

周辺分布ヒストグラムを用いた 実数値確率モデル遺伝的アルゴリズムの一構成法

筒井 茂 義[†] Martin Pelikan^{††} David E. Goldberg^{††}

遺伝的アルゴリズム(以下, GA)における中心的なオペレータである「交叉」は, 短いサブ問題から構成される問題や規模が小さい問題においては, ビルディングブロックを効率良く組み合わせることができるのに対して, 複雑・大規模な問題では, 有益なビルディングブロックを破壊してしまうという問題がある. 近年このような従来の GA の問題を解決する方法として確率モデル GA (PMBGAs: probabilistic model-building genetic algorithms) の研究が活発に行われている. 確率モデル GA では, 子個体は, 集団の個体分布に基づく確率モデルに従って生成される. 本論文では, 確率モデル GA の一手法として, 個体分布の確率モデルに周辺分布ヒストグラムを用いる方法を提案する. ヒストグラムモデルとしては, 等幅ヒストグラム (FWH: Fixed width histogram) と等高ヒストグラム (FHH: Fixed height histogram) を用いる. 実験の結果, 両モデルとも, 変数間に絡みがないかあるいは絡みが弱い問題では優れた探索特性を持っていることが明らかになった. 今後に残された課題についても考察する.

Probabilistic Model-building Genetic Algorithms Using Histogram Models in Continuous Domain

SHIGEYOSHI TSUTSUI,[†] MARTIN PELIKAN^{††}
and DAVID E. GOLDBERG^{††}

Recently, there has been a growing interest in developing evolutionary algorithms based on probabilistic modeling. In this scheme, the offspring population is generated according to the estimated probability density model of the parents instead of using recombination and mutation operators. In this paper, we propose an evolutionary algorithm using a marginal histogram to model the parent population in a continuous domain. We propose two types of marginal histogram models: the fixed-width histogram (FWH) and the fixed-height histogram (FHH). The results showed that both models worked fairly well on test functions with no or weak interactions among variables. Especially, FHH could find the global optimum with very high accuracy effectively and showed good scale-up with the problem size.

1. はじめに

遺伝的アルゴリズム(以下, GA)における中心的なオペレータである「交叉」は, 短いサブ問題から構成される問題や規模が小さい問題においては, ビルディングブロックを効率良く組み合わせることができるのに対して, 複雑・大規模な問題では, 有益なビルディングブロックを破壊してしまうという問題がある.

近年このような従来の GA の問題を解決する方法と

して確率モデル GA (PMBGAs: probabilistic model-building genetic algorithms) の研究が活発に行われている. 確率モデル GA では, 従来の GA と同様, ランダムに生成された個体から選択オペレータにより有望な個体が選択される. 次に, 選択された個体の確率分布の推定が行われる. この推定された確率分布に基づいて, 次世代の子個体が生成(サンプリング)される. この操作が終了条件が満たされるまで繰り返される.

本論文では, 確率モデル GA の一手法として周辺分布ヒストグラムを用いる方法を提案し, 関数最適化問題を用いた実験結果について述べる^{(21),(22)}. ヒストグラムのモデルとしては, 等幅ヒストグラム (FWH: Fixed width histogram) と等高ヒストグラム (FHH: Fixed height histogram) の 2 つを用いる. 実験の結

[†] 阪南大学経営情報学部

Department of Management Information, Hannan University

^{††} Illinois Genetic Algorithms Laboratory, Department of General Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign

果、両モデルとも、変数間に絡みがないあるいは絡みが弱い問題では優れた探索特性を持っていることが明らかになった。

以下、まず 2 章において、確率モデル GA の概要について述べる。次に 3 章において、本論文で提案する 2 つのヒストグラムモデルである FWH と FHH について述べる。4 章では、両モデルを用いた確率モデル GA の実験結果について述べる。最後に 5 章において、今後の課題について考察する。

2. 確率モデル GA の概要

確率モデル GA は、集団における個体の分布に着目する。ある世代において、探索空間において個体が密となっている領域は確率的に有望な探索領域、粗となっている領域は確率的に有望でない探索領域と考える。有望と考えられる領域にはより多くの子個体を生成し、有望でないと考えられる領域にはより少ない子個体を生成する。これを実現するため、確率モデル GA では、集団の個体分布の確率モデルを生成し、この確率モデルに基づいて子個体を生成する。生成された子個体は評価され、選択オペレータにより次世代の集団が形成される。

このように確率モデル GA では、従来の GA における子個体の生成方法である交叉オペレータが「集団における個体の確率分布の推定とそれに基づくサンプリング」に置き換わる。この点以外は、従来の GA とまったく同じであり、各種の選択オペレータや世代交代モデルを用いることができる。

確率モデル GA は、バイナリコーディング GA での研究が先行している。変数（ビット）間の絡みを考慮する度合いにより (1) no interactions (2) pairwise interactions (3) multivariate interactions の 3 つに大きく分類することができる¹⁷⁾。変数間の絡みを考慮しない (1) の確率モデル GA では、各変数は独立として扱われる。したがって、この GA は、変数間に絡み合いがない問題に対しては、効率良い探索が期待できる。この例としては、PBIL (population based incremental learning) アルゴリズム²⁾、cGA (compact genetic algorithm)³⁾、UMDA (univariate marginal distribution algorithm)⁴⁾がある (2) の pairwise interactions では、2 変数間の絡みをモデルに取り込む。この分類の例としては、MIMIC (mutual-information-maximization input clustering) アルゴリズム⁴⁾、2 変数間の絡みをツリー状でモデル化するアルゴリズムがある³⁾ (3) の multivariate interactions では、多変数間の絡みをモデル化する。このため、モデルの構築

に大きな計算量が必要となるが、変数間に複雑な絡みを有する問題では、優れた探索性能を持っている。この分類の例としては、ECGA (extended compact genetic algorithm)⁸⁾ や BOA (Bayesian optimization algorithm)^{5),16)}がある。

