

勾配法と島モデルを用いた 実数値遺伝的アルゴリズムの性能評価とその応用

Evaluation of Real-coded Genetic Algorithms
Using Gradient Methods and Island Models

七澤 洋平*1 水藤 寛*1 植田 琢也*2 南 学*2
Youhei Nanazawa Hiroshi Suito Takuya Ueda Manabu Minami

*1 岡山大学大学院環境学研究科

Graduate School of Environmental Science, Okayama University

*2 筑波大学臨床医学系放射線医学

Department of Radiology, Institute of Clinical Medicine, University of Tsukuba

Hybrid Genetic Algorithms (HGAs) are genetic algorithms combined with other techniques. For the study described in this paper, Island Model Genetic Algorithms (Distributed Genetic Algorithms: DGAs) and Gradient Methods (GMs) are combined. The Quasi-Newton BFGS formula is used for GMs in the HGAs. For DGAs, Real-coded Genetic Algorithms (RCGAs) are adopted for each subpopulation. The RCGAs are anticipated as efficient approximation methods to solve nonlinear optimization problems. Although various RCGA operators have been proposed, the RCGAs used in this paper are “MGG·SPX”, “MGG·BLX”, and “DIDC·ENDX·NDM”. Performances of the HGAs using RCGAs are evaluated. As an application problem, transition constants in a liver from concentration of contrast media are estimated.

1. はじめに

遺伝的アルゴリズム (GAs) は離散的な関数や多峰性関数に適応可能な強靱な最適化手法である。しかし、確率的な多点探索であるため多くの関数評価を必要とすること、局所解への初期収束、GAs におけるパラメータの調整などの問題が存在する。

これらの問題に対して、[廣安 00] は島モデルを適用した分散遺伝的アルゴリズム (DGAs) [Reiko 89] と勾配法 (GMs) の双方を用いるハイブリッド遺伝的アルゴリズム (HGAs) により、関数評価の削減と局所解への収束の回避を同時に行っている。本稿では [廣安 00] により提案されたアルゴリズムに実数値遺伝的アルゴリズム (RCGAs) を用いた場合の性能評価を行う。2 節で本稿において用いる HGAs について述べ、3 節ではテスト関数による RCGAs ごとの HGAs の比較を行う。4 節では、本手法の適用例として肝臓における造影剤濃度による移行定数の推定問題について採り上げる。

2. ハイブリッド遺伝的アルゴリズム

HGAs とは、GAs と他の最適化手法の特徴を組み合わせた手法である。本稿における HGAs は GMs を [廣安 00] の提案するアルゴリズムに従い GAs と組み合わせている。GMs には BFGS 公式を用いた準ニュートン法を用いる。

また、[廣安 00] では遺伝子表現がビット列である Simple GAs を用いているが、本稿では遺伝子表現が実数値である RCGAs を用いる。RCGAs は非線形最適化問題に対する効率的な近似解法として期待されており、様々な RCGAs オペレータが提案されている。本稿で対象とする RCGAs は “MGG·BLX- α ” (BLX) [佐藤 96][Eshleman 93], “MGG·SPX” (SPX) [樋口 01], “DIDC·ENDX·NDM” (DIDC) [木村 02] の 3 つである。

SPX は変数依存性が強い関数や悪スケール性の関数に対して良好な探索性能を持つが局所解に収束してしまいやすい。BLX は単峰性・多峰性の両方に対しては良好な探索性能を示す。しかし、その探索性能は変数依存性が強い関数に対しては著しく低い。DIDC は多峰性、変数依存性、悪スケール性に対し良好な性能を示し、なおかつ比較的高次元な関数について安定して探索を行うことができる。その反面、最適化には多くの関数評価を必要とする。

3. 数値実験

3.1 諸条件

テスト関数には Rastrigin 関数, Rosenbrock 関数, Ridge 関数, Griewank 関数を用いる。それぞれの関数についての性質、及び GAs における初期値範囲を表 1 に示す。GAs のパラメータは表 2 に示す。終了条件は評価値が 10^{-7} 以下に達したときか、関数評価が 5×10^6 回を超えた場合とする。それぞれの RCGAs オペレータのパラメータについては次の値を用いる: BLX $\alpha = 0.5$, SPX $\epsilon = \sqrt{12}$, DIDC $\alpha = 0.434, \beta = \gamma = 0.35/\sqrt{9}$ 。

