4G3-GS-2I-04

組合せ最適化におけるベイジアン最適化アルゴリズムを組み込んだ遺伝的アルゴリズムの提案

Genetic Algorithm using Bayesian Optimization Algorithm for Combinatorial Optimization

平沼 智之 *1 Tomoyuki Hiranuma
安田 翔也 *1 Shoya Yasuda
藤堂 健世 *1 Kense Todo
谷口 茉帆 *1 Maho Taniguchi
山村 雅幸 *1 Masayuki Yamamura

*1東京工業大学情報理工学院
School of Computing, Tokyo Institute of Technology

In genetic algorithm(GA), it is considered important to conserve the distribution of the population by designing a crossover which inherits the good parental feature and a generation alternation model which maintains the diversity of population. However, there are no general GAs which used in combinatorial optimization problems, even though it can be used in functional optimization problems by preserving statistics. In this study, we propose a new framework of GA using bayesian networks inspired by Bayesian Optimization Algorithm(BOA). The results show that the proposed method can be expected to be a general algorithm in combinatorial optimization problems.

1. はじめに

遺伝的アルゴリズム (GA: Genetic Algorithm) は，生物進化 (交叉，選択淘汰，突然変異) の原理に着想を得て Holland らによって提唱された適応，最適化，学習の手法である．GA の研究では「親の良い形質を継承する」,「集団分布の多様性を維持する」という 2 つの要件を満足する GA を設計することが，よりより探索に必須であると考えられている．これらは，集団の分布を保存するということを意味している．また，GA では「親の良い形質を継承する」遺伝子演算が交叉,「分布の多様性を維持する」遺伝子演算が世代交代モデルに対応していると考えられている [喜多 99].

GA の適用例として，実数値の関数最適化問題や巡回セールスマン問題に代表される組合せ最適化問題がある．関数最適化問題などの実数値空間における探索では集団分布を保存するために平均ベクトル・分散共分散行列などの統計量を保存することで発展してきた．一方で，組合せ最適化においては関数最適化問題における統計量のような共通の指標が見つかっておらず，探索対象の問題クラス固有の知識を組み込んだ GA を問題ごとに設計する必要がある．そのため，探索以前に対象とする問題構造を学び，それを GA の設計に組み込む必要があるという課題がある．

また，GA における集団を確率モデルとし，確率分布を推定することで探索を行う進化計算の枠組みとして分布推定アルゴリズム (EDAs: Estimation of Distibution Algorithms) がある [Martiins 18, Doerr 20]．これにより，遺伝的アルゴリズムの集団を確率モデルに置き換えることで集団分布を確率分布として保存することが可能となった．EDAs の枠組みにおける確率モデルにベイジアンネットワーク (BN: Bayesian Network) を利用した手法にベイジアン最適化アルゴリズム (BOA: Bayesian Optimization Algorithm) がある．BOA では，観測した集団から変数間の因果関係を推論したネットワークを構築することが可能なため，問題構造を推定することが可能である．問題構造が推論できるために組合せ最適化における GA の問題点を改善できると期待できる．BOA 内の BN は学習に用いる個体群の分布の重なりに応じて適当なオーダのビルディングブロック (BB: Building-Block) が保存される．しかし，BOA では上位集団によってネットワークを構築するため，上位集団の BB が保存されてしまい多様性が急激に失われてしまう．さらに，BB が保存されてしまうために良い形質を持った親付近の探索が困難なことから探索が不十分となってしまう．

そこで本稿では，BOA における上位集団のみを用いることによる多様性の急激な減少をルーレット選択により緩和し，交叉により BB を破壊し親の良い形質の近くの探索を行う．そうすることで問題クラスに依存しない新たな GA を提案し、変数間依存性の強い騙し問題である 3-deceptive 問題に対して BOA と比較して効果を検証する．

連絡先: 平沼智之，東京工業大学情報理工学院，神奈川県横浜市緑区長津田町 4259 J2 棟 1710 室，hiranuma.t.aa[at]m.titech.ac.jp

2. BOA(Bayesian Optimization Algorithm)

BOA は分布推定アルゴリズムの一種で，EDAs の確率モデルに BN を用いた最適化アルゴリズムである [Pelikan 99]. EDAs は確率分布によって進化計算における解情報を表現する．解集合である個体群の選択を行い、生存した良い個体の情報を確率分布で表現することで有望な個体が生成される確率を増加させていき，最適解の探索を目指す [堀 12].

