

熱力学的選択ルールを用いた 遺伝アルゴリズムにおける多様性の維持

東京工業大学 大学院総合理工学研究科 喜多 一¹

1 はじめに

遺伝アルゴリズム (Genetic Algorithm, GA)[1, 2, 3] は生物の遺伝と進化に着想を得て J. Holland らによって開発されてきた適応・最適化手法であり、とりわけ組合せ最適化や非線形最適化など従来手法では困難とされてきた最適化問題への接近法として注目されている。GA では問題の解を個体に見立て、複数の個体からなる個体群に図 1 に示すように、適応度の評価、選択、交叉、突然変異といった遺伝演算を繰り返して解の進化を進める。

このうち、選択演算には、従来、個体の適応度 (解としての評価値) に比例して次世代に残す子孫の数を決定する適応度比例選択が用いられてきた。しかしながら、この選択演算では探索の初期段階で高い適応度を持つ個体が存在すると、その子孫が急速に増加し、個体群の大半を占めることがある。このとき交叉を主たる探索演算とする GA では探索が停滞してしまう (初期収束の問題)。この問題に対して従来は適応度をスケールリングすることや、適応度の値そのものではなく、その順位を用いた選択を行うことで淘汰圧を調整し、多様性の維持をはかってきた。しかしながら、これらの手法は適用対象とする問題や計算機や計算時間など、計算に利用可能な資源に応じて多くの試行錯誤による調整を必要とする。

これに対して筆者らは個体群の多様性をエントロピーとして明示的に評価し、自由エネルギー最小化原理に基づきこれを系統的に制御する「熱力学的遺伝アルゴリズム (Thermodynamical Genetic Algorithms, 以下 TDGA と略す)」を開発した [6, 7]。TDGA は明示的、系統的な多様性の維持を実現しており、単に最適化問題での解の探索性能を改善するだけでなく、多目的最適化、動的環境への適応など広範囲の応用に対して適用可能な選択演算であるという特徴を有している。

2 熱力学的遺伝アルゴリズム

2.1 GA とシミュレーテッド・アニーリング

GA は生物の適応進化に範を得て構成された計算法である。これに対し、シミュレーテッド・アニーリング (simulated annealing, 以下 SA)[4] は高温の物質を徐々に冷却することにより単結

