

称号及び氏名	博士（工学） 長谷川 拓
学位授与の日付	平成 30 年 3 月 31 日
論文名	「進化型計算を用いた汎用的最適化フレームワークに関する研究」
論文審査委員	主査 松本 啓之亮 副査 吉岡 理文 副査 中島 智晴 副査 森 直樹

## 論文要旨

近年、スーパーコンピュータの運用やクラスタ技術の発展を含め計算機の飛躍的な性能向上とともに、実世界での複雑な問題に対する最適化の需要はますます高まっている。このような実世界での最適化問題において、計算機による効率的な解法を実現するためには、大規模なシミュレーションやモデル構築が必要となり、その上で、これらを解くためのロバストな最適化手法が必要とされている。また、モデリングによってその最適化問題の設計変数は離散値、実数値またはこれらの混合など多様な表現をとりうるため、問題構造やモデリングの結果に影響されにくい汎用的な最適化手法が必須となる。

こういった需要と計算機性能の向上に伴い、近年の計算機性能の向上に伴い、生物の進化から着想を得た確率的探索手法である進化型計算（Evolutionary Computation: EC）が注目されている。進化型計算はその汎用性の高さから科学や工学の様々な分野で用いられており、さらに芸術デザインや音楽など感性に関する分野にも応用されている。進化型計算は一般的に、目的関数の微分可能性などの前提条件を必要とせず、解の最適性は保証しないが準最適解を得るために解空間全体を大域的に探索する能力に優れた手法である。また進化型計算に分類される手法としては、組合せ最適化や関数最適化を対象とするものだけではなく、解を木構造やグラフ構造で表現する必要がある問題を対象とする手法など様々なものが提案されており、柔軟に実問題への適用が可能な最適化手法となっている。

進化型計算手法は、個体群として解を複数保持し確率的多点探索をすることにより大域的探索を実現するが、このため十分な解を得るまでに解の評価回数が膨大となる場合が多い、特に、実問題においては解の評価が容易ではないことが多いため、探索に膨大なコストがかかってしまうという問題が顕在化しやすい。また、進化型計算はその汎用性の高さの代償として、探索前にユーザが多くの変数パラメータを設定しなければならない。変数パラメータの設定が不十分な場合、対象とする問題に対し進化型計算手法が持つ探索能力を十分に発揮できない可能性がある。

進化型計算は遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) や進化戦略 (Evolution Strategy: ES) をはじめとして様々な手法が提案されており、その多くは遺伝子が固定長であり、遺伝子型も整数値または実数値で構成される。このように探索空間を制限することにより効率の良い探索を実現している。一方で、より複雑な表現を必要とする問題に対して、これらの手法は拡張が困難であり、遺伝子表現を拡張した手法の開発は非常に重要である。これを実現した手法の1つとして遺伝的プログラミング (Genetic Programming: GP) がある。GP は木構造で解を表現するため、可変長で複雑な型を遺伝子で実現することができ、幅広い分野での応用が期待されている。しかしながら、その表現能力の高さ故に解空間が非常に大きくなるため、bloat などの問題を引き起こし、探索が非常に困難になることが多い。そのため、広い解空間を効率良く探索する必要があり、積み木仮説に基づく部分構造を有する問題を対象とする場合、良質な部分解の保護と部分解の効率の良い組合せの実現が不可欠である。しかしながら従来の GP ではこの点が十分には考察されていない。

以上の点を背景として、本論文では汎用的最適化フレームワークの実現に向けて、進化型計算の3つの問題点を解決する手法を提案することを目的とする。

まず解の評価にコストがかかる問題に対して、評価回数を減らしつつ効率的に探索することを目指し、解の優劣を機械学習手法を用いて学習する手法、および、その学習器の推定結果を用いて探索を進める手法を提案する。探索中の総適応度評価回数最適解発見回数に着目し、提案手法が従来手法に比べて効率的な解の探索を実現していることを示す。