表 1: 対象問題の比較と初期値範囲。

function	epistasis	multi-modal	initial value
Rastrigin	×		$-5.12 \leq x_i \leq 5.12$
Rosenbrock		×	$-2.048 \leq x_i \leq 2.048$
Ridge		×	$-64 \leq x_i \leq 64$
Griewank			$-512 \leq x_i \leq 512$

連絡先: 七澤洋平, 岡山大学大学院 環境学研究科 博士後期課程,
岡山県岡山市津島中 3-1-1, nanazawa@s.ems.okayama-u.ac.jp

表 2: GAs パラメータ.

dimension	10
population size	400
migration rate	0.5
migration interval	5
island size	1, 10
number of offspring	100/island size
number of trials	100

3.2 結果

数値実験により得られた結果を表 3 に示す. BLX の GMs 未適用における Rosenbrock 関数の以外は, 最適解への平均到達率は 99.81%であった.

SPX は島モデルにより多峰性関数に対しての欠点が改善されている. BLX は GMs 未適用で Rosenbrock 関数について最適化を行った場合, 最適解に到達することができなかった. しかし, GMs を適用することにより, その欠点を改善できている. DIDC についても, 問題とされていた関数評価の減少が行われており, GMs 適用の効果が見て取れる. 3 つの RCGAs に共通することとして, 多峰性関数では GMs より島モデルを適用するほうが関数評価の減少に繋がっている. これにより, 多峰性関数においては, GMs による探索性能の向上よりも島モデルによる母集団全体の多様性維持が重要なのがわかる. Ridge 関数を除く 3 つのテスト関数において, GMs と島モデルの双方を適用した場合が最も良い結果となっている.

図 1 では 3 つの RCGAs の関数評価を平均化している. この図から GMs と島モデルの双方を適用する場合が最も関数評価が減少しているのがわかる.

表 3: 100 試行における平均関数評価.

Rastrigin	GMs OFF	GMs OFF	GMs ON	GMs ON
	1 island	10 islands	1 island	10 islands
SPX	882,488	119,489	357,424	61,259
BLX	1,518,385	246,410	734,903	136,806
DIDC	2,868,427	436,762	954,166	121,417
Rosenbrock	GMs OFF	GMs OFF	GMs ON	GMs ON
	1 island	10 islands	1 island	10 islands
SPX	759,442	199,352	56,584	6,146
BLX	-	-	147,539	3,547
DIDC	1,619,282	366,554	84,009	7,798
Ridge	GMs OFF	GMs OFF	GMs ON	GMs ON
	1 island	10 islands	1 island	10 islands
SPX	690,856	81,669	943	2,010
BLX	1,536,657	428,017	1,871	1,230
DIDC	965,043	178,704	890	2,875
Griewank	GMs OFF	GMs OFF	GMs ON	GMs ON
	1 island	10 islands	1 island	10 islands
SPX	849,561	96,693	325,328	13,691
BLX	1,787,808	223,455	826,869	45,605
DIDC	3,084,580	395,990	810,927	14,856

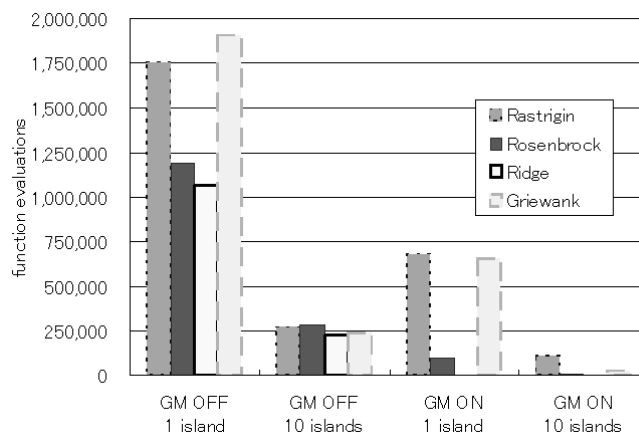


図 1: SPX, BLX, DIDC の平均関数評価 (但し, 初期収束になる試行は除く).