¹E-mail: kita@dis.titech.ac.jp

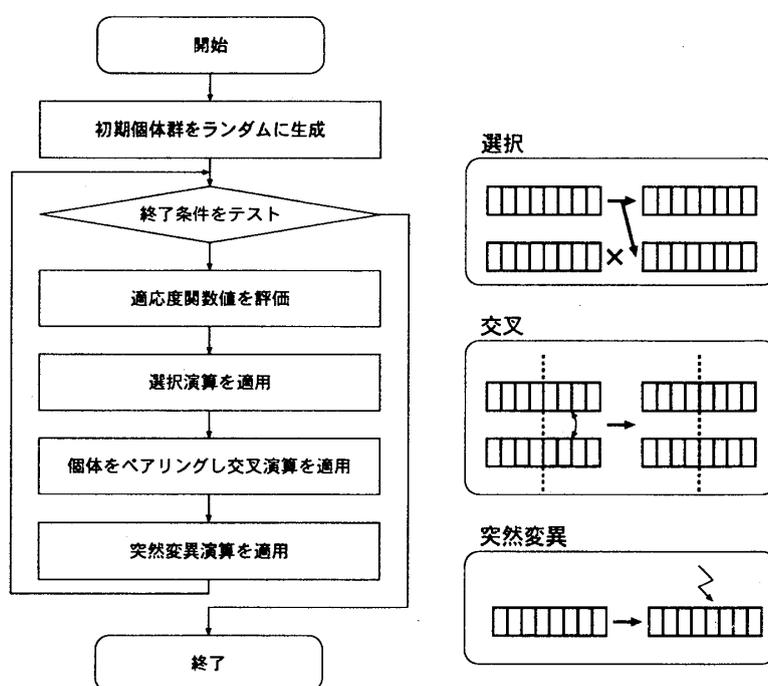


図 1: 遺伝アルゴリズム

晶などのエネルギーの低い状態を得る焼きなまし（アニーリング）という物理的操作に範を得た計算手法である。

GA と SA とを比較すると、GA が多点で並列的に解を探索し、交叉という特徴的な演算が利用可能であるのに対して、SA は単一の点を用いた逐次的な探索を基本とし、多点の並列探索への拡張性は低い。一方、GA では適応度に応じた「複製」を基本とする選択演算を用いるが、収束の効果的な制御は必ずしも容易ではない。これに対し、SA では収束の制御は温度パラメータの調整に集約されており、理論的な理解も進んでいる。また実際的にも温度パラメータ調整による収束の制御は比較的容易である。

そこで GA の多点探索、交叉の利用と SA の持つ収束の制御性の良さを兼ね備えたアルゴリズムを構成することにより、より効果的な探索を実現することが期待される。本稿で紹介する熱力学的遺伝アルゴリズム (TDGA) は GA の多点探索の特徴を活かすことを目的とし、SA から着想を得て、選択演算の中で解の多様さをエントロピーとして評価し、活用しようというものである。以下、TDGA を構成するヒントとなっている熱平衡システムにおける自由エネルギー最小化原理について述べたのち、アルゴリズムの具体的構成について紹介する。

2.2 TDGA の考え方

熱平衡にあるシステムではその状態の確率分布は Gibbs 分布に従うが、これは次に示す自由エネルギー F を最小化する分布であることが知られている。

$$F = \langle E \rangle - TH \quad (1)$$

$$\langle E \rangle = \sum_{x \in X} p(x) E(x) \quad (2)$$

$$H = - \sum_{x \in X} p(x) \log p(x) \quad (3)$$

ここで $p(x)$ はシステムが状態 $x \in X$ にある確率を、 E はシステムが状態 x にあるときのエネルギーの値を、 T は温度をそれぞれ表す。また $\langle E \rangle$ は平均エネルギー、 H はエントロピーである²。熱平衡にあるシステムの持つこの性質を「自由エネルギー最小化原理」と呼ぼう。

エネルギー関数を最適化問題の目的関数と考えると、これは自由エネルギー (1) 式の右辺第 1 項にエネルギー関数の平均値が現れる。また第 2 項に現れるエントロピーは確率分布が多くの状態に、より一様に広がっていると高い値を、一部の状態に集中していると低い値をとる。従って自由エネルギー最小化原理を GA の観点から解釈すると、(1) 式右辺第 1 項に表される目的関数の最小化 (GA における適応度関数の最大化) の追求と、第 2 項に表されるシステムの多様性の維持のエントロピーの増大という形での追求とを同時に目指す原理であると考えることができ、これらを温度 T をパラメータとして調和させたものと考えられる。

そこで、TDGA では、ある世代の個体群から次世代の個体群を形成する際に個体群の平均エネルギーとエントロピーを評価し、自由エネルギーが最小となるように個体の選択を行う。具体的なアルゴリズムについては次節に述べる。そして SA と同様、温度 T をアニーリングにより徐々に低下させることで探索の重点化を実現する。

ただし、実用的なアルゴリズムの構成には個体数の有限性や計算効率などを考慮した実装が必要となる。TDGA ではアルゴリズムの具体化に際して以下のような工夫が行われている [7]。

1. TDGA ではシステムの可能な状態数 $|X|$ 、すなわち解空間の大きさに比べて圧倒的に少ない数の個体を用いてエントロピー H を評価しなければならない。このためエントロピー H を各遺伝子座毎のエントロピー H_i の和として近似的に評価する。すなわち

$$H \simeq \sum_i H_i \quad (4)$$

$$H_i = - \sum_j p_{ij} \log p_{ij} \quad (5)$$

ここで H_i は遺伝子座 i のエントロピー、 p_{ij} は遺伝子座 i での対立遺伝子 j の頻度である。

2. 自由エネルギー F を最小化する個体群の形成を F に関する欲張り法 (Greedy method) を用いて近似する。
3. TDGA における選択の演算量はエントロピーの評価や欲張り法による最適化などを含むため従来手法に比べて多く、個体数を N_p 、遺伝子座数を M としたとき、世代当たり $o(N_p^2 M)$ となる。そこで計算量を低減するためにエントロピー評価に必要な対数計算を事前に数表にしておくことや、対立遺伝子の頻度を逐次的に計算するなどのアルゴリズムの工夫により高速化をはかっている。