次に、「Exploration Exploitation Trade-off (EE trade-off)」と呼ばれるヒューリスティックな手法において最も重要視される問題の1つについて、これを解決するための進化型計算の設計指針を示すことを目指す。解の近傍情報に着目した問題構造の複雑さの指標及びこれを用いた探索の制御手法を提案する。探索中の総適応度評価回数に着目し、部分評価関数の相加性を有する問題に対して提案手法が効率的な解の探索を実現していることを示す。

続いて、解の遺伝子表現として木構造を用いて探索をする GP に着目し、より効率的かつ設定が容易な GP の開発を目指す。局所探索と交文により解を探索しつつ、階層個体群構造を用いて部分解を保護する手法を提案する。探索中の総適応度評価回数最適解発見回数に着目し、Boolean 問題に対して提案手法が効率的な解の探索を実現していることを示す。

以下に本論文の構成を述べる。まず2章では解の評価にコストがかかる問題に対する、進化型計算の効率的な解の探索手法の開発に取り組んだ。進化型計算を実世界の問題に適用するには適応度評価回数の削減が非常に重要な課題であり、これを解

決するために、過去の探索の情報から適応度を予測し適応度評価回数を削減する様々な手法が提案されている。しかしながら、モデルの構築コストと推定精度のトレードオフの問題により、汎用的に用いることができる有用な手法は提案されていない。そこで、適応度予測を 2 個体間の優劣に限定することで、機械学習手法による効率的な適応度景観の推定が可能なモデルを提案した。また、このモデルを導入した進化型計算手法を提案した。ベンチマーク問題を用いた数値実験により従来手法に比べて探索性能が向上することを示した。加えて、探索中の学習器の再学習、探索中の各学習器を用いたアンサンブル学習、適応度関数を用いた実評価の方法に着目し、探索過程を解析することによりその重要性を示した。さらに、実数値問題へ適用するために、**Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES)** にこのモデルを導入した手法を提案し、複数のベンチマーク問題を用いて数値実験をすることによりその有用性を示した。さらに、実数値問題においては学習データのスケールリングが探索性能に大きな影響を及ぼすことを明らかにし、提案したスケールリング手法が有用であることを示した。

3章では、**EE trade-off**の問題解決のための設計指針を示すこと及びユーザの設定すべき可調整パラメータの数の削減に取り組んだ。**GA**に代表される進化型計算では多くの可調整パラメータを含んでおり、その調整が性能に大きく影響を与えることが知られている。そのため、**GA**における重要な研究課題の 1 つとして調整すべきパラメータの数を削減すること、または適切にパラメータの設定をするための理論を確立することがあげられる。これらを実現するため部分評価関数の相加性を有する問題に応用可能な、劣個体数分布と呼ばれる指標に基づく手法、**DII analysis**を提案した。**DII analysis**では個体の近傍の優劣を比較することにより、適応度関数の部分評価関数の複雑さを推定する。これにより、交文や局所探索によってどの程度適応度評価回数が必要であるかを評価することができる。さらに、この **DII analysis** が解析だけでなく、実際の進化型計算の探索においても有用であることを示すために、近年、注目している進化型計算の一つである **Parameter-less Population Pyramid (P3)** への **DII-analysis** の導入について検討した。**P3** はユーザが設定すべき可調整パラメータを持たず、階層型の個体群を保持することにより初期収束を起こさない探索を実現する一方で、問題に合わせた局所探索量と交文量の制御ができないという欠点がある。よって、初期収束を避けることに優れた **P3** の性質は維持したまま、問題の構造に応じた適応的な探索を実現するために、1 近傍の個体の優劣に着目した **DII analysis** を **P3** に導入した進化型計算として、**P3-DII** を提案した複数のベンチマークを用いた数値実験により最適解発見時の適応度評価回数に着目し、**P3-DII** が **P3** に比べ効率的な探索を実現していることを示し、**DII-analysis** 及び **P3-DII** の有用性を示した。さらに、探索中の局所探索と交文の効果を解析することにより従来の **P3** の問題点、及び **P3-DII** の利点について議論した。

