

# 修士研究＋論文紹介

## 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

川口 晏璃 (Anri Kawaguchi)  
u255010@st.pu-toyama.ac.jp

富山県立大学 大学院 電子・情報工学専攻 情報基盤工学部門

July 21, 2023

## 背景

組合せ最適化問題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遺伝的アルゴリズム（Genetic Algorithm：GA）を問題ごとに設計する必要がある．

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（Estimation of Distribution Algorithms：EDAs）がある．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が可能となった．

## 目的

ベジアン最適化アルゴリズム（Bayesian Optimization Algorithm：BOA）を用いて問題構造を推定することで，問題クラスに依存しないGAを提案する．

BOA は EDAs の確率モデルにベイジアンネットワーク (Bayesian Network: BN) を用いた最適化アルゴリズムである。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。解集合の個体群の選択, いい個体の情報を確率分布で表現することでよい個体が生成される確率を増加させていき, 探索を目指す。

## 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, 以下 2 つで定義される確率モデルである。

- 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

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。評価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。評価指標に K2metric, 探索方法に貪欲法を用いた K2 アルゴリズムを採用。

構築されたネットワークを  $B$  とすると, K2metric 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, K2metric では  $m'(X_i, \pi x_i) = 1$  として扱う.

- 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

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. 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.

- 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

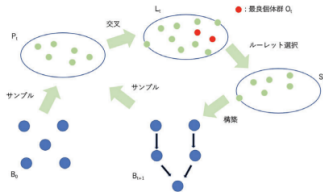


図 1: 提案手法

## 3-Deceptive 問題

7/12

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。

$$\mathbf{x} = \{0, 1\}^N$$

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{\lceil \frac{3}{N} \rceil} g(c_{3i-2}, c_{3i-1}, c_{3i})$$

$$g(c_1, c_2, c_3) = \begin{cases} 0.9 & (c_1 + c_2 + c_3 = 0) \\ 0.8 & (c_1 + c_2 + c_3 = 1) \\ 0.0 & (c_1 + c_2 + c_3 = 2) \\ 1.0 & (c_1 + c_2 + c_3 = 3) \end{cases}$$

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，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 として探索を行った．集団サイズの最小値は 100 とした．



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と、各結果をプロットした結果を示す。

次元	提案手法			BOA		
	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)

図 2: BOA と提案手法の比較

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。

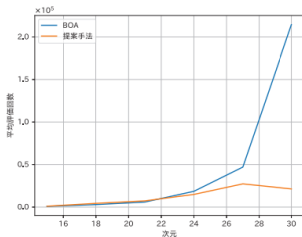


図 3: 次元数に対する平均評価回数

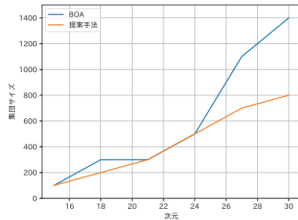


図 4: 次元数に対する集団サイズの比較

図 3 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．提案手法ではほぼなだらかに増加している．また，図 4 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る．

## まとめ

良い形質をも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ズアンネットワークを使った GA を提案した.

## 今後の課題

変数間依存性のある問題に対してのみ検証を行ったため, 組合せ最適化問題において幅広く有効なのか課題が残る. また, 高次元の場合に有効であるかの検証が必要である.

## 現状

python ライブラリ qiskit で量子の重ね合わせや回転ができる．それを使って実装を試み中．