実数値コーディングへの確率モデル GA の研究も近年行われている。PBIL アルゴリズムを実数値に拡張する文献¹⁸⁾では、変数間の絡みが考慮されていない。変数間の絡みを考慮する EGNA (estimation of Gaussian networks algorithm)³⁾では、Gaussian ネットワークにより、多変数正規分布のモデルが構築される。文献⁶⁾では、クラスタリング手法と組み合わせで多変数混合正規分布を用い、非線形な変数間の絡みを処理する方法を提案している。確率モデル GA の考え方は、従来の GA の理論研究とも関連が深い。山村は (1) 交叉オペレータは現在の個体集団が代表している分布に従って未知の探索点をサンプリングする (2) 選択操作により分布を好ましい方向に変える、という機能分担仮説を提唱している²³⁾。喜多らは、同様の仮説として、統計量の遺伝 (交叉オペレータが、分布の平均や共分散行列を変化させない) を UNDX の理論解析に適用し、パラメータ設定の正当性を確認している^{11),12)}。また、樋口らはシンプレックス交叉 (SPX) の設計にもこの仮説を適用している¹⁰⁾。

3. 周辺分布ヒストグラムモデルに基づく GA

本章では、周辺分布ヒストグラムのモデルとして、等幅ヒストグラム (FWH: Fixed width histogram) と等高ヒストグラム (FHH: Fixed height histogram) の 2 つのモデルについて述べる。

3.1 アルゴリズムの構造

周辺ヒストグラムモデルに基づくアルゴリズムを図 1 に示す。従来の GA との違いは交叉オペレータが、ヒストグラムモデルの構築 (ステップ 5)、ヒストグラムモデルに基づく個体の生成 (ステップ 6) に変わっているだけである。したがって、選択オペレータや世代交代モデルには、従来の GA と同様各種の方法を用いることができる。

3.2 等幅ヒストグラム

3.2.1 モデルの記述

等幅ヒストグラム (FWH) は、図 2 に示すような最も直接的な確率モデルである。FWH では、変数 x_j ($j = 1, \dots, n$) の探索区間 $[\min_j, \max_j]$ は H 個のピンに分割され、それぞれのピンの推定確率 $P_{FWH}[h_j]$ が次式で行われる。

1. Set the generation counter ($t = 0$).
2. Generate the initial population $P(0)$ randomly.
3. Evaluate functional value of the vectors (individuals) in $P(t)$.
4. Select a set of promising vectors $S(t)$ from $P(t)$ according to the functional values.
5. Construct a marginal histogram model $M(t)$ according to the vector values in $S(t)$.
6. Generate a new set of vectors $O(t)$ according to the marginal histogram model $M(t)$.
7. Evaluate the new vectors in $O(t)$.
8. Create a new population $P(t+1)$ by replacing some vectors from $P(t)$ with $O(t)$.
9. Update the generation counter ($t = t+1$).
10. If the termination conditions have not been satisfied, go to step 4.
11. Obtain solutions in $P(t)$.

図1 周辺ヒストグラムに基づくアルゴリズム

Fig. 1 General description of the algorithm.

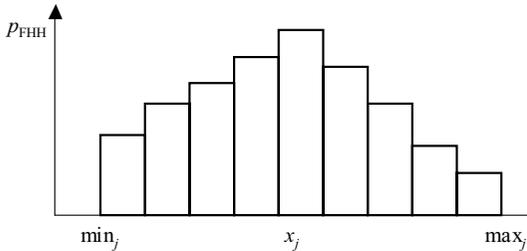


図2 周辺等幅ヒストグラム (FWH)

Fig. 2 Marginal fixed-width histogram (FWH).

$$P_{FWH}[h_j] = \left| \left\{ V[i][j]; i \in \{0, 1, \dots, N-1\} \wedge h_j \leq \frac{H(V[i][j] - \min_j)}{\max_j - \min_j} < h_j + 1 \right\} \right| / N \quad (1)$$

ただし、 $V[i][j]$ は、個体 i の変数 j の値、 N は集団の個体数である。各ビン間の幅 ε は、要求される解の精度によって決まるが、評価関数が多峰性を有する問題では、正しい解を得るために ε の許容最大値については条件が存在する。たとえば、選択オペレータとして比例選択を仮定し、関数のランドスケープが図3のようにグローバル解が評価値 h_1 、幅 w_1 、局所解が評価値 h_2 、幅 w_2 で近似できる問題の場合を考える。ここで、 $h_1 > h_2$ 、 $w_1 \ll w_2$ と仮定している。このような条件では、世代0においてランダムに生成される個体の、ローカル解に位置するビン L における平均評価値は h_2 である。また同様にグローバル解に位置するビン G における平均評価値は $h_1 \times w_1 / (2\varepsilon)$ である。

したがって、

$$h_2 > h_1 \times w_1 / (2\varepsilon) \quad (2)$$

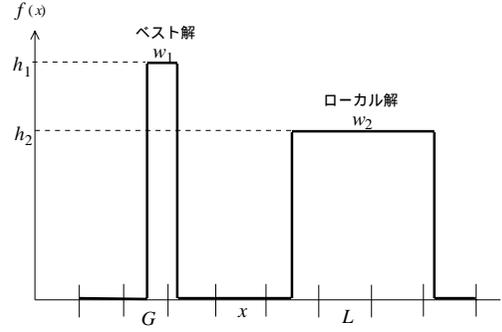


図3 多峰性関数

Fig. 3 Fitness function with multimodality.

の条件のときには選択オペレータは、ビン L に位置する個体をビン G に位置する個体よりも多く選択する。この結果、ビン L の確率密度の方が、ビン G の確率密度よりも大きくなる。このヒストグラムに基づいて次世代のサンプリングが行われると、ビン L にはビン G よりも多くの個体がサンプリングされる。このようにして集団は局所解に収束していく。これを選択するためにはビンの幅 ε は、

$$\varepsilon < \frac{w_1 \times h_1}{2 \times h_2} \quad (3)$$

の条件が必要となる。

3.2.2 サンプリング方法

FWHでは、新しい個体は以下のようにして生成される。まず式(1)で与えられる確率に基づいてビンがサンプリングされる。次に新しい個体は、このビン内から一様サンプリングにより得られる。これを必要な個体数が得られるまで繰り返す。ビンをサンプリングする最も簡単な方法はルーレット (RW; roulette wheel) を用いる方法である。しかしRWは、統計的サンプリング誤差が大きい。 S をサンプリング総数とすると、ビン h_j が選ばれる個数 R の密度関数は、

$$P_S^{h_j}(R) = \binom{S}{R} \times (P_{FWH}[h_j])^R (1 - P_{FWH}[h_j])^{S-R}, \quad R = 0, 1, \dots, S \quad (4)$$

