順で適切なパラメータ $\hat{\theta}$ を決定する。

- (i) 学習データ S を対象の GA から作成する。
個体群 P と次世代の個体群 Q の組 (P, Q) を遺伝子型分布の組 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) に変換する。これを d 組作成する。
- (ii) S を用いて学習を行い、 $\hat{\theta}$ を決定する。
最小 2 乗法により $\hat{\theta}$ を決定する。また、パラメータ推定には最急降下法を用いる。

現代の遺伝子型分布 \mathbf{x} に対する次世代の遺伝子型分布の期待値ベクトルは $G(\mathbf{x})$ であるから、モデルの表現能力とデータサイズ d が十分であれば、 $f(\mathbf{x}; \hat{\theta})$ は GA を特徴付ける写像 $G(\mathbf{x})$ の近似となる。

学習によるモデリング手法を用いるもう一つの目的は、 G の記述に共通の形式を与え、その視点から GA を解析することである。GA の入出力関係にのみ注目し内部構造を捨象するため、十分な表現能力さえあればモデル $f(x; \theta)$ の記述形式に制限はない。形式によっては GA の直接的な表現とならない反面、従来の枠に捕われない解析が可能となる。

4 GA の混合モデル

混合モデルは複数の部分システム（以後、エキスパートと呼ぶ）の組合せで全体を表現する手法である [4]。本研究では、GA のモデリングに混合モデルを適用する。混合モデルは GA の直接的な表現ではないが、多くの要因が複雑に絡み合う GA を混合システムと見なし、複数の部分に分解して表現できる。本研究では次の 2 つのモデルを扱う。

G-混合モデル エキスパートとして、互いに異なる設定の SGA を特徴付ける Vose モデルの写像を m 個用意する。これを $G^i(x)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) とし、次のように混合する。

$$f(x; t) = \sum_{i=1}^m t_i G^i(x) \quad (6)$$

ここで、 $t = (t_1, \dots, t_m)^T$, $\sum_{i=1}^m t_i = 1$, $t_i \geq 0$ ($i = 1, 2, \dots, m$) とする。

F-混合モデル SGA に対する Vose モデルの選択オペレータに関する写像 \mathcal{F} と遺伝子組換えに関する写像 \mathcal{M} を利用する。互いに異なる最適化問題に対応する m 個のエキスパート $\mathcal{F}^i(x)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) と遺伝子組換えに関する写像 $\mathcal{M}(x)$ を用意し、次のように混合する。

$$f(x; t) = \mathcal{M} \left(\sum_{i=1}^m t_i \mathcal{F}^i(x) \right) \quad (7)$$

ここで、 $t = (t_1, \dots, t_m)^T$, $\sum_{i=1}^m t_i = 1$, $t_i \geq 0$ ($i = 1, 2, \dots, m$) とする。

G-混合モデルは、それぞれが GA を特徴付けるエキスパートを組合せ、これらとは異なる GA を表現する。これはベクトル場 \mathcal{V} をエキスパートのベクトル場 \mathcal{V}_i の重ね合わせで近似することに相当する。すなわち、エキスパートが特徴付ける GA のシステムを基底と見なし、既存の構造を利用して対象の GA を表現することを意味する。

F-混合モデルでは、SGA に対する Vose モデル同様、選択オペレータに関する部分 (\mathcal{F}) と遺伝子組換えに関する部分 (\mathcal{M}) とを分けて考えた。これは「対象の GA が解く最適化問題」に依存する部分、し

表 1 対象の GA が解く最適化問題 (実験 1)

	適応度関数 (genotype \rightarrow fitness value)
f_1	0 \rightarrow 4.1, 1 \rightarrow 2.2, 2 \rightarrow 1.3, 3 \rightarrow 3.6
f_2	0 \rightarrow 3.6, 1 \rightarrow 3.2, 2 \rightarrow 1.3, 3 \rightarrow 2.9
f_3	0 \rightarrow 3.6, 1 \rightarrow 3.2, 2 \rightarrow 2.9, 3 \rightarrow 1.3