²熱力学ではエントロピーの表記にもっぱら記号 S を用いるが、筆者らは文献 [5] に従い情報理論でのエントロピーを表す記号 H を用いた。

2.3 TDGA のアルゴリズム

TDGA のプロトタイプアルゴリズムは以下のように構成される。

1. 個体群サイズ N_p , 最大世代数 N_g 温度 T のアニーリングスケジュール $T(t)$ を定め, 世代数を初期化 $t = 0$ し, 初期個体群 $\mathcal{P}(0)$ をランダムに形成する.
2. 温度の設定 $T = T(t)$
3. $\mathcal{P}(t)$ に交叉, 突然変異を施し $\mathcal{P}_O(t)$ を作る. $\mathcal{P}(t)$ に突然変異を施し $\mathcal{P}_P(t)$ を作る.
 $\mathcal{P}'(t) = \mathcal{P}_O(t) \cup \mathcal{P}_P(t) \cup \{\mathcal{P}(t) \text{ のエリート}\}$
4. Let $i = 1$, and $\mathcal{P}(t+1) = \phi$.
5. Let $\mathcal{P}(t+1, i, h) = \mathcal{P}(t+1) \cup \{h\}$ ここで h は $\mathcal{P}'(t)$ の第 h 個体を表す.
 すべての $h = 1 \sim 2N_p + 1$ について $\mathcal{P}(t+1, i, h)$ の自由エネルギー F を計算し, 最小の自由エネルギーを与える個体

$$h_{\min} = \arg \min_h F(\mathcal{P}(t+1, i, h))$$

を $\mathcal{P}(t+1)$ に加える. すなわち $\mathcal{P}(t+1) = \mathcal{P}(t+1) \cup \{h_{\min}\}$

6. Let $i = i + 1$. もし $i < N_p$ なら ステップ 5. へ.
7. Let $t = t + 1$. もし $t < N_g$ なら ステップ 2. で, そうでなければ終了.

3 TDGA による組合せ最適化

3.1 ナップサック問題への適用

TDGA の基本的な性能を調べるためナップサック問題を例題に数値実験を行った [7]. ナップサック問題とは, 重さ a_i と価値 c_i , $i = 1, \dots, N$ が与えられた N 個の荷物から制限重量 b の範囲で価値を最大にする荷物群を選ぶ問題であり, 以下のように定式化される.

$$\max_{x_i \in \{0,1\}, i=1, \dots, N} \sum_{i=1}^N c_i x_i \quad (6)$$

$$\text{subject to} \quad \sum_{i=1}^N a_i x_i \leq b \quad (7)$$

数値実験は以下のような設定で行った:

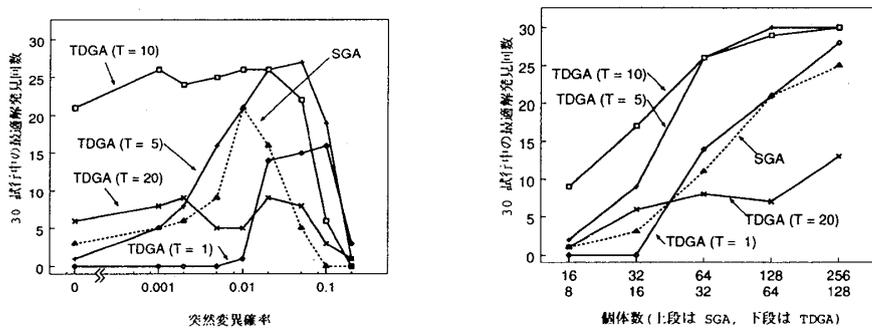
- 問題のサイズ (荷物数): 30.
- 比較対象: TDGA (温度 $T = 1, 5, 10, 20, 50$) と単純 GA (SGA) [2]. なお, TDGA では, その挙動を把握するためにアニーリングは行わず温度を固定した. また, SGA では最適解の発見確率がなるべく高くなるように予備実験により適応度をスケールリングしてある.
- 感度解析: 個体数, 突然変異率.

