

S3 群(脳・知能・人間) - 4 編(ソフトコンピューティングとニューラルネットワーク)

3 章 進化計算

(執筆者：伊庭斉志)[2012 年 7 月 受領]

概要

進化計算は、生物の進化のメカニズムをまねてデータ構造を変形，合成，選択する手法である．この方法により最適化問題の解法や有益な構造の生成を目指す．

進化計算の代表例が，遺伝的アルゴリズムと遺伝的プログラミングである．

本章では進化計算の原理と拡張について解説する．

【本章の構成】

まず遺伝的アルゴリズム(3-1 節)及び遺伝的プログラミング(3-2 節)について説明する．続いて，それらの拡張である，対話型進化計算(3-3 節)，確率モデル GA と確率モデル GP(3-4 節)，多目的最適化(3-5 節)に関して解説する．

S3 群 - 4 編 - 3 章

3-1 遺伝的アルゴリズム

(執筆者: 安藤 晋)[2008年9月受領]

3-1-1 概要

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm, 以下 GA) は生物の遺伝と進化のモデルを利用した計算手法である。Holland により集団の適応を実現するシステムとして提案された¹⁾後、現在までに様々な拡張が加えられた。多様な探索・最適化問題に応用される代表的な進化計算手法である。

GA の探索は確率的・多点探索である点を特徴とする。GA は対象とする問題の解インスタンスの集合を保持し、遺伝オペレータと呼ばれる確率的に解を改変する操作により試行解を生成する。そして、淘汰と呼ばれる良い解で集合を置き換える操作の反復によって適合度の高い解を探索する。

GA は大域的探索に優れた手法とされる一方、メモリの使用量や評価値計算のコストが比較的大きい。ただし、評価値の計算に関しては並列化による恩恵を受けやすい。また、目的関数の微分を必要としないため解析的な手法と比べて広範囲な問題に適用可能である。

3-1-2 GA の仕組み

GA の仕組みは生物の遺伝・進化のアナロジーを用いて説明される。ダーウィンの自然淘汰のモデルは個体の形質と環境から決定される適合度を考え、生存競争によって選択された適合度の高い個体が繁殖し、その形質を次世代の個体に伝えるとする。また、分子生物学のセントラルドグマは遺伝子が世代間で伝達され、個体の形質をその発現の結果とする。

GA の進化モデルは対象問題の解のインスタンスを個体とみなし、一定数の解集合を集団 (population) として保持する。個々の決定変数が遺伝子、その 1 次元配列が個体の遺伝子型 (genotype) となる。解の評価値は個体の適合度 (fitness) に対応する。進化のプロセスは複製 (reproduction) と選択 (もしくは淘汰, selection) の反復としてモデル化される。複製は集団から抽出した親個体から遺伝オペレータによって新たな子個体を生成する操作、選択は集団を適合度のより高い子個体によって置き換える操作である。複製と淘汰の反復の結果、集団はより適合度の高い個体によって占められていく。集団の適合度に関する解析として Holland のスキーマ定理^{1, 2)}がある。

3-1-3 遺伝子型と遺伝オペレータ

GA における遺伝子型は通常、決定変数を 1 次元配列としたデータ構造である。遺伝オペレータは評価値が既知の解を改変することで試行解を生成する操作で、遺伝子型に合わせて設計される。名義変数の配列を遺伝子型とする文字列型 GA や実数ベクトルを遺伝子型とする実数値型 GA が一般的だが、ニューラルネットワークの生成コードや分類ルール集合を遺伝子型とする GA もある^{3, 4)}。

GA の探索性能は対象問題に対する遺伝子型と遺伝オペレータの適性に依存する。例えば実数ベクトル空間での関数最適化問題では決定変数をグレイコードなどに変換した遺伝子型を用いる文字列型 GA よりも実数値型 GA が優ることが示されている^{2, 5)}。

GA で主に用いられる遺伝オペレータは交叉 (crossover) と変異 (mutation) である。交

又が複数の個体を引数として新しい個体を生成する処理であるのに対し、変異は単一の個体を引数とする。文字列型 GA の交叉には二つの個体の遺伝子型を一つの前で交換する一点交叉 (one-point crossover) や各遺伝子を確率 p_c で交換する一様交叉 (uniform crossover) などがある。変異は非常に小さな確率 p_m で各遺伝子の値を変更する。 p_c, p_m は交叉率、変異率と呼ばれる²⁾。実数値型 GA の遺伝オペレータについては 3-1-5 節で述べる。

適合度の増大に寄与する遺伝子型の部分列はビルディングブロック (building block, 以下 BB) と呼ばれる。BB に含まれる遺伝子はリンケージ (linkage) と呼ばれ、適合度への寄与において強い相関をもつ。交叉を行う際リンケージの遺伝子を別々に交換すると BB が壊れ、良い解が生成されにくい。リンケージ学習 GA⁶⁾ はリンケージを推定し、交叉の際にまとめることで BB の破壊を抑制することを考慮した手法である。関連手法として同時確率分布に基づいてリンケージを推定する分布推定アルゴリズム (EDA) がある^{7, 8)}。

3-1-4 選択と多様性

選択は GA の進化プロセス中、複製のための親個体を抽出する際、及び新しい個体で集団を置換する際に行われる。二つを区別する場合、前者を複製選択、後者を生存選択もしくは世代交代モデルと呼ぶ。適合度の高い個体ほど高い確率で選択されるため、選択によって集団のばらつきは減少し、交叉による探索は収束に向かう。ただし、探索初期に集団の多様性が失われると大域的な探索が十分に行われず、局所解に集団が収束する初期収束 (premature convergence) が起きる。GA の研究では当初から多様性の重要性が認識され、適合度の低い個体にも複製のチャンスを与えるソフト選択などの多様性維持の戦略が研究されている。

複製選択の例としては、個体の適合度や順位に応じて選択確率を配分するルーレット選択やランク選択、ランダムに選択した個体から適合度上位のものを選択するトーナメント選択などがある。生存選択には世代ごとに集団をすべて入れ替える単純 GA の世代交代モデル、少数の個体のみを入れ替える steady-state や一定数の適合度上位個体を次世代に繰り越すエリート戦略などがある²⁾。

