

令和 6 年 6 月 25 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K11967

研究課題名（和文）実世界スケール人工進化アルゴリズムの開発と実装

研究課題名（英文）Development and Implementation of Real World Scale Artificial Evolutionary Algorithms

研究代表者

棟朝 雅晴（Munetomo, Masaharu）

北海道大学・情報基盤センター・教授

研究者番号：00281783

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究においては、大規模大域的最適化問題を解決する人工進化アルゴリズムの実現を目指し、リンケージ同定や協調共進化などをもとに、スケーラブルなリンケージ同定手法、リンケージ測定関数やリンケージ尺度の最小化の導入、依存関係行列に基づく変数のグルーピング手法など、多岐に渡る研究開発を行なった。

さらに、適応度評価に要する計算コストが大きい問題に対応するため、代理モデルの構築メカニズムを有するハイパーヒューリスティクスに基づくアルゴリズム、生物・物理現象にヒント得たアルゴリズムについても開発し、それらを代表的なベンチマーク関数ならびにエンジニアリング最適化問題において検証を行い、その有効性を検証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、これまで研究代表者を中心に開発を進めてきたリンケージ同定や、進化計算の分野において近年活発に研究が進められている協調共進化の手法を発展させることで、大規模大域的最適化問題の効果的な解法を実現する。さらに評価関数自体の計算にコストを要する問題についても対応することで、解評価にシミュレーションを行うような設計最適化問題にも対応可能である。大規模かつ複雑な相互作用を有する大域的最適化問題を解決することは、現実社会に存在するさまざまな問題の解決に不可欠である。本研究で開発したアルゴリズムが、ベンチマーク問題だけでなくエンジニアリング最適化でも効果が得られており、今後の展開が期待される。

研究成果の概要（英文）：In this research, we seek for realizing artificial evolutionary algorithms to solve large-scale global optimization problems. Based on linkage identification techniques and cooperative coevolution algorithms, we conducted extensive research and development of evolutionary algorithms, including scalable linkage identification, introduction of linkage measurement functions and minimization of linkage measures, and variable grouping methods based on dependency matrices.

In addition, to address problems caused by high computational costs required for fitness evaluation, we developed hyper-heuristics algorithms construction surrogate models, and algorithms inspired by biological and physical phenomena. We verified their effectiveness in major benchmarking functions and engineering optimization problems.

研究分野：進化計算

キーワード：進化計算 リンケージ同定 協調共進化 ハイパーヒューリスティクス

1. 研究開始当初の背景

大規模大域的最適化問題 (Large-Scale Global Optimization Problem, LSGOP) を解決するため、大規模な問題を適切な規模の部分問題に分割することが必要である。そのための手法として、協調共進化 (Cooperative Co-evolution, CC) や、研究代表者を中心に開発を進めてきたリンケージ同定 (Linkage Identification, LI) などが提案されてきた。LI の代表的な手法である LINC (Linkage Identification by Non-linearity Check), LIEM (Linkage Identification with Epistasis Measures), LIMD (Linkage Identification with non-Monotonicity Detection) では、遺伝子座のペアごとに摂動を行い、それによる適応度の変化量が線型かどうか、単調かどうかをチェックすることで、それぞれの遺伝子座ペアの依存性を推定し、互いに依存関係を有する遺伝子座の集合である「リンケージ集合」を同定する。同定後、リンケージ集合ごとに部分問題へ分割し、交叉を制御することで、探索効率を劇的に向上させることが可能となる。さらに一般的な手法として「遺伝子解析」に基づくスケーラブルな進化計算アルゴリズムを開発することが、真の意味での人工進化を実現するために必要であり、人手による問題分割を必要とせず、大規模かつ複雑な最適化問題を一度に解決することが求められている。

2. 研究の目的

本研究においては、自然界における高等生物の進化と同程度の規模を想定した、大規模最適化問題を解決する人工進化アルゴリズムの実現を目指す。自然界において、人類などの高等生物では、コード化されている遺伝子数として数万程度、コード化されていない部分も含めた DNA 全体としては数億塩基となっている。そのような実世界スケールを前提とするような、汎用的な大域的最適化アルゴリズムとして、実世界スケール汎用人工進化アルゴリズムを開発する。