4. 適応例

4.1 肝臓における造影剤濃度による移行定数の推定問題

本節では, 最適化手法の応用例として肝臓における造影剤濃度による移行定数の推定問題について論じる. この問題は, 測定された造影剤濃度と数値計算により導かれた造影剤濃度との差を最小化することにより, パラメータの推定を行う逆問題である.

MRI(Magnetic Resonance Imaging) や CT(Computed Tomography) など, 体内の状態を外部から検査する方法は多くあるが, 臓器によっては詳しい情報を得ることが難しい場合も依然として存在する. そのため, 測定機器により得られた値を用いる数値解析が盛んに行われている [舟迫 03][Lee 02][Ueda 06a][Ueda 06b]. 対象とする肝臓は, CT により造影剤濃度の測定は可能な箇所ではあるが, 詳細な様態を知ることは困難である.

本節では, 造影剤濃度の変移を表現する微分方程式を構築し, 肝臓に繋がる動脈と門脈で CT による測定で得られた血液中の造影剤濃度の値に基づき, 数値解析によって肝臓の注目部位 (以下, 肝臓組織) の造影剤濃度を算出する. その値と測定で得られた肝臓組織の造影剤濃度との差を最小にすることで, 数理モデルのパラメータである移行定数の推定を行う.

最適化により得られたパラメータを基に, 肝臓内に流入した造影剤の平均滞留時間や血管容量を求め, 肝臓の診断の一助となることを目的としている.

4.2 支配方程式

次式は図 2 の肝臓組織における造影剤濃度の変移を表す:

$$\frac{dC(t)}{dt} = K_a \cdot C_a(t - t_a) + K_p \cdot C_p(t - t_p) - K_v \cdot C(t) \quad (4.1)$$

$C_a(t), C_p(t), C(t)$ はそれぞれ動脈, 門脈, 肝臓組織の造影剤の濃度を表す. t_a, t_p はそれぞれ動脈, 門脈の造影剤濃度を測定してから, 肝臓組織への流入部位に至るまでの所要時間である. K_v, K_a, K_p は部位間の造影剤濃度の移行定数を表し, K_v は肝臓組織から静脈, K_a は動脈から肝臓組織, K_p は門脈から肝臓組織となっている.

肝臓組織における造影剤濃度 $C(t)$ は, 動脈を経由してもたらされる $C_{Ra}(t)$ と, 門脈を経由してもたらされる $C_{Rp}(t)$ の

和と等しいとする:

$$C(t) = C_{Ra}(t) + C_{Rp}(t) \quad (4.2)$$

$C_{Ra}(t)$ と $C_{Rp}(t)$ のそれぞれについて、造影剤濃度の変移を次式により定義する:

$$\frac{dC_{Ra}(t)}{dt} = K_a \cdot C_a(t - t_a) - K_v \cdot C_{Ra}(t) \quad (4.3)$$

$$\frac{dC_{Rp}(t)}{dt} = K_p \cdot C_p(t - t_p) - K_v \cdot C_{Rp}(t) \quad (4.4)$$

式 (4.3) と式 (4.4) を加え、式 (4.2) を用いると式 (4.1) に一致する。また、これらの式は線形常微分方程式であるので、式 (4.3) と式 (4.4) の解の和は式 (4.1) の解とも一致する。

動脈から入った造影剤が肝臓組織にて灌流している平均の滞留時間を MTT_a 、門脈についても同様に MTT_p とし、動脈から流入した血液についての単位体積あたりの血管容量を V_a 、門脈についても同様に V_p とする。 MTT_a, MTT_p, V_a, V_p はそれぞれ次式で表わす。

$$MTT_a = \frac{\int_0^\infty C_{Ra}(t) dt}{\int_0^\infty C_a(t) dt} \quad (4.5)$$

$$MTT_p = \frac{\int_0^\infty C_{Rp}(t) dt}{\int_0^\infty C_p(t) dt} \quad (4.6)$$