となる。ただし、 $P_{FWH}[h_j]$ は、ビン h_j の確率密度である。 R を S で正規化した値 r ($r \in [0, 1]$) の分布は、

$$\overline{P_S^{h_j}}(r) = S \times P_S^{h_j}(R/S) \quad (5)$$

として得られる。図4は、サンプリング誤差の例として、 $P_{FWH}[h_j] = 0.1$ と仮定した場合の r の分布を示したものである。

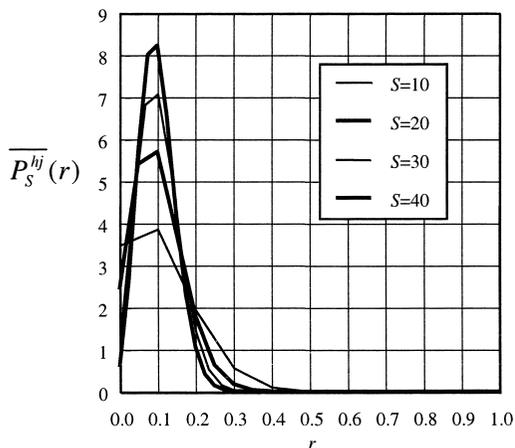


図4 サンプリング誤差

Fig.4 An example of sampling error.

```

1 // S: sampling individual number, n: number of variables, H: number of bins
2 // p[j][h]: probability density of bin h of variable xj
3 // l[j][h]: left edge position of bin h of variable xj
4 // Rand(): generate random number from [0, 1.0]
5 V[S][n]; // array of sampled vectors
6 xh[S] = {0, 1, 2, ..., S-1}; // array for random permutation of bin position
7 for(int j=0; j<n; j++){
8     Shuffle(xh); // get a permutation xh[] by shuffling for each parameter
9     double ptr = Rand();
10    double sum = 0.0;
11    int k = 0;
12    for(int h=0; h<H; h++){
13        double expected = p[j][h]*S;
14        for(sum += expected; sum>ptr; ptr++){
15            V[xh[k++]][j] = l[j][h] + (l[j][h+1]-l[j][h])*Rand();
16        }
17    }

```

図5 FWHにおけるE-SUSの疑似コード

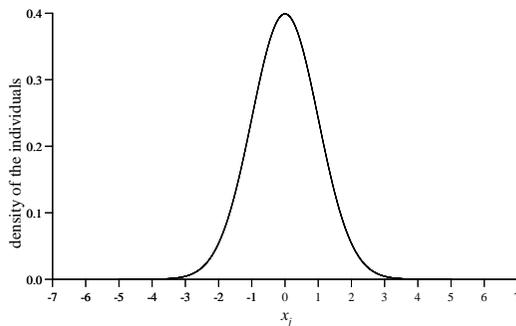
Fig.5 Pseudo C code of the E-SUS for FWH.

統計的サンプリング誤差の少ない方法に、BakerのSUS(stochastic universal sampling)法がある¹⁾。SUSは、シンプルGAにおける選択オペレータとして提案された手法であるが、ここでは、SUSをFWHのサンプリングの方法に拡張し、E-SUS(extended SUS)と呼ぶ。FWHにおけるE-SUSの疑似コードを図5に示す。ここで13行の変数“expected”は、変数 x_j のビン h のサンプル数の期待値である。たとえば、あるビンの確率密度が0.155、サンプリング総数が100の場合を考えるとexpected値は15.5である。この場合、E-SUSでは、15個を固定的にサンプリングし、残りの0.5は確率的にサンプリングする。変数間のランダムな組合せを得るために、各変数ごとにサンプリングシーケンスはランダムにシャッフルされる(8行参照)。4章の実験では、RWとE-SUSの比較も行う。

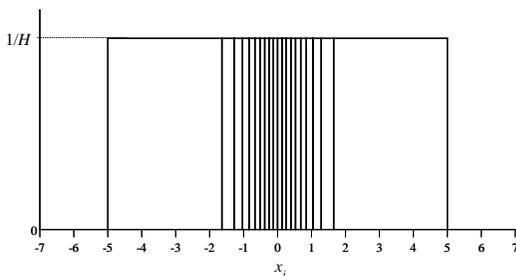
3.3 等高ヒストグラム(FHH)

3.3.1 モデルの記述

等高ヒストグラム(FHH)では、各ビンの確率密度はすべて等しく $1/H$ の値を持つ。すなわち、各ビン



(a) 集団の個体分布



(b) (a) に対応するFHH

図6 周辺等高ヒストグラム(FHH)の例

Fig.6 An example of the FHH.

が同数の個体を持つようにモデル化される。FHHの大きな特徴は、各ビンによってその幅が異なり、個体密度の高い領域ではビン幅が縮小することである。この結果、有望な探索領域では、ビン幅が小さくなり高精度な探索が行われる。図6(b)は、集団の個体分布が区間 $[-5, 5]$ において図6(a)に示すような正規分布 $N(0, 1)$ となる場合のFHHの例である。この例では20個のビンが使われており、 $x_j = 0.0$ 近辺での幅が狭くなっているため、この近辺からより多くの個体がサンプリングされる。

3.3.2 サンプリング方法

FHHのサンプリング方法は、確率密度がすべてのビンにおいて同一値 $1/H$ となる以外はFWHのサンプリング方法と基本的に同じである。FHHにE-SUSを適用する場合には、FWHの図5の13行が

“double expected = (double)S/H;”

となる。

4. 実験

4.1 実験条件

世代交代モデルは、図7に示すように $(\mu + \lambda)$ -ESと

表 1 テスト関数
Table 1 Test functions.