自然進化においては、ランダムな交叉や突然変異が遺伝的操作として適用されているが、人工進化アルゴリズムにおいては、遺伝子の解析ならびに機械学習を導入することで、その探索効率を大きく向上させることができる。これまで研究代表者を中心に開発を進めてきた LI や、進化計算の分野において近年活発に研究が進められている CC の手法を発展させるとともに、高度な遺伝子解析メカニズムを有するスケーラブルな人工進化アルゴリズムを実現する。

さらに、実問題の解決を想定し、解の評価に多くの計算コストを有する大規模問題 (Expensive Optimization Problem, EOP) の解決について検討するとともに、進化計算の周辺で開発が進められている Bio-inspired Algorithms 全般についても研究開発を進める。

3. 研究の方法

「大規模かつ複雑な学習問題を解決するため、その高次元モデルを低次元化するのではなく直接最適化するロバストな方法論を確立するには、どのようなアルゴリズム・手法を開発すべきか？」という問題意識に基づき、大規模問題に対応しスケーラビリティを確保するため、LSGOP を解決するための代表的な手法である、LI ならびに CC に基づく適応的な問題分割手法について、さらなる検討ならびに検証を実施する。

本研究では、これまでの手法について再検証するとともに、機械学習の手法を導入した場合の効果について検証し、適応度評価回数の削減とリンケージ同定など遺伝子解析自体の正確さとのトレードオフ関係を明らかにすることで、現実の大規模問題に対応できるスケーラブルなアルゴリズムの実現に必要な課題を解決する。NFL (No Free Lunch) 定理により、効率化のためには対象問題に対する何らかの仮定が必要になるが、現実に存在する問題を広くカバーするロバストな最適化を実現するための条件を明らかにすることで、現実的な解決策を模索するものである。

具体的には、遺伝子解析の計算量を、その精度を考慮しつつどのように削減するかについて検討するとともに、並列分散実行される多数のプロセスをどのようにしてスケーラブルに実装するのかについては、研究代表者が所属する北海道大学情報基盤センターが提供する「学際大規模計算機システム」のスーパーコンピュータシステムを活用する。

4. 研究成果

大規模かつ困難な問題解決に必要なアルゴリズムの開発に向けた検討を進め、最初の成果として、スケーラブルなリンケージ同定手法として、sLIEM (scalable LIEM) の開発ならびに、合成人口問題への適用を行った。進化計算において互いに関連のある遺伝子を同定するリンケージ同定手法は、個体長の 2 乗オーダーの計算量を必要とし、多項式オーダーではあるが大規模問題となった場合にその計算量が課題となる。sLIEM は、重要な変数 (遺伝子) に関する摂動を中心としてリンケージ同定の対象を絞り込むことで、その計算量を削減しつつ、現実的な問題にお

けるリンケージ同定の精度を確保している。 スケーラブルなリンケージ同定手法の適用例として、村田らによる合成人口モデルへの適用を行い、従来手法と比較した優位性を検証し、生成される合成人口モデルの精度を向上(誤差を低減)することができた。

CC は分割統治法に基づいて問題を分解してサブ問題を交互に解く手法であるが、CC における差分グルーピング (DG), DG2, 再帰的 DG (Recursive DG, RDG) などの高精度な分解方法は、サンプリングの精度に極めて敏感で、ノイズが存在する環境では相互作用を検出できなくなり、その対応が現実の問題を解く上での課題となっている。そこで、本研究では高性能かつスケーラブルなリンケージ同定として、分解問題を組合せ最適化問題とみなして実数値 GA のための非線形性チェックによるリンケージ同定 (LINC-R) に基づくリンケージ測定関数 (Linkage Measurement Function, LMF) を提案し、その結果を用いた距離ベース選択付き修正差分進化 (Modified Differential Evolution with Distance-based Selection, MDE-DS) を開発することで、目的関数にノイズがある場合でも最適化を加速できた。