2.1 ベイジアンネットワークの構築

BN は各独立変数をノードで表し，①全ノードの依存関係を示す非循環有向グラフ，②子ノードでの局所的な依存関係を定量的に表した条件付き確率の二つで定義される確率モデルである．BN の構築には 2 つの要素が必要である．

1. 評価指標
2. 探索方法

評価指標は探索しているネットワークに対する評価値であり，この数値が高いネットワークほど良いネットワークと定義できる．本稿では，評価指標に K2metric，探索方法に貪欲法を用いた K2 アルゴリズム [Cooper 92] を採用している．構築されたネットワークを B とすると，K2 metric は式 (1) により与

えられる．

$$p(B) = \prod_{i=0}^{n-1} \prod_{\pi_{X_i}} \frac{m'(\pi_{X_i})!}{(m'(\pi_{X_i}) + m(\pi_{X_i}))!} \cdot \prod_{X_i} \frac{(m'(X_i, \pi_{X_i}) + m(X_i, \pi_{X_i}))!}{m'(X_i, \pi_{X_i})} \quad (1)$$

式 (1) において，m と m' はネットワークが構築されたと仮定したときのネットワークに適合するサンプル数を表す．ただし，K2 metric では $m'(X_i, \pi_{X_i}) = 1$ として扱う．

2.2 アルゴリズム

BOA のアルゴリズムは以下である．

1. 初期集団 P_t の生成．$t = 0$ とする
2. 上位個体群の選択 $P_{selected}$
3. 個体群 $P_{selected}$ から K2 アルゴリズムによりベイジアンネットワーク B_t の構築
   - 3.1 遺伝子数の大きさをノード数とするエッジが空の BN を構築
   - 3.2 全てのノード間の K2 スコアを計算し，最もスコアの高いノード間をエッジで結ぶ
   - 3.3 3.2 をスコアが改善しなくなるまで繰り返す
   - 3.4 B_t が構築したら，最尤推定法に従い条件付き確率表を構築する
4. 構築した BN から個体群 $P_{candidate}$ を生成し，P_t の下位評価値個体群と入れ替えることで P_{t+1} とする
5. 終了条件を満たしていれば終了，していなければ 2 へ

このように，BOA は交叉によらない遺伝的処理のため，選択された個体群の分布の重なりに応じて適当なオーダまで BB が複製され，非常に効率的に成長し極めて高い収束性を示す [倉橋 03]．BOA では BN が新しい解候補を生成するための確率分布として使われる．

BOA はまずランダムに初期集団を生成し，評価をする．評価値の高い個体群を選択し生存させる．選択された個体群を用いて K2 アルゴリズムにより BN を構築し，条件付き確率表（CPT: Conditional Probability Table）を計算する．構築された BN は確率分布となっているため，この確率分布に従って新たな個体群を生成する．生成された個体群と選択された個体群を合わせることで新たな集団ができあがり，個体の評価に戻る．これを繰り返すことで最適解を探索する．

3. 提案手法

前章では BOA のアルゴリズムの流れを説明した．本章では，BOA から着想を得て確率分布を更新する新たな GA のアルゴリズムを提案する．提案するアルゴリズムは以下である．

1. エッジが空のベイジアンネットワーク B_t を構築．世代数 $t = 0$
2. B_t から集団 P_t を生成
3. 集団 P_t 内で交叉を行い，家族集団 L_t を生成
4. 家族集団 L_t から BN 再構築用にルーレット選択により S_t を選択する．最上位個体群 O_t は次世代集団に残る．
5. 次世代 BN を K2 アルゴリズムにより再構築 B_{t+1}
6. 最上位個体群を含み，次世代集団 P_{t+1} を生成する
7. 集団内に最適解があれば終了．なければ 3 へ