関数	探索区間	変数間の絡み	ピン数
$F_{TwoPeaks} = n \times 5 - \sum_{i=1}^n f_i$	$[0, 12]^n, n = 20$	無	120
$F_{Rastrigin} = n \times 10 + \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i))$	$[-5, 5]^n, n = 20$	無	100
$F_{Griewank} = 1 + \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^n (\cos(x_i/\sqrt{i}))$	$[-5, 5]^n, n = 10$	弱	100
$F_{Schfewel} = \sum_{i=2}^n [(x_1 - x_i)^2 - (x_i - 1)^2]$	$[-2, 2]^n, n = 5$	中間	40

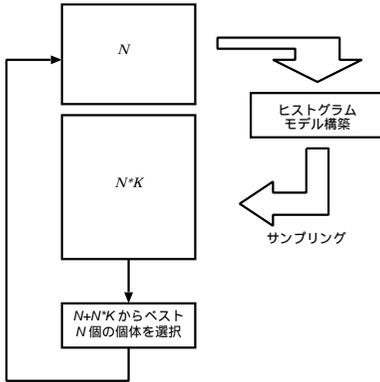


図 7 世代交代モデル
Fig. 7 Evolutionary model.

類似のモデルを用いた。まず、サイズ N の集団 $P(t)$ から、ヒストグラムモデルを生成し、そのモデルに基づき $N \times K$ 個の子個体を生成し評価する。 $P(t)$ の N 個の個体と生成された $N \times K$ 個の子個体とからベスト N 個の個体を選択し、次世代の集団 $P(t+1)$ とする。本実験では $K = 1$ とした。

本実験に用いたテスト関数は表 1 に示すとおりである。関数 $F_{TwoPeaks}$ は、サブ関数の和からなる関数である。各サブ関数は、図 8 に示すように、広い幅であるが低い評価値を持つピークと狭い幅であるが高い評価値を持つピークとからなっている。このサブ関数は、バイナリコーディング GA の研究でよく用いられる騙し関数を連続領域のに拡張したものである。関数 $F_{TwoPeaks}$ は変数間の絡みを持たない。Rastrigin 関数 $F_{Rastrigin}$ も変数間の絡みを持たない。Griewank 関数 $F_{Griewank}$ は、変数間に弱い絡みを持つ。Schfewel 関数 $F_{Schfewel}$ は、変数間に中程度の絡みを持つ。

ヒストグラムのピン数 H に関しては、初期状態におけるピン幅が 0.1 となるように設定した。たとえば、関数 $F_{TwoPeaks}$ では、ピン数は $12.0/0.1 = 120$ となる。

4.2 結果

ここでは、(1) 解精度を 0.1 としたときの FWH と FHH の探索特性、(2) FHH の高精度探索特性、(3)

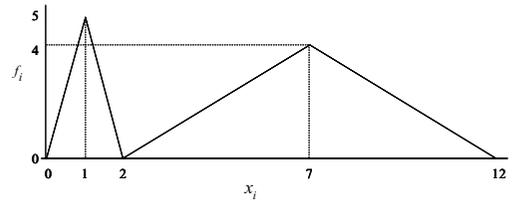


図 8 $F_{TwoPeaks}$ のサブ関数
Fig. 8 A sub-function of function $F_{TwoPeaks}$.

FHH の次元数を増やした場合のスケールアップ特性、の 3 つの実験結果について述べる。

4.2.1 解精度を 0.1 としたときの FWH と FHH の探索特性

FWH の探索精度はたかだかピン幅の 0.1 であるので、 0.1 の精度での探索能力を FWH と FHH とで比較した。この結果を表 2 に示す。サンプリング方法には RW と E-SUS の両方を用いた。また比較のために実数値 GA でよく用いられる BLX- α ⁷⁾の結果も示した。BLX- α を比較の対象として選んだ理由は、このオペレータは周辺分布ヒストグラムを用いる本論文の方法と同様、各変数間で独立なブレンドにより子個体が生成されるという点で共通性を持つからである。

まず、RW と E-SUS の 2 つのサンプリング方法の結果の差を見ると、ほとんどの実験で E-SUS が優れていることが分かる。たとえば、関数 $F_{TwoPeaks}$ では、RW を用いた (FWHFWH/RW) は、集団サイズ 600 で 20 回の実験中最適解を 20 回発見し、そのとき必要とした関数評価回数の平均 (MNE: mean number of evaluations) は、14,620.9 である。これに対して、E-SUS を用いた FWH (FWH/E-SUS) では、最適解発見回数は 20 と同じであるが、この条件に必要とした集団サイズは 300、MNE は 7,178.3 であり、それぞれ FWH/RW の約半分である。

次に、FWH と FHH の性能を比べてみると、FHHの方がいずれのサンプリング方法を用いても FWH よりも優れている。たとえば、関数 $F_{TwoPeaks}$ では、FHH/RW が集団サイズ 300 で最適解を 20 回発見し、そのときの MNE が 8,321.8 であるのに対して、FWH/RW は、最適解を 20 回発見するのに集団

表 2 解精度を 0.1 としたときの FWH と FHH の探索特性 (#C は最適解発見回数)
 Table 2 Convergence property of the FWH and the FHH with resolution of 0.1
 (#C: the number of cases that the algorithm found the best solution).

ヒストグラム		集団サイズ											
FWH/RW		100		200		300		400		600		800	
テスト関数	n	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE
$F_{TwoPeaks}$	20	0	-	1	4,938.0	7	7,852.4	16	9,854.1	20	14,620.9	20	18,808.0
$F_{Rastrigin}$	20	0	-	1	7,851.0	6	9,204.0	12	13,154.2	20	19,396.6	20	2,4762.7
$F_{Griewank}$	10	0	-	1	6,527.0	4	9,515.7	14	11,908.6	16	17,884.3	20	23,198.2
$F_{Schwefiel}$	5	13	1,188.9	16	1,927.4	19	3,175.5	20	3,900.2	20	5,282.0	20	6,828.4

ヒストグラム		集団サイズ											
FWH/E-SUS		100		200		300		400		600		800	
テスト関数	n	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE
$F_{TwoPeaks}$	20	1	2,562.0	14	4,926.5	20	7,178.3	19	9,609.8	20	14,016.6	20	18,537.9
$F_{Rastrigin}$	20	1	3,478.0	13	6,770.6	20	9,720.2	20	12,616.4	20	18,518.5	20	24,113.5
$F_{Griewank}$	10	2	2,779.0	7	5,783.3	15	9,220.9	19	12,439.8	19	17,517.2	19	22,502.3
$F_{Schwefiel}$	5	16	1,342.6	19	1,962.3	19	3,302.9	20	4,012.7	20	5,924.8	20	7,597.9