次に、大規模多目的問題 (Large-Scale Multi-objective Optimization Problems, LSMOP) を解決する、協調共進化に基づく変数グルーピング法を提案した。この手法は CC に基づいており、LSMOP を複数の非分離サブコンポーネントに分解し、分割統治戦略に基づいてそれらを交互に解決する。リンケージ尺度最小化 (Linkage Measurement Minimization, LMM) を導入することで、比較的強い相互作用を識別し、より良い分解を反復的に探索することができる。この手法を推定収束点に基づくガウスサンプリング演算子を用いたハイブリッド NSGA-II として実装した。部分問題の最適化において、パレート・フロントの周辺にはより良い解が存在する確率が高いという仮説を立て、この仮説に基づき最適化の各世代で収束点を推定し、収束点付近でガウスサンプリングを行うことで、一般的な変数グループ化手法よりも優れていることが確かめられた。加えて、依存関係行列による手法 (Dependency Structure Matrix with Linkage Identification, DSM-LI) を開発した。最新の差分進化の手法はノイズに敏感であるが、ノイズのある環境でも分離可能な決定変数と分離不可能な決定変数の間の強度に差があることが多く、この相対的な差に基づき分離可能性を分類するのに役立つことでよりノイズに強い手法を開発することができた。

また、適応度の評価に計算コストを必要とする EOP を解決するための手法として、代理アンサンブル支援ハイパーヒューリスティックアルゴリズム (Surrogate-Ensemble-Assisted HyperHeuristics Algorithm, SEA-HHA) を提案した。SEA-HHA は、通常のハイパーヒューリスティクスと同様、低レベルと高レベルのコンポーネントから構成され、低レベルのコンポーネントでは、代理モデル (Surrogate model) の構築を探索戦略と見なし、探索戦略アーカイブ、利用戦略アーカイブ、代理支援推定アーカイブ、および変異戦略アーカイブの 4 つの検索戦略アーカイブを設計した。SEA-HHA は、すべてのデータ、最近のデータ、および近隣の 3 つの原則からモデル構築のためのデータセットを選択し、訓練データと検証データにランダムに分割され、多項式回帰 (PR)、サポートベクター回帰 (SVR)、およびガウス過程回帰 (GPR) によって構築された最も正確なモデルが、解決策の推定のために構築される。高レベルのコンポーネントでは、事前に定義された確率に基づくランダム選択関数を設計して、低レベルのコンポーネントの代理モデルを操作することで、少ない実サンプル回数により EOP を解決するものである。数値実験を通して、提案された SEA-HHA が EOPs の取り扱いに有望であることが示された。

さらに、植物の探索メカニズムにヒントを得た Vegetation Evolution (VEGE) の改良ならびに実問題への応用、氷結による物理現象をヒントにした探索手法である RIME (rime-ice algorithm) においてラテン格子によるサンプリングを導入した SRIME と呼ばれる手法を提案した。VEGE のパフォーマンスをさらに向上させるため、動的成熟戦略と多様な突然変異戦略を導入し、適応度の高い個体により多くの個体を生成する確率を高めるとともに、個体の多様性を増加させるため異なる突然変異方法を提案した。従来の VEGE および DE を、29 のベンチマーク関数の複数の異なる次元で比較検証し、ほとんどの最適化問題において、従来の VEGE の収束速度を大幅に加速し、収束精度を改善することができることを確認した。また、従来の RIME が複雑な最適化問題では容易に局所最適解に陥り、最適化が停滞するため、その改良として、初期化においてラテン方格サンプリングを導入し、改良された硬い霧氷探索戦略、組み込みの距離ベースの選択メカニズムを導入した SRIME を提案した。SRIME を CEC2020 ベンチマーク関数と 8 つの実世界におけるエンジニアリング最適化問題で評価した。その結果、SRIME はベンチマーク問題でオリジナルの RIME の性能を上回るとともに、実世界のアプリケーションで競争力の有効性が示された。