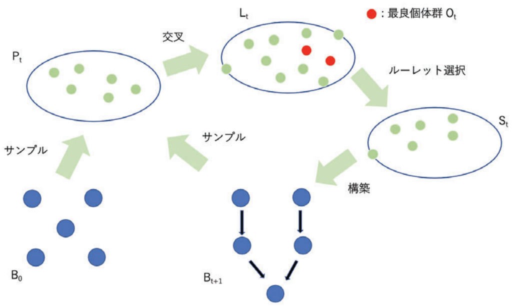

図 1: 提案手法

提案手法では，ネットワークを主たる分布として探索を行う．まず空のネットワーク B_t を構築する．世代数 $t = 0$ とする．このとき各ノードの確率分布は一様分布に従う．次に集団 P_t を B_t から生成する．P_t 内で非復元抽出により親を 2 個体選び 1 点交叉を行う．これを集団サイズの 2 倍になるまで行う．生成された集団を L_t とする．L_t からルーレット選択により BN 構築のための集団を選択し，B_{t+1} を構築する．BN の構築は BOA 同様に K2 アルゴリズムに従う．構築された B_{t+1} から集団 P_{t+1} を生成する．このとき L_t の上位評価値個体群を P_{t+1} 内のランダムに選ばれた個体と入れ替える．

4. 実験

4.1 3-Deceptive 問題

3-Deceptive 問題とは変数間依存性のある騙し景観をもつベンチマーク問題であり，全てのビット列が強く 0 に引っ張られるという難しさがある．3-Deceptive 問題は N を問題の次元数として以下で定義される．

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x} &= \{0,1\}^N \\
f(\boldsymbol{x}) &= \sum_{i=1}^{\lceil \frac{N}{3} \rceil} g(c_{3i-2}, c_{3i-1}, c_{3i}) \\
g(c_1, c_2, c_3) &= \begin{cases} 0.9 & (c_1 + c_2 + c_3 = 0) \\ 0.8 & (c_1 + c_2 + c_3 = 1) \\ 0.0 & (c_1 + c_2 + c_3 = 2) \\ 1.0 & (c_1 + c_2 + c_3 = 3) \end{cases}
\end{aligned}$$

4.2 実験条件

本稿では BOA と提案手法について 3-Deceptive 問題を対象に解き，提案手法の性能と BOA の性能の比較検討を行う．まず，3-Deceptive 問題の設定として，問題の次元数を 15, 18, 21, 24, 27, 30 と設定する．各手法の集団サイズは試行回数 10 回に対して成功回数が 9 回以上の最小集団サイズとし，刻み幅 100 として探索を行なった．また、集団サイズの最小値は 100 とした．

表 1: BOA と提案手法の比較

	提案手法			BOA		
次元	成功/試行	集団サイズ	平均評価回数(±S.D.)	成功/試行	集団サイズ	平均評価回数(±S.D.)
N=15	10/10	100	1020(±278.56)	10/10	100	860(±459.78)
N=18	10/10	200	4420(±1247.23)	10/10	300	2955(±541.04)
N=21	10/10	300	7333(±2280.83)	10/10	300	5940(±2653.09)
N=24	9/10	500	14888(±4563.00)	10/10	500	18550(±8804.68)
N=27	9/10	700	27300(±5036.97)	9/10	1100	47055(±18642.59)
N=30	10/10	800	21360(±5222.10)	9/10	1400	214511(±130190.42)