ヒストグラム		集団サイズ											
FHH/RW		100		200		300		400		600		800	
テスト関数	n	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE
$F_{TwoPeaks}$	20	20	17,952.4	20	9,443.2	20	8,321.8	20	10,305.9	20	14,950.5	20	19,442.9
$F_{Rastrigin}$	20	20	50,099.8	20	46,139.8	20	21,933.1	20	17,566.2	20	22,847.3	20	28,990.9
$F_{Griewank}$	10	17	5,445.1	19	6,561.2	18	9,521.2	16	14,076.5	20	17,233.4	19	22,909.5
$F_{Schwefiel}$	5	20	2,758.9	20	4,644.6	20	3,821.2	20	5,969.8	20	6,257.1	20	7,101.6

ヒストグラム		集団サイズ											
FHH/E-SUS		100		200		300		400		600		800	
テスト関数	n	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE
$F_{TwoPeaks}$	20	20	9,800.4	20	5,405.8	20	7,679.9	20	9,982.4	20	14,380.3	20	19,180.1
$F_{Rastrigin}$	20	20	16,515.7	20	8,004.2	20	10,177.6	20	12,690.1	20	18,177.4	20	24,879.6
$F_{Griewank}$	10	18	3,187.4	18	5,680.6	20	8,199.6	20	10,962.5	20	15,782.6	20	20,614.3
$F_{Schwefiel}$	5	20	3,526.7	20	2,994.3	20	3,483.3	20	5,020.2	20	6,234.8	20	8,829.2

ヒストグラム		集団サイズ											
BLX- α		100		200		300		400		600		800	
テスト関数	n	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE	#C	MNE
$F_{TwoPeaks}$	20	0	-	0	-	0	-	0	-	0	-	0	-
$F_{Rastrigin}$	20	0	-	1	28,521.0	4	47,959.8	11	62,776.0	17	94,994.9	20	124,825.9
$F_{Griewank}$	10	20	3,316.3	20	6,347.7	20	9,037.2	20	11,947.3	20	17,483.0	20	23,209.9
$F_{Schwefiel}$	5	20	3,305.3	20	3,861.3	20	5,397.8	20	7,141.0	20	10,158.8	20	12,688.0

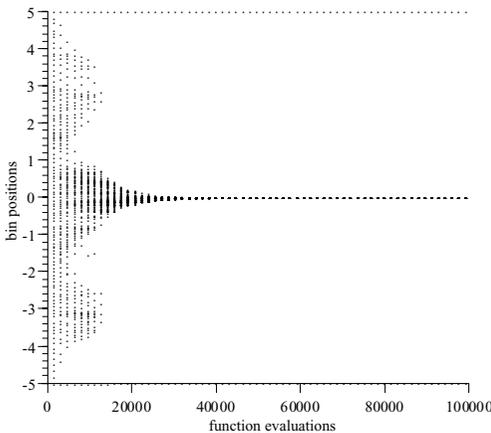


図 9 関数 $F_{Griewank}$ の変数 x_1 における FHH/RW のピン位置の変化の例

Fig. 9 Typical changes of bin positions in parameter x_1 with FHH/RW on function $F_{Griewank}$.

サイズ 600 を必要とした．またそのときの MNE は、14,620.9 である．

最後に BLX- α との比較で見ると、関数 $F_{Griewank}$ および $F_{Schwefiel}$ では、BLX- α は比較的良い性能を示しているが、関数 $F_{Rastrigin}$ および $F_{TwoPeaks}$ では FWH および FHH の方が優れている．特に関数 $F_{TwoPeaks}$ では、BLX- α は、20 回の実験中一度も最適解を発見することができなかった．関数 $F_{TwoPeaks}$ は、図 8 に示したように広い幅であるが低い評価値を持つピークと狭い幅であるが高い評価値を持つピークからなるサブ関数の和からなる関数で構成されており、かつ高い評価値を持つピークは探索空間の境界領域に位置している．このため、探索空間の中央付近がより多く探索されるという強い「サンプリングバイアス」²³⁾を有する BLX- α では、最適解近傍を有効に探