複数の局所解が存在する問題の探索では一つの局所解周辺に集団が偏りすぎることは望ましくない。これを抑制するには探索空間中で近接した類似個体どうしで複製や選択を行うのが効果的である。更に、親個体と子個体は類似性が高いとの考えに基づき親子間で生存選択を行う家族選択モデルが多く提案されている。決定的・確率的 crowding^{9, 10, 11)} は類似度の高い親子のペアを比較し、子個体の適合度が高い場合に親個体を置換する。Minimal Generation Gap (MGG)¹²⁾ は集団からランダムに選択した複数の親個体から多数の子個体を生成し、親子併せた集合から適合度上位個体とルーレット選択により決定した個体を集団に置換する。MGG は実数値型 GA で多く用いられる。

選択以外で多様性を促進する方法として Fitness Sharing がある^{11, 13)}。Fitness Sharing はある個体の適合度を一定距離内に存在する個体の数やその類似度に応じて割り引いた調整適合度を用いることで集団が単一の局所解周辺に集中することを抑制する。

一般に、多様性の維持と大域的な探索性能は収束速度とトレードオフの関係にある。収束速度を補う手段としては、GA で生成した個体をローカル探索手法により局所的に解を改善するハイブリッド手法が多く応用で用いられている¹⁴⁾。このような手法は Memetic Algorithm, Cultural Algorithm, Lamarckian Algorithm などと呼ばれる。

3-1-5 実数値型の GA と進化計算手法

実数値型 GA は実数値ベクトルの遺伝子型を用い、ユークリッド探索空間での関数最適化問題を扱う。実数値型 GA では交叉が主要な遺伝オペレータであり、その設計は生物の遺伝モデルではなく機能分担仮説や統計量の遺伝⁵⁾などの関数最適化のための設計指針に基づく。

実数値型 GA の交叉は複数の親個体を引数として確率分布を定義し、その分布から子個体を抽出する操作となっている。BLX- α や UNDX が代表的な交叉である^{5, 15)}。BLX- α は親個体を頂点とする超立方体を伸張した領域の一樣分布、UNDX は親個体の重心を平均とする多変数正規分布から子個体を抽出する。実装上は親個体の重心や差分ベクトルを乱数で生成した重み係数で線形結合することで子個体のベクトルが計算される。

実数値型 GA 以外にも集団による関数最適化を扱う手法として進化戦略 (Evolution Strategy, 以下 ES)¹⁶⁾ や Particle Swarm Optimization (以下 PSO)¹⁷⁾、微分進化法 (Differential Evolution, 以下 DE)¹⁸⁾ がある。ES は突然変異を主要な探索手段とし、個体の探索履歴に基づく自己適応に重点をおいた手法である。代表的な手法に共分散行列適応 ES (CMA-ES)¹⁹⁾ がある。PSO は魚や鳥の群れの行動モデルを利用した手法で、個体ベクトルを探索履歴から計算した速度ベクトルに基づいて移動させることで探索を行う。速度ベクトルは探索履歴中の最良解への差分から決定されるため、その探索は GA よりも貪欲である。これらの探索では集団のもつ情報への依存度が GA よりも低く、比較的小さな集団による探索でも効果があげられる。また、DE は非凸最適化の分野で提案された手法で、変異ベクトルによる摂動を主要な探索手段とする。変異ベクトルは複数の親個体の差分から計算されるため ES と GA の中間的な手法とみなせる。

進化計算の分野ではこのような異なるモデルを用いた手法間で様々な問題への適性を比較する研究や相互にモデルを導入することで拡張する試みも盛んである。

3-1-6 GA のパラメータ

進化のモデルは様々な要素を複雑な複雑なシステムあり、その実装には多くのモデル選択やパラメータ決定が伴う。遺伝オペレータ、世代交代モデル、交叉・変異率といった GA のモデルやパラメータは多様性の維持や探索 (exploration) と搾取 (exploitation) のバランスといった探索における方針を制御し、その影響は相関をもつ場合が多い。GA のパラメータ選択に関して多くの研究があり、対象とする問題に応じてモデルやパラメータを適切に設定することで GA は広範囲の問題で効果的に応用されている。ただし、特に目的関数に前提をおかない場合、パラメータによる集団の挙動の変化を解析的に扱うことは困難であるため、多くの GA のパラメータは経験的に決定した値を用いる。

パラメータの値やモデルを統計的に比較検証する手段としては分散分析 (ANOVA) を用いる方法がある²⁰⁾。GA のパラメータやモデルを母数因子、確率的挙動を誤差因子とし主効果や交互作用の有意性を検証する。また、探索過程でパラメータを適応的に決定する手法に parameter-less GA²¹⁾ がある。ただし、この手法は探索過程でパラメータ探索のため余分に評価計算を実行するため経験的に決定するアプローチと一概に効率性を比較することはできない。

参考文献

- 1) John H. Holland, “Adaptation in Natural and Artificial Systems : An introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence,” University of Michigan Press, Ann Arbor, 1975.
- 2) メラニーミッチェル (伊庭育志監訳), “遺伝的アルゴリズムの方法,” 東京電機大学出版局, 1997.
- 3) Xin Yao, “Evolving artificial neural networks,” In Proceedings of the IEEE, vol.87, no.9, pp.1423–1447, 1999.
- 4) Larry Bull and Tim Kovacs, editors., “Foundations of Learning Classifier Systems,” vol.183 of Studies in Fuzziness and Soft Computing, Springer, Berlin, 2005.
- 5) 小野 功, 山村雅幸, 喜多 一, “実数値 GA とその応用,” 人工知能学会誌, vol.15, no.2, pp.259–266, 2000.
- 6) David E. Goldberg, “The Design of Innovation: Lessons from and for Competent Genetic Algorithms,” Kluwer Academic Publishers, Norwell, MA, USA, 2002.
- 7) Heinz Mühlenbein and G. Paas, “From recombination of genes to the estimation of distributions,” In Lecture Notes in Computer Science: Parallel Problem Solving from Nature (PPSN IV), vol.1411, pp.178–187. Springer-Verlag, 1996.
- 8) Pedro Larrañaga and José A. Lozano, editors., “Estimation of Distribution Algorithms : A new tool for evolutionary computation,” Genetic Algorithms and Evolutionary Computation, Kluwer Academic Publishers, Boston, 2002.
- 9) S.W. Mahfoud, “Crowding and preselection revisited,” In Reinhard Männer and Bernard Manderick, editors, Parallel problem solving from nature, vol.2, pp.27–36, Amsterdam, North-Holland, 1992.
- 10) O.J. Mengshoel and D.E. Goldberg, “Probabilistic crowding: Deterministic crowding with probabilistic replacement,” In W. Banzhaf et al., editor, Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference, pp.409–416. Morgan Kaufmann, 1999.
- 11) 伊庭育志, “遺伝的アルゴリズムの基礎,” オーム社, 2001.
- 12) H. Satoh, M. Yamamura, and S. Kobayashi, “Minimal generation gap model for GAs considering both, exploration and exploitation,” In Proceedings of IIZUKA: Methodologies for the Conception, Design, and Application of Intelligent Systems, pp.494–497, Singapore, 1996. World Scientific.
- 13) Kalyanmoy Deb and David E. Goldberg, “An Investigation of Niche and Species Formation in Genetic Function Optimization,” In Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms, pp.42–50, San Francisco, CA, USA, 1989. Morgan Kaufmann Publishers Inc.
- 14) Natalio Krasnogor and J.E. Smith, editors., “Recent Advances in Memetic Algorithms,” Springer, 2005.
- 15) 喜多, 小野, 小林, “実数値 GA のための正規分布交叉の多数の親を用いた拡張法の提案,” 計測自動制御学会論文集, vol.36, no.10, pp.875–883, 2000.
- 16) Thomas Bäck, “Evolutionary Algorithms in Theory and Practice: Evolution Strategies, Evolutionary Programming, Genetic Algorithms,” Oxford University Press, 1996.
- 17) James Kennedy and Russell C. Eberhart, “Swarm Intelligence,” Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 2001.
- 18) Rainer Storn and Kenneth Price, “Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces,” J. of Global Optimization, vol.11, no.4, pp.341–359, 1997.