乱数の系列を変えて行った 30 回の試行での最適解の発見割合の突然変異率と個体数についての依存性を図 2 に示す. ただし図が煩雑になるので $T = 50$ の場合は省略した. また, 図 3 には世代に伴う遺伝子座毎のエントロピーの変化の様子を示す.

図 2 (a) を見ると温度を $T = 20$ と高くした場合は最適解の発見確率は低い. これは温度が高いため選択がエネルギーの減少よりもエントロピーの増加に寄与する個体を選びやすき, その結果, エネルギー値の低い解が生成されにくいことによる. 図 3 (d), (e) を見れば, $T = 20$ や $T = 50$ の場合には世代を経ても多くの遺伝子座でエントロピーが高く維持されていることがわかる.

一方, 温度を $T = 1, 5$ と低くした場合にも図 2 (a) より, とくに突然変異率の低い領域で最適解の発見確率が低いことが判る. これは温度が低いため, 探索の初期の段階で多様性を絞ってしまい, 解空間の探索が十分にできないことによる. 図 3 (a), (b) を見れば, これらの温度では大半の遺伝子座でエントロピーが急速に減少していることがわかる.

これに対して, 両者の中間である $T = 10$ では図 2 (a) より突然変異率にあまり依存することなく最適解の探索ができていることが, また図 2 (b) より, SGA に比べて少ない個体数で探索に成功することがわかる. 図 3 (a), (b) を見れば, この温度ではコストパフォーマンス c_i/a_i が中間的な値を持つ荷物に関しては高いエントロピーを保つ一方で, そうでない荷物に対しては比較的早い段階でエントロピーが低下している. c_i/a_i の中間的な荷物については最適解の探索においてそれらのさまざまな組合せを試みる必要があり, TDGA がこれを効果的に実現している.



(a) 突然変異率の影響

(b) 個体数の影響

(個体数は TDGA: 32, SGA: 64) (突然変異率は TDGA: 0.02, SGA: 0.01)

図 2: ナップサック問題での TDGA と SGA の比較

3.2 巡回セールスマン問題への適用

組合せ最適化問題の中で実用性の高い問題として割当型の問題が挙げられる. ここではその代表例である巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem, TSP) を取り上げ TDGA を適用した [8]. TSP とは相互間の距離が定められたいくつかの都市について, これらを一巡する巡回経路で経路の総延長が最小のものを探す問題である.