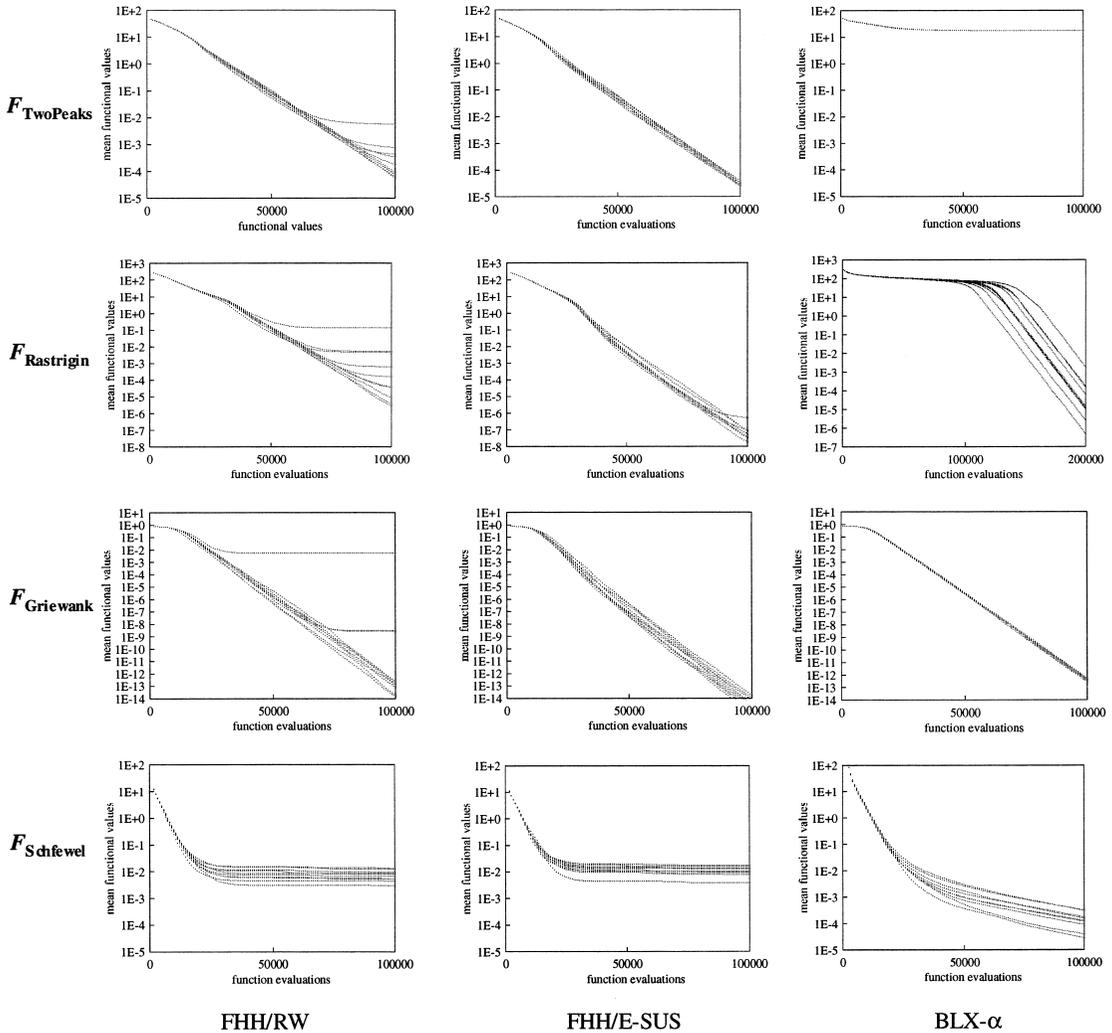


図 10 FHH の収束特性
Fig. 10 Convergence property of the FHH.

索できないためと思われる。さらに BLX- α は、両親を結ぶ線分を拡張した線分から一様サンプリングにより子個体が生成されるため、分散の大きいサンプリング法である。一方、FWH および FHH には、サンプリングバイアスが存在せず、式 (3) の条件が満たされている限り、最適解の位置に依存せずに Histogram の確率に基づいて有望領域がサンプリングされる。

4.2.2 FHH の高精度探索特性

2.3 節の図 6 に示したように FHH は、個体分布の密度が高いところは、ピンの幅が縮小し、この結果高精度に解を探索できる特徴を持っている。図 9 は、関数 $F_{Rastrigin}$ における変数 x_1 でのピン位置の変化の一例を示したものである。世代が進むに従って、ピン位置が最適解の近辺に収束していく状況が分かる。な

お、この例では FHH/RW を用い、集団サイズは 800 とした。

図 10 に各関数における FHH の収束過程を示す。縦軸は、関数値の集団における平均値である。集団サイズは各関数とも 800 とした。実験回数は 10 とし、各実験での関数評価回数は最大 100,000 とした。

サンプリング方法の比較では E-SUS が優れていることが分かる。FHH/RW では、関数 $F_{TwoPeaks}$ 、 $F_{Rastrigin}$ および $F_{Griewank}$ において数回ローカル解にトラップされている。これに対して、FHH/E-SUS では、これらの関数において、関数 $F_{Rastrigin}$ で 10 回の実験中 1 回だけローカル解にトラップされているのみである。

関数 $F_{Schfewel}$ では、FHH はグローバル解への収

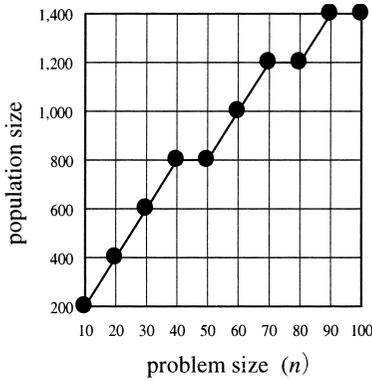


図 11 最適解を 10 回とも発見するのに要した集団サイズ

Fig. 11 Population size needed to find optimal 10 times in 10 runs.

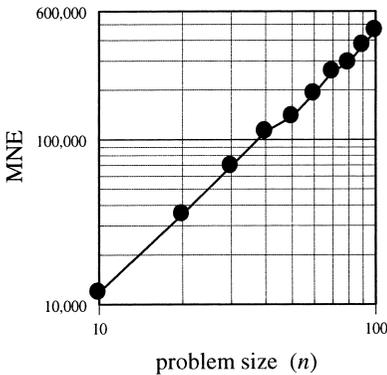


図 12 最適解を 10 回とも発見したときの関数評価回数の平均 (MNE)

Fig. 12 Mean number of function evaluations (MNE) need to find optimal 10 times in 10 runs.

束に失敗している．関数 $F_{Schfewel}$ は、変数間に中程度の絡みを持っている．このように周辺分布を用いる FHH は、中程度の強度の変数間の絡みを持つ関数では、精度良く解を得ることに失敗する．

BLX- α オペレータは、関数 $F_{Rastrigin}$ および $F_{Griewank}$ では、FHH/E-SUS と同様な探索特性を持っている．しかし関数 $F_{TwoPeaks}$ では、表 2 で見たのと同様、グローバル解には収束できなかった．

4.2.3 FHH の次元数を増やした場合のスケールアップ特性

ここでは、関数 $F_{TwoPeaks}$ の次元数 n を 10 から 100 まで増加させたときのスケールアップ特性の結果を見る．この関数の最適解は $(1.0, 1.0, \dots, 1.0)$ であるので、ベスト個体のパラメータ値が

$$\forall_{i=1, \dots, n} 1.0 - 0.005 \leq x_i \leq 1.0 + 0.005 \quad (6)$$

となったとき、最適解が発見されると判断する．次元数は 10 単位で増加させた．このとき 10 回の実験で

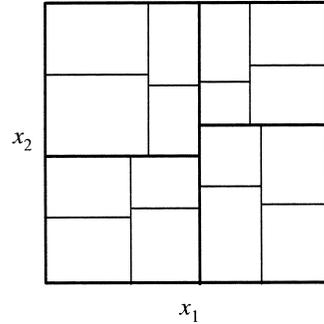


図 13 x_1, x_2 空間における再帰型 FHH

Fig. 13 Recursively divided FHH in spaces x_1, x_2 .