- 19) Nikolaus Hansen, Sibylle D. Müller, and Petros Koumoutsakos, “Reducing the time complexity of the derandomized evolution strategy with covariance matrix adaptation (CMA-ES),” *Evol. Comput.*, vol.11, no.1, pp.1–18, 2003.
- 20) I. Rojas, J. Gonzalez, H. Pomares, J.J. Merelo, P.A. Castillo, and G. Romero, “Statistical analysis of the main parameters involved in the design of a genetic algorithm,” *Systems, Man, and Cybernetics, Part C: Applications and Reviews, IEEE Transactions on*, vol.32, no.1, pp.31–37, Feb. 2002.
- 21) Fernando G. Lobo and David E. Goldberg, “The parameter-less genetic algorithm in practice,” *Inf. Sci. Inf. Comput. Sci.*, vol.167, no.1–4, pp.217–232, 2004.

3 群 - 4 編 - 3 章

3-2 遺伝的プログラミング

(執筆者：長谷川禎彦)[2008年9月受領]

遺伝的アルゴリズム(GA: genetic algorithm)¹⁾が提案されてから、様々な拡張手法が提案されているが、最も大きな拡張の一つが遺伝的プログラミング(GP: genetic programming)であると考えられている²⁾。一般的なGAは解候補の表現に固定長1次元配列を用いるが、GPは木構造を用いる。GPは木構造を用いるため表現能力が非常に高く、関数やプログラムなどの高度な構造表現を伴う問題に適用することが可能である。このことから、ロボット工学、芸術、金融工学、バイオインフォマティクスなど、多様な分野に応用されている^{3, 4)}。

GPはGAの拡張手法であるため、GAと共通する部分が多い。そのため、本節ではGPの特徴的な部分に重点をおいて説明する。

3-2-1 GPにおける個体表現方法

一般的なGAは固定長の1次元配列を用いる。そのため、GAの適用対象はパラメータ調整といった問題が中心であり、プログラムや関数などの構造表現を伴う問題への適用は難しいと考えられてきた。GPはこのような構造表現の探索をするために、固定長1次元配列を構造をもつ表現へと拡張した手法である。LISPに代表される関数型言語のプログラム言語ではプログラムを木構造で表現することから、一般的なGPは木構造を用いる。図3・1に、GPの個体の例を示す。図3・1(a)は関数 $y \times \pi + x$ を表す木構造である。関数を扱うことができるため、関数同定問題などに対してGPを適用することができる。また、図3・1(b)はプログラムを表す木構造である。GPはプログラムの進化も行うことができるため、ロボットプログラムの自動生成などに応用されている。特に、メモリの読み書きのノードを加えることで、GPはチューリング完全となり、原理的には一般的なプログラムで扱えるような問題すべてを対象とすることができる。

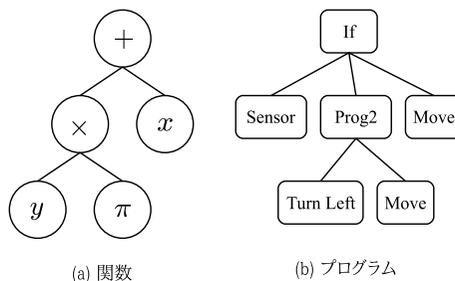


図 3・1 関数 (a) やプログラム (b) の例

3-2-2 GPの実行手順

GPを問題に適用するに当たり、以下の三つを定義する必要がある。

- 適合度関数

- 関数ノード及び終端ノード
- GP パラメータの設定

適合度関数は、GP の個体を評価する関数である。関数同定問題の場合を例にすると、一般的な適合度関数は二乗誤差となる。関数及び終端ノードの設定は、GP が探索する解空間の広さを決定する。解空間の中に目的とする解が含まれるようにすると同時に、解空間が広すぎないように設定する必要がある。一般的な GP は表 3・1 に示すパラメータをもつ。この表で、エリート戦略は GA で用いられるものと同一である。交叉及び突然変異は、GP が木構造を用いることから、GA とは異なる手法によって行われる。個体の選択は GA と同様の戦略が用いられる。

表 3・1 一般的な GP のパラメータ

パラメータ	意味
集団数	一世代に扱う個体数
エリート率	集団数に対する、エリート個体の割合
交叉率	集団数に対する、交叉を施す個体数の割合
突然変異率	集団数に対する、突然変異を施す個体数の割合
選択手法	選択手法 (トーナメント選択, 適合度比例選択) のパラメータ

GP は以下に示す手順を踏むことで、解候補を進化させる。

1. 初期個体の生成
初期個体をランダムに生成する。生成される個体数は、集団数と同じである。
2. 適合度評価
適合度関数によって、各個体が評価され、それぞれに適合度が与えられる。
3. 選 択
設定した選択アルゴリズムによって、適合度情報をもとに優良個体が選択される。
4. 突然変異と交叉
選択された優良解に対して突然変異及び交叉操作を施す。
5. 探索終了条件を満たした場合は終了し、満たさない場合は 2 に戻る。

