

遺伝アルゴリズムにおける熱力学的選択ルールの提案*

森 直樹**・吉田 潤二***・喜多 一**・西川 禎一**

A Thermodynamical Selection Rule in the Genetic Algorithm*

Naoki MORI**, Junji YOSHIDA***, Hajime KITA** and Yoshikazu NISHIKAWA**

The genetic algorithm (GA), an optimization technique based on evolution, suffers often from a phenomenon called the premature convergence. That is, the system often loses the diversity of the population at an early stage of searching. In this paper, the authors propose a novel method called the ThermoDynamical Genetic Algorithm (TDGA), which adopts concepts of the temperature and entropy suggested from the simulated annealing (SA) to maintain the diversity of the population. Further, the computational complexity of TDGA is evaluated, and comparative study of TDGA with the Simple GA is carried out taking a knapsack problem as an example.

1. はじめに

近年、生物の遺伝と自然選択による進化の過程を模した最適化手法である遺伝アルゴリズム (Genetic Algorithm, 以下 GA と略す)^{1),2)}が注目されている。GA では最適化問題の解を個体とみなし、複数の個体から形成される個体群を考える。その個体群の中で、より良い目的関数値 (GA では適応度と呼ぶ) を持つ個体について、その複製が次世代により多く残され (選択), これらに個体間での情報を交換する“交叉”やランダムに遺伝子情報を変化させる“突然変異”などの演算を加えて新しい解を生成し、探索していく。GA には (1) 個体群を用い、解空間の多数の点で同時に探索を進めること, (2) これらの探索点の持つ情報を利用した交叉により新たな探索点を生成することなど、従来の最適化手法には見られない特徴があり、問題への依存性が少なく広範囲の応用が可能な手法としての期待がある。

しかしながら、その一方で、この手法固有の問題点も指摘されている。GA では「より良い目的関数値を持つ個体について、その複製が次世代により多く残される」という選択プロセスのダイナミクスを用いて、良い個体の近傍の探索が重点化される。しかしながら、このプロセスは、時には解空間を十分に探索する前にある個体の子孫により個体群の多数が占められ、個体群が多様性を喪失し、その結果として探索の停滞をもたらす。これは、“初期収束 (premature convergence)”と呼ばれており、GA を最適化問題に応用する場合には回避すべきものである。

初期収束の回避手法はいくつか提案されているが、最も代表的な手法は適応度のスケールリングにより選択の強さ (淘汰圧) を調整しようとするものである²⁾。しかしながら、この方法ではパラメータの調整を試行錯誤で行う必要があり、かなり手間を要する。このほかにも、適応度を類似した解の間で分け合う方法²⁾、個体群の分布に空間的な概念を導入し、複製の生成を近傍に限定する方法³⁾、解を構成する対立遺伝子の希少度を考慮して希少度の高いものを積極的に保存する方法⁴⁾などが提案されているが、いずれも十分に整理された系統的な手法とは言えない。

一方、GA と同様、汎用的な最適化手法にシミュレティッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) 法⁵⁾がある。これは溶融した物質を徐々に冷却することによ

* 原稿受付 1995 年 4 月 28 日

** 京都大学 大学院 工学研究科 Graduate School of Engineering, Kyoto University; Yoshidahonmachi, Sakyo ward, Kyoto city, Kyoto 606-01, JAPAN

*** 大阪ガス (株) 開発研究所 Research & Development Center, Osaka Gas Co., Ltd.; Science Center Building 3, Awatacho Chudoji, Shimogyo ward, Kyoto City, Kyoto 600, JAPAN

Key Words: genetic algorithm (GA), simulated annealing (SA), premature convergence, free energy, selection.