10 回とも最適解を得るのに必要とした集団サイズと関数評価回数の 10 回の実験の平均 (MNE) の変化を調べた．

図 11 は、次元数と集団サイズの関係である．集団サイズは、次元数 n に比例していることが分かる ($O(n)$)．図 12 は、MNE の変化であり、ほぼ $O(n^{1.56})$ となっている．このように、FHH はサブ解の高いミキシング能力と優れたスケールアップ特性を持っていることが明らかになった．すなわち、バイナリ GA のスキーマ定理に対応していれば、十分な「積み木仮説」を実現しているといえる．

5. 今後の課題

3 章で見たように、周辺分布を用いるヒストグラムモデルは、変数間に絡みがない、あるいは弱い絡みの問題では優れた性能を持っている．しかし変数間に中程度あるいは強い絡みを持つ問題では良い性能が得られない．

周辺分布を用いるヒストグラムモデルの自然な拡張は、多変量ヒストグラムを用いる方法である．しかし単純な拡張では、総ビン数が変数数 n に対して指数オーダー、すなわち、 $O(H^n)$ となるので実際的でない⁵⁾．したがって、ビン数が指数的に増加しない多モデルを工夫することが必要となる．図 13 は、そのような FHH の一例として「再帰型 FHH」を示したものである．図ではまず、 x_1 軸で個体数が同じになるように領域を 2 分割する．次に、 x_2 軸で各々領域を個体数が同じになるように再度領域を 2 分割する．この分割を、細分割された各々の領域に属する個体数がある決められた個数 K_{min} になるまで再帰的に繰り返す．このようにして得られた各々の領域は、周辺分布 FHH の各ビンに相当する．子個体は、各分割された領域を等確率でサンプリングし、次にこの領域内で一様サンプリングすることにより生成される．図 14 は、変数

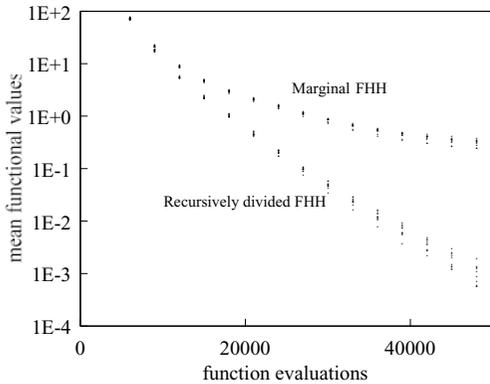


図 14 関数 $F_{Rosenbrock}$ での結果

Fig. 14 Convergence processes on $F_{Rosenbrock}$.

間に強い絡みを持つ Rosenbrock 関数 $F_{Rosenbrock}$

$$F_{Rosenbrock} = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (x_1 - 1)^2, \\ -2.048 \leq x_1, x_2 < 2.047 \quad (7)$$

における周辺分布 FHH と再帰型 FHH の結果である。サンプリング法はともに RW を用いた。集団サイズは 3,000 とし、 $K_{\min} = 2$ とした。この図から、繰返し FHH は有効な多変量ヒストグラムモデルの 1 つの候補であることが分かる。さらに一般的なモデルは今後の検討課題である。

3.2.3 項で見たように FHH は、優れたスケールアップ特性を持っている。これは FHH を用いる確率モデル GA は、サブ解のミキシング能力に優れた性質を持っていることを示している。一方、多変量正規分布混合モデルを用いる確率モデル GA は、変数間にリンクエッジを有する問題に対して優れた性質を有しているが、ミキシング能力については十分でない⁶⁾。したがって、FHH モデルと多変量正規分布混合モデルとを組み合わせる確率モデル GA もこの問題に対する 1 つの解を与えるものと考えられる。これについても今後の重要な研究課題である。

6. む す び

本論文では、周辺分布ヒストグラムを用いる実数値確率モデル GA の一構成法を提案した。ヒストグラムモデルとして等幅ヒストグラム (FWH) および等高ヒストグラム (FHH) を用いた。収束特性では FHH が、解精度、スケールアップ特性で優れていることが明らかになった。

しかし周辺分布を用いるヒストグラム確率モデル GA は、変数間に中程度の絡みを有する問題に対しては満足な性能が得られない。これを解決する方法の検討が今後に残された研究課題であり、その考察も行っ

た。また、従来の GA との比較についての研究もさらに進めていく必要がある。

謝辞 本研究の一部は、文部科学省科学研究補助金 (基盤研究 C) 課題番号 13680469 および同志社大学学術フロンティア「知能情報科学とその応用」研究プロジェクトの一環として行われた。

Professor Goldberg's contribution to the work was sponsored by the Air Force Office of Scientific Research, Air Force Materiel Command, USAF, under grant F49620-00-0163. Research funding for this work was also provided by a grant from the National Science Foundation under grant DMI-9908252. Support was also provided by a grant from the U.S. Army Research Laboratory under the Federated Laboratory Program, Cooperative Agreement DAAL01-96-2-0003.

参 考 文 献

- 1) Baker, J.E.: Reducing bias and inefficiency in the selection algorithm, *Proc. 2nd International Conference on Genetic Algorithms*, pp.14-21 (1987).
- 2) Baluja, S.: Population-based incremental learning: A method for interacting genetic search based function optimization and coemotive learning, Technical Report CMU-CS-94-163, Carnegie Mellon University (1994).
- 3) Baluja, S. and Davies: Using optimal dependency-trees for combinatorial optimization: learning the structure of the search space, Technical Report CMU-CS-97-107, Carnegie Mellon University (1997).
- 4) Bonet, J.S.D., Isbell, C.L. and Viola, P.: MIMIC: Finding optima by estimating probability densities, *Advances in neural information processing systems*, Mozer, M.C., Jordan, M.I. and Petsche, T.(Eds.), Vol.9, pp.424-431 (1997).
- 5) Bosman, P. and Thierens, D.: An algorithmic framework for density estimation based evolutionary algorithms, Technical Report UU-CS-1999-46, Utrecht University (1999).
- 6) Bosman, P. and Thierens, D.: Mixed IDEAs, Technical Report UU-CS-2000-45, Utrecht University (2000).
- 7) Eshelman, L.J. and Shaffer, J.D.: Real-coded genetic algorithms and interval-schemata, *Foundation of Genetic Algorithms*, Vol.2, pp.187-202 (1993).
- 8) Harik, G.: Linkage learning via probabilistic modeling in the ECGA, Technical Re-