以下では、上で列挙した各操作について詳しく説明する。

(1) 木構造の初期化

GP は初期集団の生成にあたり、集団数個分の個体をランダムに生成する。効率の良い探索を行うためには、初期集団は解空間になるべく一様に分布していることが求められる。バイナリ GA の場合、初期個体は各遺伝子座でランダムに 0 と 1 を選択することで一様に分布させることが可能であるが、GP は木構造であるため初期個体を一様に分布させることが

難しい。GP の木構造初期化手法は大きく分けて FULL と GROW の 2 種類がある。

- FULL

木構造は可変長ではあるが、木構造の最大深さには通常制限を設ける。FULL は、最大深さに達するまでは関数ノードからランダムに選択する。

- GROW

GROW では最大深さに達するまではすべてのノード(関数ノード及び終端ノード)からランダムに選択する。

通常は、二つの初期化手法の一つのみを用いるのではなく、組み合わせて用いる場合が多い。特に、両方の組合せである RAMPED HALF AND HALF と呼ばれる初期化手法は、生成される個体の多様性が高いことから頻繁に用いられる。

(2) 適合度評価

適合度は、個体が問題に対してどれくらい良い解であるかを、数値で表したものである。ここでは、具体的な例として、関数同定問題を考える。関数同定問題は GP の最も基本的な問題の一つであり、多くの問題が関数同定問題へと帰着される。ここでは、1 次元の関数同定問題を考える。学習例 $(x, y) \in \mathbf{R}^2$ の集合が与えられたとき、 $f: x \rightarrow y$ のマッピングを推定する問題が関数同定問題である。

GP においては、関数同定問題の適合度は、通常式 (3.1) によって表現される。

$$fitness_j = \sum_{i=1}^n |y_i - f_j(x_i)| \quad (3.1)$$

ここで、 $fitness_j$ は個体 j の適合度、 $f_j(\dots)$ は個体 j の関数を表し、 x_i, y_i は i 番目の学習例を表す。この適合度の定義から明らかなように、学習例を完全に再現する個体の適合度は 0 となる。

(3) 選択演算子

生物は環境への適応具合によって淘汰圧を受け、環境により適合した個体が生き残りやすい。これを工学的に考えると、環境は学習例に相当し、環境への適応具合は適合度によって置き換えて考えることができる。進化アルゴリズムにおける選択は、このような生物進化のエッセンスを人工的に作り出す操作である。GP で用いられる選択操作は GA のそれと同じである。通常は以下のような選択手法が用いられる。

- 適合度比例選択
- トーナメント選択
- 切り取り選択

いずれの選択操作を施した場合においても、適合度の良い個体により生き残りやすいという点は同じである。

(4) 遺伝的オペレータ：突然変異，交叉

進化アルゴリズムにおいて、遺伝的オペレータは非常に重要な位置を占める。選択操作の繰り返しでは、集団としての進化は行われない。突然変異や交叉によって集団に多様性が生まれ、選択操作と組み合わせられてはじめて解の進化が行われる。

GA における突然変異は、任意の遺伝子座の値が変異することによって行われる（例えば 0 が 1 に、1 が 0 に変化する）。GP における突然変異は、GA の突然変異を木構造に拡張したものである。GP で最も一般的に用いられる突然変異は、部分木突然変異である。部分木突然変異では、任意の部分木がランダムに生成された木構造と交換される（図 3・2）。

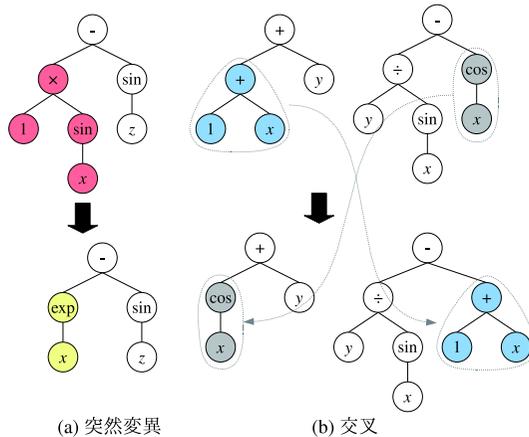


図 3・2 GP における遺伝的操作：突然変異（左）と交叉（右）

交叉オペレータの場合も同様に、GA の交叉を木構造に拡張したものとなっている。GA では、1 次元の配列の部分配列を交換することで行われる。GP では、二つの個体の部分木を交換することで、交叉は行われる。選択操作によって選ばれた二つの個体に対して、ランダムに部分木が選択され、その部分木を交換する（図 3・2）。

上記の遺伝的操作の特徴的な点は、突然変異及び交叉を施した後も、文法的に破壊された個体が生じないという点である（例えば、 $(1 + 2) \times$ のような個体）。GP が木構造を用いるのはこのためでもある。

参考文献

- 1) J.H. Holland, “Adaptation in Natural and Artificial Systems,” University of Michigan press, 1975.
- 2) J.R. Koza, “Hierarchical genetic algorithms operating on populations of computer programs,” In Proceedings of the Eleventh International Joint Conference on Artificial Intelligence IJCAI-89, vol.1, pp.768–774, San Francisco, CA, 1989. Morgan Kaufmann.
- 3) 伊庭音志, “遺伝的プログラミング入門,” 東京大学出版会, 2001.
- 4) 伊庭音志, “バイオインフォマティクスシリーズ 遺伝的アルゴリズム,” 医学出版, 2002.