表 2 エキスパートに対応する最適化問題 (実験 1)

	適応度関数 (genotype \rightarrow fitness value)
f_{0123}	0 \rightarrow 4.0, 1 \rightarrow 3.0, 2 \rightarrow 2.0, 3 \rightarrow 1.0
f_{0132}	0 \rightarrow 4.0, 1 \rightarrow 3.0, 2 \rightarrow 1.0, 3 \rightarrow 2.0
f_{0213}	0 \rightarrow 4.0, 1 \rightarrow 2.0, 2 \rightarrow 3.0, 3 \rightarrow 1.0
\vdots	\vdots
f_{3201}	0 \rightarrow 2.0, 1 \rightarrow 1.0, 2 \rightarrow 3.0, 3 \rightarrow 4.0
f_{3210}	0 \rightarrow 1.0, 1 \rightarrow 2.0, 2 \rightarrow 3.0, 3 \rightarrow 4.0

ない部分とも言い換えられる。混合率 t_i が \mathcal{M} によって非線形的に変換されるため、F-混合モデルに「ベクトル場の重ね合わせ」という意味付けはできないが、選択オペレータに関する部分を混合する形式は「最適化問題の混合」という概念を導入する。

5 数値実験

5.1 実験 1

表 1 に示す $l = 2$ の最適化問題 $f_1 \sim f_3$ を解く GA をモデリングする。その他の設定は、適応度比例選択、一点交叉 ($p_c = 0.6$)、突然変異 ($p_m = 0.001$) を使用、個体群サイズ $n = 10$ 、データサイズ $d = 200$ 、学習回数 2,000 とする。また、入力に対して G の出力を与えた 200 組のテストデータ S_t を用意した。

エキスパートとして、表 2 の最適化問題を解く 24 種類の GA に対応する写像 G^i , \mathcal{F}^i を用意する。これらは適応度によって遺伝子型に付くすべての順序を網羅するように選んだ。4 桁の数字は遺伝子型を適応度の高い順に並べたものであり、以後、エキスパートをこの数字で表す。その他の設定は対象の GA と共通とする。これら 24 個すべてを用いた場合を実験 1-(i)、0123, 0213, 1032, 1302, 2031, 2301, 3120, 3210 の 8 個を用いた場合を実験 1-(ii) とする。

実験 1-(i) の結果、 S_t に対する平均 2 乗誤差は、G-混合モデルが $0.32 \sim 0.70 \times 10^{-3}$ 、F-混合モデルが $0.25 \sim 1.44 \times 10^{-3}$ とどちらも真の入出力関係をよく表現できた。表 3 に高い混合率を得たエキスパートを左から値が高い順に 6 個示す。下線は、遺伝子型の順序が、対象の GA が解く最適化問題のそれと同じことを示す。表 3 から次の傾向がわかる。

- 下線のエキスパートが高い混合率を得ている。

表3 実験1-(i)の結果(混合率の高いエキスパート)

G-混合モデル						
f_1	0321	0312	3012	0132	3102	1032
f_2	0132	3012	1032	0312	3102	1302
f_3	0213	2013	2103	1203	0132	0123
F-混合モデル						
f_1	3012	0312	0321	0132	3102	1032
f_2	0132	3012	1032	0312	3102	1302
f_3	0213	2013	2103	0132	1203	0132

表4 対象のGAが解くナップザック問題(実験2)

価値	15	9	21	42	18
重量	12	14	6	26	13
制限重量	50				

- $f_1 \sim f_3$ において適応度の値が近い遺伝子型同士の順序を網羅するようにエキスパートが選ばれている。

実験1-(ii)の結果、 S_i に対する平均2乗誤差は、G-混合モデルが $0.77 \sim 8.26 \times 10^{-3}$ 、F-混合モデルが $1.00 \sim 7.22 \times 10^{-3}$ と、実験1-(i)より精度は劣るが十分よく真の入出力関係を表現できた。