$$V_a = \frac{K_a}{MTT_a} \quad (4.7)$$

$$V_p = \frac{K_p}{MTT_p} \quad (4.8)$$

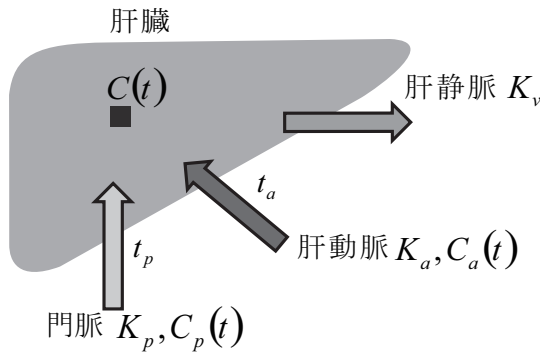


図 2: 肝臓解析モデル。 $C(t)$ は肝臓の CT 画像の pixel 数だけ存在する。

4.3 数値解法

式 (4.1) は線形一階常微分方程式であるので、その解は、

$$C(t) = \int_0^t e^{K_v(t-s)} \{K_a \cdot C_a(s - t_a) + K_p \cdot C_p(s - t_p)\} ds \quad (4.9)$$

の形に書ける。式 (4.9) に基づいて計算される肝臓組織の造影剤濃度を $C_{comp}(t)$ と書き、測定で得られた造影剤濃度 $C(t)$ と区別する。次にそれぞれの数式の離散化を行う:

$$\begin{aligned} C(n\Delta t) &= C_n, C_{comp}(n\Delta t) = \tilde{C}_n \\ C_a(n\Delta t) &= A_n, C_p(n\Delta t) = P_n \end{aligned} \quad (4.10)$$

$C_a(t), C_p(t)$ はそれぞれ $n\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$ において直線近似し、 $\frac{dC_a(t)}{dt}, \frac{dC_p(t)}{dt}$ を差分法にて近似する:

$$C_a(t) \cong \frac{A_{n+1} - A_n}{\Delta t} (t - n\Delta t) + A_n \quad (4.11)$$

$$\frac{dC_a(t)}{dt} \cong \frac{A_{n+1} - A_n}{\Delta t}$$

$$C_p(t) \cong \frac{P_{n+1} - P_n}{\Delta t} (t - n\Delta t) + P_n \quad (4.12)$$

$$\frac{dC_p(t)}{dt} \cong \frac{P_{n+1} - P_n}{\Delta t}$$

$C_a(t), C_p(t)$ は、実際には動脈、門脈から肝臓組織へ血液が流入する部位にて測定されるため、臓器内の造影剤濃度の変化との間には時間的なずれがある。その対処として A_n, P_n を時間 t_a, t_p だけ平行移動する:

$$A_n^* = \begin{cases} A_{n-t_a} & n \geq t_a \\ 0 & n < t_a \end{cases} \quad (4.13)$$

$$P_n^* = \begin{cases} P_{n-t_p} & n \geq t_p \\ 0 & n < t_p \end{cases} \quad (4.14)$$

そして、式 (4.9) に式 (4.11), (4.12) を代入し式 (4.10) を考慮することにより、 \tilde{C}_{n+1} について次式を得る:

$$\begin{cases} \tilde{C}_{n+1} = \frac{K_a(A_{n+1}^* - e^{-K_c \cdot \Delta t} A_n^*)}{K_c} + \frac{K_p(P_{n+1}^* - e^{-K_c \cdot \Delta t} P_n^*)}{K_c} - \frac{K_a(A_{n+1}^* - A_n^*)(1 - e^{-K_c \cdot \Delta t})}{\Delta t \cdot K_c^2} - \frac{K_p(P_{n+1}^* - P_n^*)(1 - e^{-K_c \cdot \Delta t})}{\Delta t \cdot K_c^2} + e^{-K_c \cdot \Delta t} \cdot \tilde{C}_n \\ \tilde{C}_0 = C(0) \end{cases} \quad (4.15)$$

数値計算により導かれた濃度と測定された濃度との差についての評価関数として次式を定義する:

$$J(K_a, K_p, K_c, t_a, t_p) = \frac{1}{N} \cdot \sqrt{\sum_{n=0}^N (\tilde{C}_n - C_n)^2} \quad (4.16)$$

式 (4.16) を最小化することにより得られるパラメータを基に、 MTT_a, MTT_p, V_a, V_p を求める。

4.4 解析結果

最適化には DIDC を組み込んだ HGAs を用いた。3.2 項での結果においては SPX を組み込んだ HGAs が最も性能が良かったが、本節の問題においては DIDC が優れた結果を示していたため、そちらを採用した。