S3 群 - 4 編 - 3 章

3-3 対話型進化計算

(執筆者:) [20xx 年 x 月 受領]

3 群 - 4 編 - 3 章

3-4 確率モデル GA と確率モデル GP

(執筆者：柳井孝介)[2008 年 9 月 受領]

GA の交叉や突然変異は、乱数を用いて確率的に次世代の個体を生成する。したがって、交叉や突然変異による個体の生成は、ある暗黙の確率分布からのサンプリングとみなすことができる。

そこで事前に仮定した確率モデルを用いて、次世代の個体分布を表す確率分布 $P_{t+1}(x)$ を明示的に求め、この $P_{t+1}(x)$ をサンプリングして個体を生成する手法が考えられる。ここで t は世代数、 x は遺伝子、 $P_t(x)$ は世代 t で遺伝子 x が生成される確率を表す。このように、GA のパラダイムに確率モデルを組み込んだ手法を確率モデル GA (PMBGAs: Probabilistic Model-Building GAs, または EDAs: Estimation-of-Distribution Algorithms) という。一方、確率モデル GA の考え方を GP に適用したものを確率モデル GP (PMBGPs, または EDA-based GPs) という。

3-4-1 アリゴリズム・原理

確率モデル GA/GP は、以下の Step 1~4 を繰り返すことで解を探索する。

Step 1: 評価 各個体を評価し、適合度を割り当てる。

Step 2: 選択 集団内から適合度の高い個体を一定数選択する。

Step 3: 推定 選択した個体グループがもつ遺伝子の確率分布 $P_{t+1}(x)$ を推定する。

Step 4: サンプリング $P_{t+1}(x)$ に従う乱数を生成することにより個体を生成する。

図 3-3 に確率モデル GA による 1 次元空間での解探索のイメージを示す。一般的な GA/GP では個体を生成するために交叉と突然変異を用いるのに対し、確率モデル GA/GP では確率分布の推定とサンプリングにより個体を生成する。Step 1 と Step 2 は従来の GA/GP と同様に行われる。Step 3 では、事前に仮定した確率モデルに基づいて、遺伝子の確率分布 $P_{t+1}(x)$ を推定する。 $P_{t+1}(x)$ は集団内での適合度の高い個体に基づいているため、以前の分布 $P_t(x)$ よりも適合度関数のかたちに近いことが期待される。Step 4 では、 $P_{t+1}(x)$ をサンプリングすることにより新しい個体を生成する。したがって、新しく生成された個体の

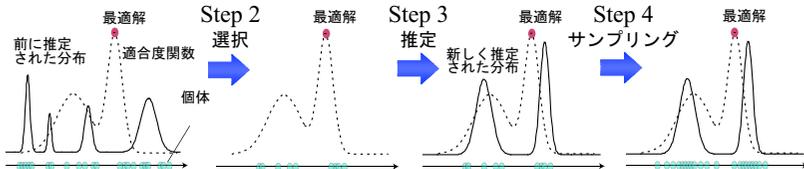


図 3-3 確率モデル GA による解探索のイメージ

適合度は、平均的には以前の個体の適合度よりも高いと考えられる。この原理により、Step 1 から Step 4 を繰り返すことで、より適合度の高い解を探すことができる。

3-4-2 用いられる確率モデル

確率モデル GA/GP では、解の分布を表現する確率モデルを事前に仮定する必要がある。変数間の依存関係をどう扱うかによって、利用する確率モデルを選択する必要がある。これまでに以下のモデルを利用する手法が提案されている。

確率モデル GA 一変量周辺分布, ベイジアンネット, 直鎖状ベイジアンネット, 木構造型ベイジアンネット, 多変量正規分布, 周辺分布積モデル

確率モデル GP 一変量周辺分布, ベイジアンネット, 木構造型ベイジアンネット, 周辺分布積モデル, 確率文脈自由文法モデル

一変量周辺分布は各変数が独立なモデルであるが、それ以外のモデルでは変数間の依存関係を扱うことができる。これらの詳細に関しては、文献 1, 2, 3)などを参照されたい。

以下では、具体的に一変量周辺分布を用いる方法⁴⁾について説明する。一変量周辺分布モデルでは、確率分布は

$$P_t(\mathbf{x}) = \prod_i P_{t,i}(x_i) \quad (3.2)$$

と表される。ここで $P_{t,i}(x_i)$ は、遺伝子の i 番目の要素が x_i となる確率を表す。各 $P_{t,i}(x_i)$ は、選択された個体グループに対し、以下の式により求められる。

$$P_{t,i}(x_i) = \frac{i \text{ 番目が } x_i \text{ である個体の数}}{\text{全個体数}} \quad (3.3)$$

一変量周辺分布を用いる方法では、上記の確率モデルにより、遺伝子の分布を表現する。

3-4-3 特徴

多くの研究において、交叉・突然変異を用いる手法と確率モデルを用いる手法で、探索性能に違いが見られたと報告されており、両者は本質的に異なる振る舞いをすると考えられている。したがって、確率モデルを用いる探索手法は、従来の GA/GP による探索が失敗したときの代替手法として利用できる。

確率モデル GA/GP の利点として以下がある。

確率モデル GA 変数間の相関を考慮して解探索できる。

確率モデル GP 交叉や突然変異に比べ、生成される木構造の形の制約が小さい。

GA の交叉や突然変異は、変数間の相関を無視して新しい解を生成する。例えば、解が $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{10})$ と 10 次元のベクトルで表され、 x_1 と x_{10} に相関があり、残りの変数は互いに独立であると仮定する。このとき、 x_2 から x_9 までは独立に最適化してよいが、 x_1 と x_{10} は同時に最適化した方がよいと考えられる。しかし交叉と突然変異では、 x_1 と x_{10}

の関係を保ちながら最適化するのには困難である。変数間の依存関係がより複雑な場合には、GA の探索性能が著しく低下することが予想される。

確率モデル GA では、変数間の依存関係をもつ確率モデルを用いることにより、 x_1 と x_{10} の相関を考慮して解の探索をすることが可能である。例えば、確率モデルとしてベイジアンネットを用いる手法では、確率分布を推定するときに変数間の依存関係も推定するため、 x_1 が x_{10} の親ノード（またはその逆）と推定される。これにより、 x_{10} の生成確率は、 x_1 に依存する条件付き確率としてモデル化される。

一方、確率モデル GP では、変数間の相関を扱えることのメリットが薄い。これは、GP は元々、変数間の相関を考慮している探索手法であるためである。GP が扱う木構造型の表現では、一般的に親ノードと子ノードに強い相関がある。GP はこの特性を利用して、部分木単位で交叉や突然変異を行う。よって新たに変数間の相関を扱うモデルを導入する効果が小さい。

確率モデル GP においては、2-3 のベンチマーク問題において、従来の GP の性能を大幅に上回ったと報告されている。これは、GP の交叉や突然変異により生成される木の形に制限があることに原因があると考えられている。例えば、最適解が完全木の場合には GP による探索が困難であることが報告されている。確率モデル GP では、交叉や突然変異を用いないため生成される木の形に制限がなく、GP による探索が困難である一部の問題において優れた探索性能をもつ。

参考文献

- 1) S.K. Shakya, “Probabilistic model building genetic algorithm (PMBGA): A survey,” Technical report, Aberdeen, Scotland UK., 2003.
- 2) 柳井孝介・伊庭斉志, “条件付確率に基づく分布推定アルゴリズムによるプログラム進化,” 情報処理学会論文誌, vol.46, no.SIG10, pp.111-123, 2005.
- 3) 長谷川禎彦・伊庭斉志, “潜在アノテーション推定を用いた確率文法による分布推定アルゴリズム,” 人工知能学会論文誌, vol.23, no.1, pp.13-26, 2008.
- 4) H. Mühlhenn, J. Bendisch, and H.M. Voigt, “From recombination of genes to the estimation of distributions I. Binary parameters,” In Proceedings of the Parallel Problem Solving from Nature, pp.178-87, Springer, 1996.