実験1-(i)では、遺伝子型の順序に注目し、どちらのモデルも対象の特徴をよく反映してエキスパートが選ばれた。遺伝子型の順序は問題の最適解を知るには十分な情報である。それをGAの観察、データの学習で抽出できたことは、混合モデルの有効性を示している。また実験1-(ii)では、少数のエキスパートから十分な精度のモデルを構成し、必要な基底が揃えば対象のGAを表現できることを示した。

5.2 実験2

表4に示す品物数5のナップザック問題を解くGA($l=5$)をモデリングする。品物 j に2値変数 a_j を割り当て、その品物をナップザックに詰めるとき $a_j=1$ 、そうでないとき $a_j=0$ とする。遺伝子型 $k=(a_1 a_2 \dots a_l)_2$ の適応度を次のように与える。

$$fitness(k) = \begin{cases} \sum_{j=1}^l v_j a_j, & \text{if } \sum_{j=1}^l w_j a_j \leq W \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (8)$$

ここで、 v_j, w_j は品物 j の価値と重量、 W は制限重量、 $(\cdot)_2$ は2進表現であることを表す。その他の設定は、適応度比例選択、一点交叉($p_c=0.6$)、突然変異($p_m=0.001$)を使用、個体群サイズ $n=100$ 、データサイズ $d=500$ 、学習回数500とする。

エキスパートとして、品物の重量、制限重量は表4と等しく、品物の価値が表5に示す通りのナップザック問題 k_1, k_2 を解くGAの写像 G^i, F^i を用

表5 エクスパートの設定(実験2)

品物の価値					
k_1	17	3	22	40	22
k_2	9	27	18	48	6

意する。これらは $v_j = 0.75v_j^1 + 0.25v_j^2$ と設定した。ここで v_j^1, v_j^2 は k_1, k_2 での品物 j の価値を表す。その他の設定は対象のGAと共通とする。

実験の結果、G-混合モデル、F-混合モデルの推定混合率 $t=(t_1, t_2)$ は、(0.763, 0.237)、(0.762, 0.238)であった。学習で得たF-混合モデルは「ナップザック問題の分解」を表現する。最適化問題以外の要素が等しいエキスパートを用いたG-混合モデルも、形式こそ違いが同様である。どちらも真の混合率 $t^*=(0.75, 0.25)$ に近い値を推定しており、「最適化問題の分解」という意味付けは妥当である。

6 むすび

本稿では、混合システムの視点に基づいたGAのモデリング、解析について述べた。まず、対象のGAから入出力データを作成し、学習によってVoseモデルの写像 G を近似するモデリング手法について述べた。そして2種類の混合モデルをGAのモデリングに適用し、それぞれに意味付けを行うとともに、それらを利用したGA解析の有効性を示した。

参考文献

- [1] Naitoh, K.: Macroscopic Kinetic Equation for a Genetic Algorithm, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 15, No. 1, pp. 87-133 (1998).
- [2] van Nimwegen, E., Crutchfield, J. P., and Mitchell, M.: Finite Populations Induce Metastability in Evolutionary Search, *Physics Letters A*, Vol. 229, pp. 144-150 (1997).
- [3] Vose, M. D.: Modeling Simple Genetic Algorithms, *Evolutionary Computation*, Vol. 3, No. 4, pp. 453-472 (1996).
- [4] Jacobs, R. A., Jordan, M. I., Nowlan, S. J., and Hinton, G. E.: Adaptive Mixtures of Local Experts, *Neural Computation*, Vol. 3, pp. 79-87 (1991).
- [5] 今井順一, 塩谷浩之, 伊達 惇: 学習機械を利用した遺伝的アルゴリズムのモデリングに関する検討, 電子情報通信学会技術研究報告, NC 2001-115 (2002).