- port 99010, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois (1999). (IlliGAL Technical Report).
- 9) Harik, G., Lobo, F.G. and Goldberg, D.E.: The compact genetic algorithm, *Proc. International Conference on Evolutionary Computation 1998 (ICEC 98)*, pp.523–528 (1998).
 - 10) 樋口隆英, 筒井茂義, 山村雅幸: 実数値 GA におけるシンプレックス交叉の提案, *人工知能学会論文誌*, Vol.16, No.1, pp.147–155 (2001).
 - 11) 喜多 一, 小野 功, 小林重信: 実数値 GA における交叉の設計指針について, 第 42 回システム制御情報学会研究発表講演会, pp.9–10 (1998).
 - 12) 喜多 一, 小野 功, 小林重信: 実数値 GA のための正規分布交叉に関する理論的考察, *計測自動制御学会論文誌*, Vol.35, No.(1999).
 - 13) Larranaga, P., Etxeberria, R., Lozano, J.A. and Pena, J.M.: Optimization by learning and simulation of bayesian and gaussian networks, 1999 EHU-KZAAIK-4/99, University of the Basque Country (1999).
 - 14) Mühlenbein, H. and Paaß, G.: From recombination of genes to the estimation of distribution I. Binary parameters, *Proc. Parallel Problem Solving from Nature (PPSN IV)*, pp.178–187 (1996).
 - 15) Pelikan, M., Goldberg, D.E. and Cantu-Paz, E.: BOA: The Bayesian optimization algorithm, *Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference 1999 (GECCO-99)*, San Francisco, CA, Morgan Kaufmann (1999).
 - 16) Pelikan, M., Goldberg, D.E. and Cantu-Paz, E.: Linkage problems, distribution estimate, and Bayesian network, *Evolutionary Computation*, Vol.8, No.3, pp.311–340 (2000).
 - 17) Pelikan, M., Goldberg, D.E. and Lobo, F.G.: A survey of optimization by building and using probabilistic models, *Computational Optimization and Applications*, Kluwer Academic Publishers (in press).
 - 18) Sebag, M. and Ducoulombier, A.: Extending population-based incremental learning to continuous search spaces, *Proc. Parallel Problem Solving from Nature (PPSN V)*, pp.418–427 (1998).
 - 19) Servet, I.L., Trave-Massuyes, L. and Stern, D.: Telephone network traffic overloading diagnosis and evolutionary computation techniques, *Proc. 3rd European Conference on Artificial Evolution (AE 97)*, pp.137–144 (1997).
 - 20) Tsutsui, S.: Sampling baiaas and search space boundary extension in real coded genetic algorithms, *Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conf. 2000 (GECCO'2000)*, pp.211–218 (2000).
 - 21) 筒井茂義, Pelikan, M., Goldberg, D.E.: ヒストグラムを用いた確率モデル遺伝的アルゴリズムの提案, *MPS シンポジウム論文集, 情報処理学会シンポジウムシリーズ*, Vol.2001, No.12, pp.51–58 (2001).
 - 22) Tsutsui, S., Pelikan, M. and Goldberg, D.E.: Evolutionary algorithm using marginal histogram models in continuous domain, *Proc. Optimization by Building and Using Probabilistic Models (OBUPM) 2001, GECCO-2001 Birds-of-a-feather Workshops* (2001).
 - 23) 山村雅幸: モンテカルロ法による遺伝的オペレータの機能解析, *SICE 自律分散・シンポジウム*, pp.115–120 (1998).

(平成 14 年 2 月 5 日受付)

(平成 14 年 5 月 26 日再受付)

(平成 14 年 6 月 19 日採録)



筒井 茂義 (正会員)

1967 年大阪市立大学工学部電気工学科卒業。1969 年同大学大学院工学研究科修士課程修了。同年(株)日立製作所入社, 中央研究所にて制御用計算機システムの研究に従事。1978 年同社システム開発研究所にて, 分散型電子交換機およびマイクロコンピュータ用 OS の研究に従事。1987 年より阪南大学に勤務。現在経営情報学部経営情報学科教授。工学博士。経営情報システム, 進化的計算の基礎の研究に従事。1993 年度人工知能学会全国大会優秀論文賞受賞, 1996 年度人工知能学会論文賞受賞。人工知能学会, 電子情報通信学会, システム制御情報学会, IEEE 各会員。

**Martin Pelikan**

Martin Pelikan was born in Martin, Slovakia on December 8, 1974. He graduated from the Comenius University in Bratislava, Slovakia in 1998 with a degree in Computer Science. Prior to arriving in Illinois to pursue graduate study in Computer Science, he visited several laboratories as a visiting researcher, including the Department of Mathematics of the Slovak Technical University in Bratislava (Slovakia), the Adaptive Systems Group at the German National Center for Information Technology in Sankt Augustin (Germany), and the Illinois Genetic Algorithms Laboratory at the University of Illinois at Urbana-Champaign. He received a Ph.D. degree from the Department of Computer Science at the University of Illinois at Urbana-Champaign in October 2002. Following the completion of his Ph.D., Pelikan will engage in postdoctoral research.

**David E. Goldberg**

David E. Goldberg (BSE, 1975, MSE, 1976, Ph.D., 1983) in Civil Engineering from the University of Michigan, Ann Arbor) is Professor of General Engineering at the University of Illinois at Urbana-Champaign (UIUC) and director of the Illinois Genetic Algorithms Laboratory (IlliGAL). Between 1976 to 1980 he held a number of positions at Stoner Associates of Carlisle, PA, including Project Engineer and Marketing Manager. Following his doctoral studies he joined the Engineering Mechanics faculty at the University of Alabama in 1984. In 1990, he moved to the University of Illinois in 1990. Professor Goldberg was a 1985 recipient of a U.S. National Science Foundation Presidential Young Investigator Award, and in 1995 he was named an Associate of the Center for Advanced Study at UIUC. He is founding chairman of the International Society for Genetic and Evolutionary Computation, and his book *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning* is the fourth most widely cited reference in computer science according to CiteSeer. His research focuses on the design, analysis, and application of genetic algorithms—computer procedures based on the mechanics of natural genetics and selection—and other innovating machines. He has just completed a new monograph, *The Design of Innovation*. Professor Goldberg is Consulting Editor for the Kluwer Series on Genetic Algorithms and Evolutionary Computation.