3 群 - 4 編 - 3 章

3-5 多目的最適化

(執筆者: 廣安知之)[2009年5月受領]

3-5-1 多目的最適化とは

設計の原理¹⁾によれば,設計とは必要機能から設計変数の写像プロセスと定義したうえで,よい設計の条件として,必要機能の独立性と情報量の最小化を挙げている.そのため,設計を行う際には着目している項目がそれぞれどのような依存関係にあるのか,どれほど独立性が保たれているのかを吟味し,重要性の低い項目を排除して情報量を削減することが重要である.実際の設計を行う際には,複数の着目する項目が存在し,多数の制約条件が存在するのが常である.そのため,設計者は自身の有する情報を駆使して,これらの中から重要な着目点と制約条件,設計変数だけを抽出し,設計を行うことが良いものづくりにつながると考えられる.

最適化問題は,制約条件内で目的関数の値を最小化もしくは最大化する設計変数を決定する問題である.実問題を最適化問題に定式化することができれば,種々の最適化手法を利用することにより,コンピュータシミュレーションにより実問題を解決する補助が可能となる.計算機の能力が飛躍的に向上した現在においては,この最適化手法による問題解決が設計問題においても重要なツールの一つとなっている.しかしながら,概念設計などを行うような設計の初期段階であったり,基礎設計や詳細設計の段階であっても実験を行うことが容易でないような場合には,存在する着目点や制約条件の関係の情報を設計者が有していないために,情報を削減することができない場合がある.そのような場合には,最適化問題においては複数の目的が存在する問題となり次のように定式化される²⁾.

$$\begin{cases} \min(\max) & f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (i = 1, 2, \dots, k) \\ \text{subject to} & g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0 \quad (j = 1, 2, \dots, m) \end{cases} \quad (3.4)$$

この最適化問題においては,存在する目的関数どうしが互いに競合しあう,トレードオフの関係にある場合,すべての目的関数において最良の値をもつ一意の解を求めることはできない.そのため,多目的最適化では「ある目的関数の値を改善するためには,少なくともほかの一つの目的関数の値を改悪せざるを得ないような解」をパレート最適解(Pareto optimal solution)と呼ぶ²⁾.パレート最適解は,解の優越関係により定義される.全ての目的の最小化を行う最適化問題である場合のとき,二つの解 $x^1, x^2 \in \mathfrak{S}$ に対してすべての $k = 1, 2, \dots, m$ において $f(x^1) \leq f(x^2)$ のとき, x^1 は x^2 に優越するという.もし, x^1 が x^2 に優越しているならば, x^1 は x^2 よりも良好な解である. x^0 に優越する $x \in \mathfrak{S}$ が存在しないとき, x^0 をパレート最適解(Pareto-optimal solution)という.複数の目的関数がトレードオフの関係にある場合には,このパレート最適解が複数存在し,それらの集合をパレート最適解集合と呼ぶ.パレート最適解集合を求めることができれば,設計者はこれらの情報を基に目的関数や制約条件の関係の情報を得ることが可能となり,そこから必要機能の独立性と情報量の最小化を行うことでより良い設計を行うことが可能となる.そのため,多目的最適化問題においては,パレート最適解集合を求めることが一つの目標となる.

3-5-2 多目的遺伝的アルゴリズム

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) は生物の遺伝と進化を模擬した最適化手法の一つである。探索点は個体と呼ばれ、複数の個体の情報交換を行うことで効率の良い大域探索を行うことが可能な、多点型の確率探索手法である。先に述べたように、多目的最適化問題においては、パレート最適解集合を求めることが一つの目標である。パレート最適解集合は多点から構成されるため、多点探索手法が有利である。その理由は一度の探索試行でパレート最適解集合を求めることが可能であることによる。更に、多点が協調することで探索途中の解の多様性を維持し、目的関数が複数の峰を有するような多峰性の関数に対しても、効率良く探索を行うことができる。そのため、近年、パレート最適解集合を効率良く求めるための遺伝的アルゴリズムをはじめとする進化計算手法の開発が活発に行われている。本節で開発された順に従って解説を行う。

(1) 第 0 世代

単一目的の最適化問題を効率良く解く手法は数多く提案されている。そのため、多目的最適化問題を単一目的最適化問題に変換し、単一目的の最適化手法によりパレート解集合を求めることが可能である。最も単純な手法はそれぞれの目的関数に重み付けを行い単一目的化する方法である。重み付けを変化させることでパレート解集合を得ることができる。また、目標点を設定し、その点に最も近い解を求め、その解をもとに次の目標点を設定することでパレート解集合を得る方法も有力である。しかしながら、問題によっては単純な重み付けでは論理的に求まらないパレート解集合が存在することや、多数のパレート解を求めるためには、非常に多くの試行を必要とすることなどが問題点として挙げられる。

(2) 第 1 世代

多目的最適化において GA を適用させた初期の研究が Schaffer らのベクトル評価遺伝的アルゴリズム (Vector Evaluated Genetic Algorithm: VEGA)³⁾ である。VEGA では、母集団を目的関数の数に等しいサブ母集団に分割し、サブ母集団ごと独立に各個体に適合度割当てを行い、選択し、新たなサブ母集団を生成する。そして、生成されたサブ母集団をすべて合わせて一つの母集団としたものに対して、交叉と突然変異を行う。

パレート解集合を求める際には、1) できるだけ真のパレート解集合に近いこと (高精度)、2) できるだけ広い領域でパレート解集合が存在すること、3) できるだけ均等にパレート解集合が存在することが求められる。VEGA ではそのアルゴリズムの特徴として、高速な真のパレート解集合への接近や均等な解を求めることが困難であった。