CT 画像上の 1 点の $C(t)$ について最適化を行った結果について図 3 に示す。 $C_{comp}(t)$ と $C(t)$ の差を最小化しているのがわかる。そして、この最適化を CT 画像の pixel 数に相当する全ての $C(t)$ において行う。その結果は、AZE 社と共同で現在開発中の解析ソフトウェアにより図 4 にて示す。

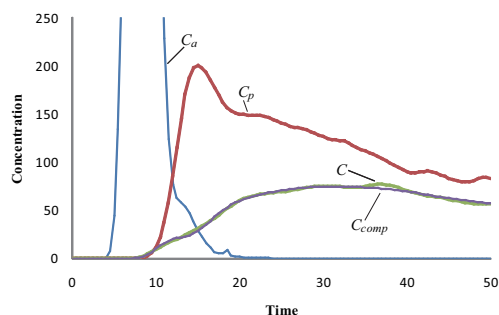


図 3: CT 画像上の 1 点の $C(t)$ についての最適化結果.

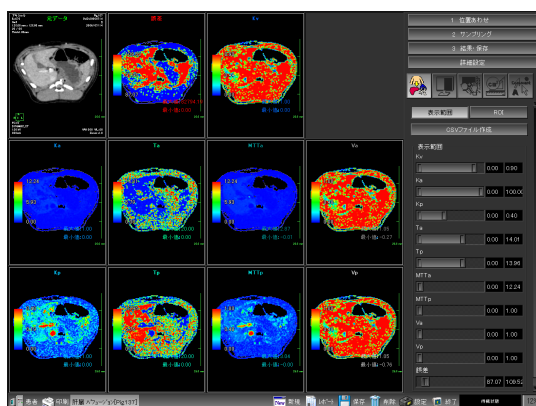


図 4: AZE 社 Virtual Place 上の解析結果画面.

参考文献

- [Eshleman 93] Eshleman, L. and Schaffer, J. D.: Real-Coded Genetic Algorithms and Interval Schemata, Foundations of Genetic Algorithms 2, pp. 187-202 (1993).
- [舟迫 03] 舟迫慎太郎, 対馬義人, 真田茂, 井上克己: Compartmental Model 理論を用いた肝臓における Perfusion CT 画像解析, 日本放射線技術学会雑誌, Vol. 59, pp. 1548-1554 (2003).
- [樋口 01] 樋口 隆英, 筒井 茂義, 山村 雅幸: 実数値 GAs におけるシンプレックス交叉の提案, 人工知能学会論文誌, Vol.16, No.1, pp.147-155, (2001).
- [廣安 00] 廣安 知之, 三木 光範, 南 泰彦, 谷村 勇輔: 傾斜法を用いたハイブリッド遺伝的アルゴリズムの大域的最適点探索, 情報処理学会第 5 回数理モデル化と問題解決シンポジウム論文集, Vol. 41, pp. 57-64 (2000).
- [木村 02] 木村 周平, 小長谷 明彦: 距離に依存せずに多様性を制御する GAs による高次元関数最適化. 人工知能学会論文誌, Vol. 18, No. 4, pp. 193-202 (2002).
- [Lee 02] Lee TY: Functional CT: physiological models, Trends Biotechnol, Vol. 20, pp. 3-10 (2002).
- [Reiko 89] Reiko, T.: Distributed Genetic Algorithms, Proc. 3rd International Conference on Genetic Algorithms, pp. 434-439 (1989).
- [佐藤 96] 佐藤 浩, 小野 功, 小林 重信: 遺伝的アルゴリズムにおける世代交代モデルの提案と評価, 人工知能学会論文誌, Vol.12, No.5, pp.734-743 (1996).
- [Ueda 06a] Ueda, T., Suito, H. and Minami, M.: Functional CT imaging with assessment of tumor-induced angiogenesis: The full-solution of Patlak two-compartmental modelling using a computer-discretization approach, European Radiology Supplements, Vol 16, pp. 369 (2006).
- [Ueda 06b] Ueda, T., Suito, H. and Minami, M.: Implication of tumor-induced angiogenesis in functional CT imaging: Pathophysiological nature of tumor-induced neovascularization and technical overview of functional CT imaging, European Radiology Supplements, Vol 16, pp. 428 (2006).