で低エネルギー状態である結晶が得られるという物理現象に着想を得て、これを模して最適化問題を解こうという手法である。SA法では系の熱的なゆらぎを温度というパラメータで明示的に調整し、探索の重点化と収束性を制御する。さらに、このSAと先のGAを融合させた手法がMahfoudら⁶⁾やSchultz⁷⁾によって提案されている。彼らの手法は並列に実行されるSAのプロセス間に、GAの特徴的な探索手法である交叉を適用したものである。この手法ではGAの特徴の一つである交叉の効果は期待できるが、もう一つの特徴である選択による探索の重点化はあまり期待できない。

本論文では、初期収束現象を回避するために、SA法に見られるような明示的に収束制御を導入する手法として、GAにおける選択プロセスに熱力学的なエントロピーと温度の概念を導入した熱力学的遺伝アルゴリズム (Thermodynamical Genetic Algorithm: TDGA) を提案する。この手法では、選択による探索の重点化や交叉による探索など、GAにおける探索の特徴はそのまま活かされている。以下、まず準備として2. および3. でそれぞれGAおよびSAの概要を紹介する。4. でTDGAの構成法を述べ、5. ではTDGAの諸性質を考察する。6. ではシミュレーション実験によりTDGAの有効性を確認する。7. では本研究のまとめを述べるとともに今後の課題について触れる。

2. 遺伝アルゴリズム

2.1 遺伝アルゴリズムの概要

遺伝アルゴリズム (GA) を最適化問題に適用する際には、以下のように考える。最適化問題の決定変数ベクトル \mathbf{x} を、 M 個の記号 $X_i (i=1, 2, \dots, M)$ の列で表すことにし、これを M 個の遺伝子座 (locus) からなる染色体とみなす。各 X_i は遺伝子であり、これが取り得る値を対立遺伝子 (allele) という。

このように符号化された染色体が個体の遺伝子型であり、それに対応して定まる変数 \mathbf{x} が表現型である。通常、最大化問題への応用では解の候補 \mathbf{x} を個体に、最適化すべき目的関数 $f(\mathbf{x})$ を適応度 g にそれぞれ対応づける。この際、より良い目的関数値を持つ解 (表現型) ほど、それに対応する個体 (遺伝子型) の適応度 g が高くなるように f と g の関係を定めておく。

次に複数の個体から成る個体群を生成し、これに選択、交叉および突然変異の3種の演算子を繰り返し作用させることにより探索を進める。ここで選択とは、より高い適応度を持つ個体をより多く次世代の個体群に残す演算子である。また交叉とは、2個体の染色体の記号列を分解し再構成する演算子で、生物界での有性生殖に相当する。そして突然変異とは、各個体について、ある確率 (突然

変異率) で、各遺伝子座の遺伝子を他の対立遺伝子と入れ換える演算子である。

これら3種の演算子を各世代の個体群に施し、世代の更新ごとにより良い個体 (最適解により近い解の候補) が個体群内に増えるようにすれば、やがて最適解が得られるであろう、というのがGAの基本的な考え方である。

2.2 単純遺伝アルゴリズム

2.1 で述べたGAの手順はアルゴリズムの枠組を与えるものであり、実際の問題に適用するためには、その詳細を具体化しなければならない。ここでは、その代表的な手法である単純遺伝アルゴリズム (Simple GA: SGA)²⁾ について述べる。

2.2.1 個体の表現

SGAでは2値 $\{0, 1\}$ の対立遺伝子からなる固定長の記号列、たとえば、

0 1 1 0 1 0 0 1 0

を用いて染色体 (個体) を表現する。

2.2.2 選択

選択演算子として、SGAでは以下に示す適応度比例戦略が用いられる。

● 適応度比例戦略

世代 t における個体 i の適応度が g_i であるとき、その個体が次世代に残す子の数の期待値を

$$\frac{g_i}{\sum_i g_i} = \frac{g_i}{\bar{g} N_p} \quad (1)$$

とする。ここで N_p は個体群中の個体数、 \bar{g} は適応度の平均値である。このほかに、個体群中で最も適応度の高い個体は変更を加えることなしに必ず次世代に残すエリート保存戦略がしばしば組み合わされる。

2.2.3 交叉

SGAで用いられる代表的な交叉方法を以下に示す。

(1) 一点交叉 (1 point crossover)

個体群内の個体をランダムにペアリングし、各ペアについて交叉位置をランダムに1か所選ぶ。そして、ある確率でその位置から最後まで遺伝子を互いに入れ換える。

(2) 一様交叉 (uniform crossover)