(3) 第 2 世代

VEGA は解の優越関係を利用しない手法であった。それに対して、Fonseca らは解の優越関係を探索に積極的に利用した MOGA (Multi-Objective Genetic Algorithm) を提案した⁴⁾。ここで重要なのが解の適合度値をランキングによって決定することである。ランキングでは、より真のパレート解集合に近い解に小さな値が与えられる。

図 3-4 は主な多目的遺伝的アルゴリズムにおけるランキングを示している。このようなパレートのアプローチの出現により、高速に真のパレート解を求めることが可能となった。

(4) 第 3 世代

更に多目的遺伝的アルゴリズムを進化させたのが Deb らの NSGA-II (Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm II)⁵⁾ や Zitzler らの SPEA2 (Strength Pareto

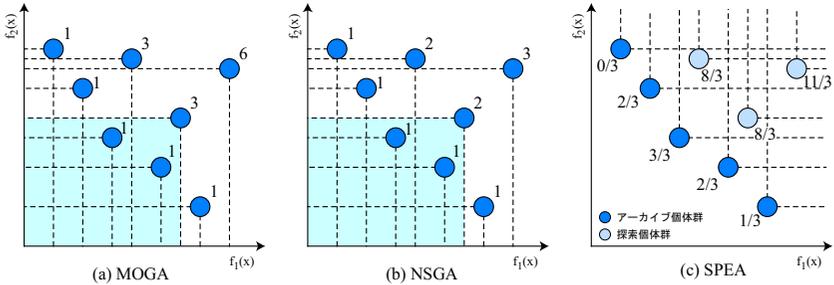


図 3-4 ランキング法

Evolutionary Algorithm⁶⁾ Knowles らの PAES (Pareto Archived Evolution Strategy)⁷⁾ である。これらのアルゴリズムでは、新しいランキング手法も提案されているが、最も重要なのは探索途中で得られた非劣解を明示的に探索に反映させるエリート主義多目的進化的アルゴリズム (Elitist Multi-Objective Evolutionary Algorithm) である。探索途中で得られる優越解を優先的に保存するために、遺伝的操作が行われる個体集合とは別にアーカイブ集合が用意される。単一目的の GA で操作される選択は、アーカイブ集合が更新される際とアーカイブ集合から個体集合が生成される際に行われる。この選択の際には、ランキングのほかに NSGA-II では混雑距離が、SPEA2 では端切り法が利用され、より均等に解が得られるメカニズムが実現されている。NSGA-II や SPEA2 の出現により多目的遺伝的アルゴリズムは飛躍的に進化した。

(5) 第 4 世代

NSGA-II や SPEA2 により非常に高速に精度の良いパレート解集合が探索することが可能となった。得られた解集合は、どれだけ真のパレート解に接近しているか、どれだけ幅の広さが得られているか、どれだけ多様性が維持されるかが吟味され、それらを評価する指標も提案されている。これらの指標を陽に利用することでより理想とする解集合を得ようとする多目的遺伝的アルゴリズムを第 4 世代と呼ぶことができる。IBEA (Indicator-Based Selection in Multiobjective Search)⁸⁾ や SMS-EMOA⁹⁾ は指標の一つである Hiper Volume Index を利用する手法である。

更に、ほかの進化的計算手法を積極的に多目的最適化に適用することも行われるようになってきた。AbYSS¹⁰⁾ は scatter search method を、OMOPSO¹¹⁾ は PSO を、MOCeII¹²⁾ は Cellular GA をそれぞれ適用している。

3-5-3 その他の周辺の話題

本節では、多目的遺伝的アルゴリズムのアルゴリズムの変遷を中心に述べた。これ以外にも関連する話題は非常に豊富である。

より精度の良い解を得るためには、近傍を丹念に求めるメカニズムが必要である。このため、多目的遺伝的アルゴリズムとローカルサーチを併用する研究が数多く行われている^{13, 14)}。

これまでに、精度向上のメカニズムや均等に配置するアルゴリズムは提案されてきたが、できるだけ広い領域での解を求めるアルゴリズムはほとんど見られなかった。これらに対応するアルゴリズムの開発も近年行われている¹⁵⁾。

実問題においては、目的関数の数が非常に多い場合が想定される。しかしながら、これまでの手法は目的数が 2 もしくは 3 の場合がほとんどであった。これに対して、目的関数の数が非常に多くなると従来の手法の適用は難しいことが明らかになり、これに対する解決策の提案が行われている^{16, 17, 18, 19, 20)}。

先に述べたとおり、パレート解集合に求められる性質はそれ自体が多目的である。そのため、適切な解の評価方法が重要である^{21, 22, 23)}。また、それらを検討するテスト関数の設定も複数の性質を検討するため非常に難しい問題である^{24, 25)}。その他、多目的遺伝的アルゴリズムの並列化²⁶⁾、ほかの進化計算手法の多目的最適化問題への適用^{27, 28)}、インタラクティブ GA の多目的化^{29, 30)}なども重要な問題である。

パレート解集合が得られた後にどのように設計者が目的の関係情報を得たり、一つの解を決定するかは重要な問題であり、今後の課題である。そこで必要となるのは、得られた解集合をどのように提示するかの問題であろう。特に、目的関数や設計変数が 3 次元以上になった際に、設計者やユーザが理解できるように提示することは今後の重要な問題の一つである。