4.3 結果と考察

各次元に対する成功回数および集団サイズと評価回数の比較実験の結果を表 1 に，表 1 の各結果をプロットした結果が図 2 および図 3 である．

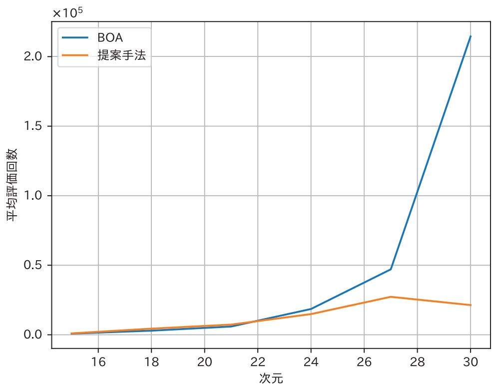

図 2: 次元数に対する平均評価回数の比較

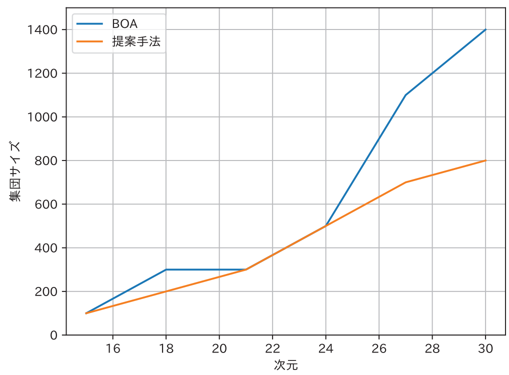

図 3: 次元数に対する集団サイズの比較

表 1 より BOA および提案手法において共に問題の次元の増加に伴い，集団サイズと平均評価回数が増加していることがわかる．図 2 より，次元数の増加に伴い BOA では平均評価回数が指数関数的に増加しているのに対し，提案手法ではほぼなだらかに増加していることがわかる．また，図 3 から提案手法の集団サイズは BOA より小さいサイズで探索が成功していることがわかる．このことから，提案手法は BOA と同等以上の探索能力があると考えられ，新たな探索法として期待できる．

また，平均評価回数に対する標準偏差を探索成功の散らばり度合いとして散らばり具合のグラフを図 4 に示す．

図 4 より，提案手法の方が BOA よりも探索成功時の評価回数の散らばりが低いことから安定して探索が成功していることがわかる．これにより，安定性の観点からも提案手法は有効であると期待できる．

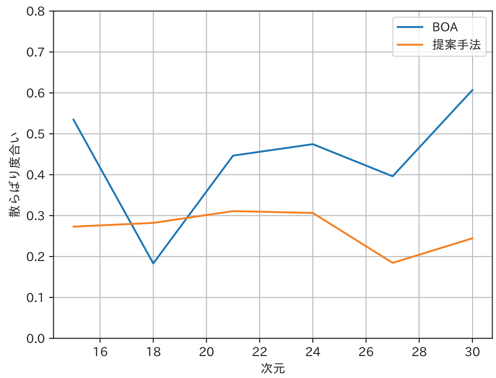

図 4: 散らばり度合いの比較

5. まとめと今後の展望

本稿では，既存の BOA に対して交叉入れることで BN で構築したビルディングブロックを壊し，良い形質を持った親付近の探索を行う交叉とルーレット選択から選ばれた個体に対して BN を再構築することで集団分布の多様性を維持できるようなベイジアンネットワークを使った GA を提案した．そして，変数間依存関係のある問題に対して最も有効なアルゴリズムの一種である BOA と比較をすることで提案手法の有効性について示した．本稿は変数間依存性のある問題に対してのみ検証を行なったため，組合せ最適化問題において幅広く有効かという課題が残る．また，本稿の実験において問題クラスの次元が既存研究より低いため高次元の場合に有効であるかの検証の必要があると考えられる．

参考文献

[喜多 99] 喜多一, 山村雅幸: 機能分担仮設に基づく GA の設計指針, 計測と制御, Vol. 38, No. 10, pp. 612-617(1999).

[Pelikan 99] Pelikan, M., Goldberg, D. E. and Cantu-Paz, E.:BOA: The Bayesian Optimization Algorithm, Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference GECCO-99, pp.525-532 (1999)

[Cooper 92] Gregory F. Cooper, Edward Herskvits: A Bayesian Method for Induction of Probabilistic Networks from Data, Kluwer Academic Publishers, Machine Learning, No.9, pp.309-347 (1992)

[倉橋 03] 倉橋節也，勝又勇治，寺野隆雄:ベイジアン最適化手法と分布推定アルゴリズムの動向，人工知能学会誌，Vol.18，No.5，pp.487-494(2003)

[堀 12] 堀伸哉，棟朝雅晴，赤間清:混合ベイジアンネットワークを導入した分布推定アルゴリズム，進化計算学会論文誌，Vol.3，No.2，pp.63-72(2012)

[Martiins 18] M. S. R. Martins, M. E. Yafrani, R. Santana, M. Delgado, R. Luders and B. Ahiod, "On the Performance of Multi-Objective Estimation of Distribution Algorithms for Combinatorial Problems," 2018 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC), Rio de Janeiro, pp.1-8(2018)

[Doerr 20] Benjamin Doerr, Martin S. Krejca: Bivariate Estimation-of-Distribution Algorithms Can Find an Exponential Number of Optima, GECCO-20, pp.796-804(2020)