個体群内の個体をランダムにペアリングし、各ペアについて、0, 1を等確率で発生して染色体と同じ長さのマスクを作る。交叉時にそのマスクの値によって遺伝子を入れ換える。たとえば、子1は各遺伝子座のマスクが0のときには親1の遺伝子を受け継いで構成される。子2はマスクの解釈を逆に生成する。

2.2.4 突然変異

SGAでは、各個体についてある突然変異率で突然変異を行うか否かを決定し、突然変異を行う場合にはランダムに選んだ一つの遺伝子座において、遺伝子を対立遺伝子に置き換える。

2.2.5 適応度の計算

SGAでは、2.2.2のように個体の適応度に比例して子の数を決定し、適応度の最大化を図る。また適応度は非負でなければならない。よって最小化問題を解く場合には、目的関数を最大化問題に変換して適応度関数を構成しなければならない。また、GAを実際の問題に適用する場合、以下に述べるスケーリングと呼ばれる手法がよく用いられる。

2.2.6 スケーリング

最大化すべき評価関数値が決定された時、ある関数を導入し評価関数値の差違を調整して、適応度 g を定めることをスケーリング (scaling) と呼ぶ。スケーリングにはいくつかの種類があるのでこれを問題に応じて使用し、適切な適応度を得なければならない。

2.3 SGAのアルゴリズム

以下にエリート保存戦略を行うSGAのアルゴリズムを示す。世代 t における個体群を $P(t)$ と記す。

ステップ 1 個体数 N_p 、最大世代 N_g 、交叉確率 P_c および突然変異率 P_m を与える。

ステップ 2 $t=0$ とし、初期個体群 $P(0)$ をランダムに生成する。

ステップ 3 個体群中で最大の適応度を持つ個体 (エリート) を e とする。

ステップ 4 適応度比例戦略に従って $P(t)$ から N_p 個体を選択・生成する。この個体群を $P'(t)$ とする。

ステップ 5 $P'(t)$ をランダムに2個体ずつペアリングする。これら各ペアを親として交叉確率 P_c で交叉を行い2個体の子を作る。これにより N_p 個体の群 $P''(t)$ を作る。

ステップ 6 ステップ 5 で得られた $P''(t)$ の各個体に対し確率 P_m で突然変異を行い、個体群 $P'''(t)$ を作る。ここで $P'''(t)$ のなかで最小適応度の個体を先に保存したエリート e と入れ換え個体群 $P(t+1)$ とする。

ステップ 7 $t=t+1$ とし、 $t < N_g$ ならステップ 3 に戻る。 $t = N_g$ なら終了。

2.4 GAにおける収束のメカニズムと初期収束

GAでは、適応度のより高い個体が次世代により多くの子孫を残す“選択”というプロセスにより、個体群が同一の遺伝子型の個体で占められるという収束 (多様性の

喪失)を生じる。このことは良い遺伝子型の近傍での探索を重点化するという意味を持つ。

このほかに、“遺伝的浮動”と呼ばれる現象もある。この現象は次世代を形成するプロセスが確率的であるために、個体群がたとえ同じ適応度を持つ幾種類かの個体から形成されていても、その遺伝子の比率がランダムウォークすることにより、系が次第に多様性を失っていくというものである。

これらの収束が最適値の探索が不十分な状況で生じることがしばしばあり、“初期収束”と呼ばれている。GAの応用において、より一層探索を進めること、あるいは環境の変動に対応すること等を考えた場合、何らかの方法で上記の“選択”や“遺伝的浮動”による多様性の喪失を、探索効率を落さずに回避することが望まれる。

“初期収束”を避けるためには突然変異率を高く設定することが考えられるが、これは良い個体の遺伝子型の破壊も生じるため、通常、探索効率の低下を招く。別の対策としてはスケーリングによる淘汰圧の調整があるが、適切なスケーリングを行うためには試行錯誤によるパラメータの調整などに手間を要する。そのほか1.で述べたように、いくつか提案されている手法があるが十分系統的な整理はなされていない。