参考文献

- 1) Nam P. Suh, “設計の原理 創造的機械設計論,” 朝倉書店, 1992.
- 2) 坂和正敏, “離散システムの最適化,” 森北出版, 2000.
- 3) J.D. Schaffer, “Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms,” In Proceedings of 1st International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications, pp.93-100, 1985.
- 4) Carlos M. Fonseca and Peter J. Fleming, “Genetic Algorithms for Multiobjective Optimization: Formulation, Discussion and Generalization,” In Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms (ICGA '93), pp.416-423, 1993.
- 5) K. Deb, S. Agrawal, A. Pratab, and T. Meyarivan, “A Fast Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization: NSGA-II,” In IEEE Transaction on Evolutionary Computation, vol.6, no.2, pp.182-197, 2002.
- 6) E. Zitzler, M. Laumanns, and L. Thiele, “SPEA2: Improving the Performance of the Strength Pareto Evolutionary Algorithm,” In EUROGEN 2001, pp.95-100, 2002.
- 7) J.D. Knowles and D.W. Corne, “The Pareto Archived Evolution Strategy: A New Baseline Algorithm for Multiobjective Optimization,” In Congress on Evolutionary Computation (CEC 99), pp.98-105, 1999.
- 8) E. Zitzler and S. Kunzli, “Indicator-Based Selection in Multiobjective Search,” In Parallel Problem Solving from Nature - PPSN VIII, vol.3242/2004, pp.832-842, 2004.
- 9) N. Beume, B. Naujoks, and M. Emmerich, “SMS-EMOA: Multiobjective selection based on dominated hypervolume,” In European Journal of Operational Research, vol.181, no.3, pp.1653-1669, 2007.
- 10) A.J. Nebro, F. Luna, E. Alba, A. Beham, and B. Dorronsoro, “AbYSS: Adapting Scatter Search for Multiobjective Optimization,” In IEEE Transactions on Evolutionary Computation, to appear, 2008.

- 11) M reyes Sierra and C.A. Coello Coello, "Improving PSO-based Multi-Objective Optimization using Crowding, Mutation and E-Dominance," In EMO 2005, LNCS 3410, pp.505-519, 2005.
- 12) A.J. Nebro, J.J. Durillo, F. Luna, B. Dorronsoro, and E. Alba, "A Cellular Genetic Algorithm for Multiobjective Optimization," In Nature Inspired Cooperative Strategies for Optimization (NICso 2006) , pp.25-36, 2006.
- 13) Ken Harada, Kokoro Ikeda and Shigenobu Kobayashi, "Hybridizing of Genetic Algorithm and Local Search in Multiobjective Function Optimization: Recommendation of GA then LS," In Proceedings of 2006 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO'2006) , vol.1, pp.667-674, 2006.
- 14) Hisao Ishibuchi and Kaname Narukawa, "Some Issues on the Implementation of Local Search in Evolutionary Multiobjective Optimization," In Proceedings of 2004 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO'2004) , pp.1246-1258, 2004.
- 15) Tomoyuki Hiroyasu, Masashi Nishioka, Mitunori Miki and Hisatake Yokouchi, "Discussion of Search Strategy for Multi-objective Genetic Algorithm with Consideration of Accuracy and Broadness of Pareto Optimal Solutions," In Proceedings of the 7th International Conference on Simulated Evolution And Learning(SEAL'08) , 2008. (掲載予定)
- 16) Deb, K. and Saxena, D, "On Finding Pareto-Optimal Solutions Through Dimensionality Reduction for Certain Large-Dimensional Multi-Objective Optimization Problems," In KanGAL Report No.2005011, 2005.
- 17) Dimo Brockhoff and Eckart Zitzler, "Are All Objectives Necessary? On Dimensionality Reduction in Evolutionary Multiobjective Optimization," In Proceedings of 9th International Conference on Parallel Problem Solving from Nature (PPSN IX) , pp.533-542, 2006.
- 18) Peter Fleming, Robin C. Purshouse and Robert J. Lygoe, "Many-Objective Optimization: An Engineering Design Perspective," In Proceedings of Third International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization (EMO 2005) , pp.14-32, 2005.
- 19) Tobias Wagner, Nicola Beume and Boris Naujoks, "Pareto-, Aggregation-, and Indicator-Based Methods in Many-Objective Optimization," In Proceedings of 4th International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization(EMO 2007) , pp.742-756, 2007.
- 20) David Corne and Joshua Knowles, "Techniques for Highly Multiobjective Optimisation: Some Nondominated Points are Better than Others," In Proceedings of 2007 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2007) , vol.1, pp.773-780, 2007.
- 21) Joshua Knowles, Lothar Thiele and Eckart Zitzler, "A Tutorial on the Performance Assessment of Stochastic Multiobjective Optimizers," In Technical Report No.214, Computer Engineering and Networks Laboratory (TIK), ETH Zurich, Switzerland, 2006.
- 22) Carlos M. Fonseca and Peter J. Fleming, "On the Performance Assessment and Comparison of Stochastic Multiobjective Optimizers," In Proceedings of 4th International Conference on Parallel Problem Solving from Nature (PPSN IV) , pp.584-593, 1996.
- 23) Tatsuya Okabe, Yaochu Jin and Bernhard Sendhoff, "A Critical Survey of Performance Indices for Multi-Objective Optimization," In Proceedings of the 2003

- Congress on Evolutionary Computation (CEC'2003), vol.1, pp.878-885, 2003.
- 24) Kalyanmoy Deb, Lothar Thiele, Marco Laumanns and Eckart Zitzler, "Scalable Test Problems for Evolutionary Multi-Objective Optimization," In TIK-Report No.112, Computer Engineering and Networks Laboratory (TIK), Swiss Federal Institute of Technology (ETH) Zurich, 2001.
 - 25) Simon Huband, Phil Hingston, Luigi Barone and Lyndon While, "A Review of Multiobjective Test Problems and a Scalable Test Problem Toolkit," 2006 IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol.10, no.5, pp.477-506, Oct. 2006.
 - 26) 吉井健吾, 廣安知之, 三木光範, "ヘテロ計算環境を想定した多目的遺伝的アルゴリズムの並列モデルの提案およびその検討," 情報処理学会論文誌 数理モデル化と応用 (TOM), vol.48, no.SIG15, pp.103-117, 2007.
 - 27) Carlos A. Coello Coello and Maximino Salazar Lechuga, "MOPSO: A Proposal for Multiple Objective Particle Swarm Optimization," In Proceedings of Congress on Evolutionary Computation (CEC'2002), vol.2, pp.1051-1056, 2002.
 - 28) Margarita Reyes-Sierra and Carlos A. Coello Coello, "Multi-Objective Particle Swarm Optimizers: A Survey of the State-of-the-Art," International Journal of Computational Intelligence Research, vol.2, no.3, pp.287-308, 2006.
 - 29) Hajime Kita, Mitsuhiro Shibuya and Shigenobu Kobayashi, "Integration of multi-objective and interactive genetic algorithms and its application to animation design," In Proceedings of IEEE Systems, Man, and Cybernetics, vol.3, pp.646-651, 1999.
 - 30) Kaisa Miettinen, "Using Interactive Multiobjective Optimization in Continuous Casting of Steel," Materials and Manufacturing Processes, vol.22, no.5, pp.585-593, 2007.