4章では木構造を用いて探索をする遺伝的プログラミングについて、より効率的かつ設定が容易な手法の開発及び解析について取り組んだ。遺伝的プログラミングは、進化型計算の一つとして提案されており、グラフ構造、特に木構造を扱うことを目的として提案されてきた。**GP** は解の表現能力の高さから、様々な分野での応用が期待されている一方で、解決すべき問題はまだまだ多く存在している。その中でも、本研究では **GP** における重要な研究課題のうち「良質な部分解の保護と多様性の維持の実現」及び「可調整パラメータの数の削減、またはパラメータの設計指針の確立」に着目し取り組んだ。

進化型計算において、より効果的な探索を実現するためには、良質な部分解を保護し、これらの部分解の多様性を維持しつつ、効果的に組合せる手法の設計が重要である。GP の研究においても、部分解に着目した研究は数多くなされているが、部分解を明示的に保存し多様な解を効率よく組替える手法はまだ確立されていない。また可調整パラメータの問題は GP のみならず、進化型計算の分野全体における問題であり、少数の可調整パラメータでロバストな挙動を示す手法が必要とされている。これらを解決する手法として **Genetic Programming with Multi-Layered Population Structure (MLPS-GP)** を提案した。MLPS-GP は、演算子として局所探索と交文を用い、階層構造を持つ個体群によって 効率的な解の保持を実現した手法である。近年提案された、多層個体群により解を保持する手法 **Age-Layered Population Structure (ALPS)** を多目的最適化の枠組みにより効率的に解を探索するよう拡張した手法 **D/F** を用いて、数値実験で **Boolean** 問題に対して探索性能を比較することにより、MLPS-GP の有用性を示した。

最後に、5 章で本論文での結果について総括し、今後の課題を述べた。また、進化型計算を用いた汎用的最適化フレームワークの実現に向けて、本論文の成果と今後の目標について述べた。

## 審査結果の要旨

本論文は進化型計算を用いた汎用的最適化フレームワークの実現に向けて、進化型計算の 3 つの問題点を解決する手法を提案している。まず、解の評価にコストがかかる問題に対して、評価回数を減らしつつ効率的に探索する機械学習を用いた手法を提案する。次に、最も重要視される問題の 1 つである進化型計算の設計指針を示し、続いて、解の遺伝子表現として木構造を用いて、より効率的かつ設定が容易な遺伝的プログラミング手法を開発した。具体的なシステムの試作を通して得られた知見を考察しており、以下のような重要な研究成果を得ている。

- (1) 解の評価にコストがかかる問題に対して、評価回数を減らし効率的に探索する手法の実現を目指し、適応度予測を 2 個体間の優劣に限定することで、機械学習手法による効率的な適応度景観の推定が可能な **RSE model** を提案した。適応度を直接的に推定しない **RSE model** が高い有用性を持つことを明らかにした。
- (2) 問題構造の特徴を捉え、それに合わせて効率的に探索するため、部分評価関数の相加性を有する問題に応用可能な、劣個体数分布と呼ばれる指標に基づく手法、**P3-DII** を提案した。交叉と局所探索のバランスを取ることで定量的に制御できることを示し、サイズの大きな問題に対して強力な手法であることを明らかにした。また解の更新率を解析することで、探索をうまく制御し効率の良い探索が可能であることを確認した。
- (3) 遺伝的プログラミングにおいて、効率的に部分解を探索および活用することができ、設定が容易な手法である **MLPS-GP** を提案した。本手法は、**Boolean** 問題に対して有用であり、従来手法では解けなかった **even parity** 問題に対して高い確率で探索を成功させ、非常に強力な手法であることを明らかにした。さらに、問題サイズに合わせた設計指針を示した。

以上の研究成果は、知能情報工学分野における進化型計算システムの構築と汎用的最適化フレームワークの実現に貢献するところ大である。また、申請者が自立して研究活動を行う

に必要な能力と学識を有することを証したものである。学位論文審査委員会は、本論文の審査ならびに最終試験の結果から、申請者に博士(工学)の学位を授与することを適当と認める。