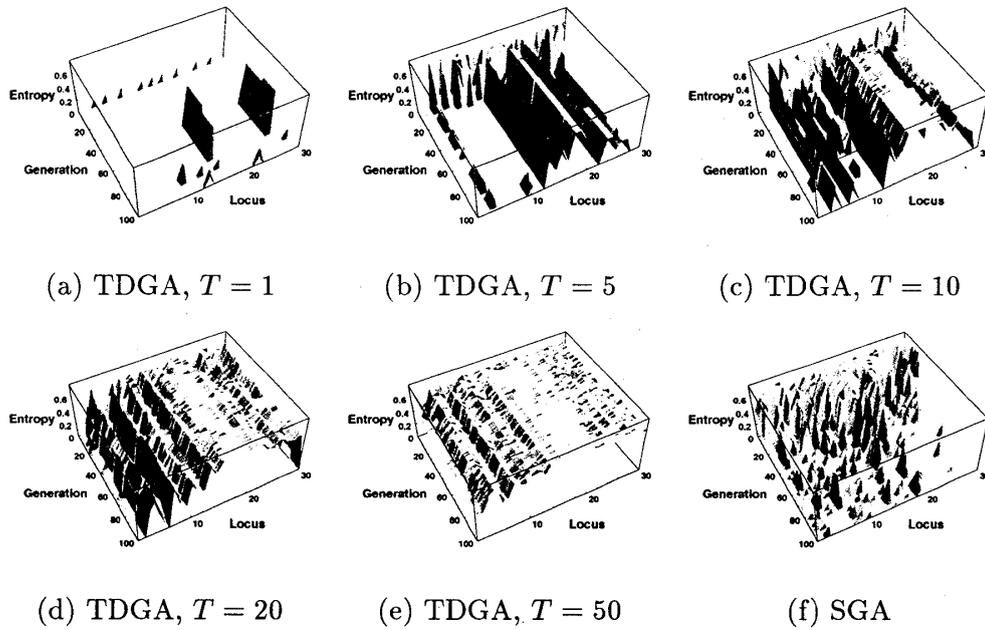


図 3: 遺伝子座毎のエントロピーの変化. 遺伝子座は荷物のコストパフォーマンス c_i/a_i で整列してある.

3.2.1 エントロピーの評価

TDGA を TSP に適用するに際して, 以下のようなエントロピーの評価方法を用いた.

- N_p 個体の群を形成する巡回路群について, 都市 i に注目し巡回路群に含まれる枝でこの都市に接続される $2N_p$ 本の枝の分布から都市 i のエントロピー H_i を次式で評価する.

$$H_i = - \sum_j p_{ij} \log p_{ij} \quad (8)$$

$$p_{ij} = \frac{N_{ij}}{2N_p} \quad (9)$$

ここで N_{ij} は巡回路群中に含まれる都市 i と都市 j を接続する枝の本数である.

- 個体群のエントロピーをすべての都市のエントロピーの総和として評価する. すなわち

$$H = \sum_i H_i \quad (10)$$

3.2.2 アニーリングスケジュール

温度については, 探索の進展とともに平均エネルギー (E) およびエントロピー H の値を観察しながら適応的に温度を低減する以下のアニーリングスケジュールを採用した.

- 初期温度の決定

1. 温度 T を適当に定める.
2. 初期個体群のエントロピーを H_0 , これに温度 T で選択を施した後のエントロピーを $H'_0(T)$ とする.

3. $H'_0(T) \leq H_0 \leq H'_0(T')$ となる 2 つの温度 T, T' が見つければ T' を初期温度として終了.
4. $H_0 > H'_0(T)$ ならば T を増加させて (例えば 2 倍にして) ステップ 2. に, また $H_0 \leq H'_0(T)$ ならば T を減少させて (例えば 1/2 にして) ステップ 2. にもどる.

● 温度の低減

1. その世代までで温度 T を一定に保っていた期間中の最小の平均エネルギーとエントロピーを $\langle E \rangle_{\min}, H_{\min}$ とする.
2. 現在の世代での選択後の平均エネルギー $\langle E \rangle$ とエントロピー H を求める.
3. $\langle E \rangle_{\min} < \langle E \rangle$ と $H_{\min} < H$ がともに満たされれば, 温度 T での熱平衡状態が達成されたと考え, 温度を 0.9 倍する.

3.2.3 数値実験

本手法について数値実験を以下のような設定で行った.

- 例題には TSPLIB[9] の 51 都市問題 (eil51, 図 4 (a) 参照) を用いた.
- 個体数は 1000, 世代数は 600 とした.
- 交叉方法として Cycle Crossover (CX), Partially Mapped Crossover (PMX), Edge Recombination (EX), サブツアー交換交叉 (SXX), 枝交換交叉 (EXX) を用いた [3].
- 交叉演算の差を明確にするため突然変異は用いない.
- 比較対象として単純 GA (SGA) による最適化を同じ交叉方法を用いて行った. 単純 GA では適応度として巡回路長の逆数を用い, 交叉方法毎に適応度の線形スケールリングにより淘汰圧を調整した. TDGA では巡回路長をそのままエネルギーとし, 交叉方法毎の諸パラメータの調整は行っていない.