以上、本研究においては、LSGOP の解決を目的として、多岐にわたるアルゴリズムの開発ならびに、代表的なベンチマーク問題ならびにエンジニアリング最適化問題において検証を行い、その有効性を検証した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Zhong Rui, Zhang Enzhi, Munetomo Masaharu	4. 巻 1
2. 論文標題 Cooperative coevolutionary differential evolution with linkage measurement minimization for large-scale optimization problems in noisy environments	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Complex & Intelligent Systems	6. 最初と最後の頁 1-18
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s40747-022-00957-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Zhong Rui, Munetomo Masaharu	4. 巻 1
2. 論文標題 Cooperative Coevolutionary NSGA-II with Linkage Measurement Minimization for Large-Scale Multi-objective Optimization	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Evolutionary Multi-Criterion Optimization	6. 最初と最後の頁 43-55
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-3-031-27250-9_4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Rui Zhong, Masaharu Munetomo	4. 巻 2208.14619
2. 論文標題 Accelerating differential evolution algorithm with Gaussian sampling based on estimating the convergence points	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 arxiv.org	6. 最初と最後の頁 1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.48550/arXiv.2208.14619	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Rui Zhong, Masaharu Munetomo	4. 巻 2209.00777
2. 論文標題 Cooperative coevolutionary Modified Differential Evolution with Distance-based Selection for Large-Scale Optimization Problems in noisy environments through an automatic Random Grouping	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 arxiv.org	6. 最初と最後の頁 1-16
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.48550/arXiv.2209.00777	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Rui Zhong, Enzhi Zhang, Masaharu Munetomo	4. 巻 2209.133077
2. 論文標題 Accelerating the Genetic Algorithm for Large-scale Traveling Salesman Problems by Cooperative Coevolutionary Pointer Network with Reinforcement Learning	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 arxiv.org	6. 最初と最後の頁 1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.48550/arXiv.2209.13077	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Schlueter Martin, Neshat Mehdi, Wahib Mohamed, Munetomo Masaharu, Wagner Markus	4. 巻 14
2. 論文標題 GTOPX space mission benchmarks	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SoftwareX	6. 最初と最後の頁 100666 ~ 100666
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.softx.2021.100666	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 高橋 寿徳, 棟朝 雅晴	4. 巻 2021-MPS-132
2. 論文標題 ログライクゲームにおける多目的神経進化に基づくモジュラーネットワークの導入	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 情報処理学会研究報告数理モデル化と問題解決 (MPS)	6. 最初と最後の頁 1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhong Rui, Yu Jun, Zhang Chao, Munetomo Masaharu	4. 巻 36
2. 論文標題 SRIME: a strengthened RIME with Latin hypercube sampling and embedded distance-based selection for engineering optimization problems	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Neural Computing and Applications	6. 最初と最後の頁 6721 ~ 6740
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00521-024-09424-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhong Rui, Yu Jun, Zhang Chao, Munetomo Masaharu	4. 巻 16
2. 論文標題 Surrogate Ensemble-Assisted Hyper-Heuristic Algorithm for Expensive Optimization Problems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Computational Intelligence Systems	6. 最初と最後の頁 169
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s44196-023-00346-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zhong Rui, Zhang Enzhi, Munetomo Masaharu	4. 巻 10
2. 論文標題 Cooperative coevolutionary surrogate ensemble-assisted differential evolution with efficient dual differential grouping for large-scale expensive optimization problems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Complex & Intelligent Systems	6. 最初と最後の頁 2129 ~ 2149
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s40747-023-01262-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計6件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Rui Zhong, Enzhi Zhang, Masaharu Munetomo
2. 発表標題 Accelerating the Evolutionary Algorithms by Gaussian Process Regression with epsilon-greedy acquisition function
3. 学会等名 進化計算シンポジウム 2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 細川喜生, 棟朝雅晴
2. 発表標題 並列リンケージ同定を用いた合成人口データの生成に関する検討
3. 学会等名 進化計算シンポジウム 2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋 寿徳, 棟朝 雅晴
2. 発表標題 参照点に基づく多目的最適化を導入した神経進化によるローグライクゲームの戦略学習の検討
3. 学会等名 進化計算シンポジウム2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鐘 睿, 余 俊, 張 潮, 棟朝 雅晴
2. 発表標題 A comprehensive performance investigation of metaheuristic algorithms in the adversarial robustness neural architecture search
3. 学会等名 第25回進化計算学会研究会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Zhong Rui, Tu Binan, Zhang Enzhi, Munetomo Masaharu
2. 発表標題 Adjacent Intensity Matrix with Linkage Identification for Large-Scale Optimization in Noisy Environments
3. 学会等名 IEEE CEC (Congress on Evolutionary Computation) 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Zhong Rui, Zhang Enzhi, Munetomo Masaharu
2. 発表標題 A Hierarchical Cooperative Coevolutionary Approach to Solve Very Large-Scale Traveling Salesman Problem
3. 学会等名 OLA (Optimization and Learning Algorithm) 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
オーストラリア	The University of Adelaide		