実験結果を 図 4 に示す. 横軸は世代, 縦軸は乱数系列を変えた 30 回の試行における各世代での最良巡回路長の平均値である. 同図より TDGA では交叉方法毎の調整を行っていないにもかかわらず, 交叉方法毎に淘汰圧を調整した単純 GA よりもよい結果を得ていることがわかる.

また, 局所探索法と TDGA とのハイブリッド化により 500 都市規模の問題に対して最適解を発見することにも成功している.

4 おわりに

本研究で提案した熱力学的遺伝アルゴリズム (TDGA) により GA における収束の制御を系統的に行うことが可能となり, 最適化問題への GA の効果的な適用が可能となった. なお, TDGA は多目的最適化 [10] や環境変動への適応 [11, 12] など最適化問題以外の応用に対しても統一的に適用可能なアルゴリズムであることを付け加えておく.

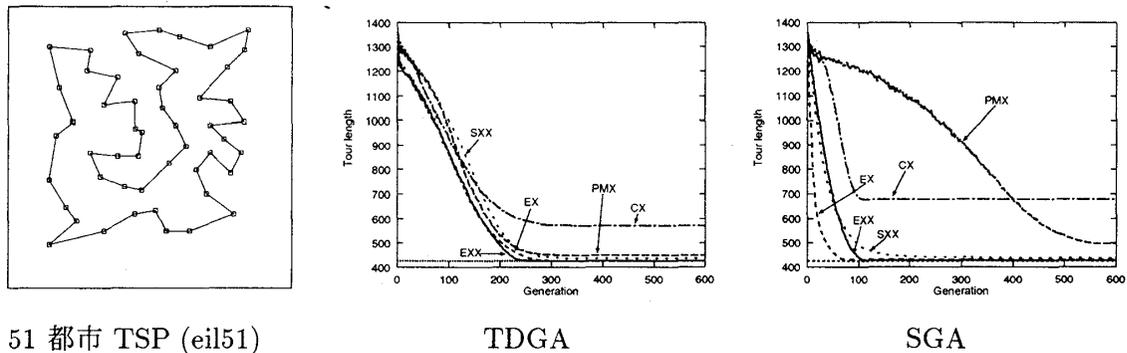


図 4: 51 都市 TSP に対する数値実験結果

謝辞

本研究は森直樹氏，吉田潤二氏，前川景示氏，玉置久氏，西川禎一氏らとの共同研究によるものである。また本研究は一部，文部省科学研究費重点領域研究「創発的機能形成のシステム理論」ならびに日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業「生物的適応システム」の補助を得て行われたものである。

参考文献

- [1] J. Holland: *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, Univ. of Michigan Press (1975), MIT Press (1992).
- [2] D.E. Goldberg: *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*, Addison-Wesley (1989).
- [3] 三宮，喜多，玉置，岩本：遺伝アルゴリズムと最適化，朝倉書店 (1998).
- [4] S. Kirkpatrick et al.: *Science*, 220 (1983) 671-680.
- [5] 深尾: 分散システム論，昭晃堂 (1987).
- [6] N. Mori, J. Yoshida, H. Tamaki, H. Kita and Y. Nishikawa: *Proc. Int. Conf. on Evolutionary Computation 95* (1995) 188-192.
- [7] 森，吉田，喜多，西川：システム制御情報学会論文誌，9 (1996) 82-90.
- [8] 前川，森，玉置，喜多，西川：計測自動制御学会論文集，33 (1997) 939-946.
- [9] G. Reinelt: TSPLIB, ftp://softlib.rice.edu/ (1990).
- [10] 森，藪本，喜多，西川: システム制御情報学会論文誌，11 (1998) 103-111.
- [11] 森，喜多，西川：システム制御情報学会論文誌，12 (1999) 240-249.
- [12] N. Mori, S. Imanishi, H. Kita and Y. Nishikawa: *Proc. Int. Conf. on Genetic Algorithms 97* (1997) 299-306.