3. シミュレーティッドアニーリング (SA) 法と自由エネルギー最小化原理

次の最適化問題を考える。

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) \quad (2)$$

$$\mathbf{x} \in \mathcal{F} \quad (3)$$

ここで \mathcal{F} は有限集合であることを仮定する。また目的関数 E をエネルギー関数と呼ぶ。SA法では系の状態 \mathbf{x} に対して摂動を加え、新しい状態 \mathbf{x}' を得る。そして新しい状態でのエネルギー値 $E(\mathbf{x}')$ が旧状態のエネルギー値 $E(\mathbf{x})$ より小さければ高い確率で、大きければ低い確率で新状態 \mathbf{x}' への遷移を行う。これにより、局所最小点にとらえられることなく関数 E の大域的な最小点を発見しようというものである。SA法の代表的な状態遷移則であるMetropolisの方法では、状態遷移確率は

$$\begin{cases} 1 & , \text{ if } E(\mathbf{x}') < E(\mathbf{x}) \\ \exp\left(\frac{-E(\mathbf{x}') + E(\mathbf{x})}{T}\right) & , \text{ otherwise} \end{cases}$$

で与えられる。ここで T は温度と呼ばれる正のパラメータである。SA法では温度 T を時間とともに下げていくが、同方法で温度を一定にした時に得られる状態 \mathbf{x} の定常分布は、以下に示すGibbs分布となる⁸⁾。

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{-E(\mathbf{x})}{T}\right) \quad (4)$$

$$Z = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{F}} \exp\left(\frac{-E(\mathbf{x})}{T}\right) \quad (5)$$

ここで $p(\mathbf{x})$ は系が状態 \mathbf{x} をとる確率である。
この定常分布については自由エネルギー F

$$F = \langle E \rangle - HT \quad (6)$$

を最小にする分布であることが知られており⁸⁾，自由エネルギー最小化原理と呼ばれる。ここで， $\langle E \rangle$ は系の平均エネルギー， H はエントロピーである。

$$\langle E \rangle \triangleq \sum_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}) E(\mathbf{x}) \quad (7)$$

$$H \triangleq - \sum_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}) \log p(\mathbf{x}) \quad (8)$$

4. 熱力学的遺伝アルゴリズム

4.1 TDGA の方針

SA 法において最小化される自由エネルギー (6) 式の右辺第 1 項は，系がエネルギー最小化という目的を追求する項，第 2 項は，系の状態の多様性を維持する項と解釈でき，これら両者を温度 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 SGA で用いられている適応度比例戦略による選択に代えて，自由エネルギーを最小化するように次世代の個体群を選択することを考え，これを TDGA の基本方針とする。しかしながら，限られた個体数を扱わなければならないこと，選択に伴う計算の手間を軽減しなければならないことなど，その具体化にはいくつかの工夫を要する。

その一つは系の多様性を表すエントロピー H の評価である。個体群中の個体の種（多数の遺伝子座中の 1 遺伝子座でも遺伝子が異なっていれば異なる種と考える）についてのエントロピー H^{ALL} は，次式で表される。

$$H^{\text{ALL}} = - \sum_i p_i \log p_i \quad (9)$$

ここで p_i は種 i の存在確率である。全遺伝子座を一括して扱ったエントロピーであることから H^{ALL} と記した。しかし，GA では可能な状態 $\mathbf{x} \in \mathcal{F}$ のうち各個体がとり得る値は個体数 N_p の程度であり， $|\mathcal{F}|$ に比べて極めて小さい。個体群が遺伝子型がわずかに異なる個体から形成されていても，種の存在確率として個体群中の種の割合を用いてエントロピーを計算すると，これはかなり大きな値になってしまう。したがって，(9) 式をそのまま用いることは現実的ではない。そこで (9) 式に代えて，次式のように各遺伝子座ごとにエントロピーを計算する方法

を用いることにする。

$$H^1 = \sum_{k=1}^M H_k^1, \quad H_k^1 = - \sum_{j \in \{0,1\}} P_j^k \log P_j^k \quad (10)$$

ここで，1 遺伝子座ごとに考えたエントロピーであるので H^1 と記した。 M は遺伝子座長である。また簡単のため対立遺伝子を 2 値 $\{0, 1\}$ とした。また H_k^1 は個体群の遺伝子座 k の遺伝子に関するエントロピーを， P_j^k は遺伝子座 k における対立遺伝子 j の存在確率を表している。

【定理 1】 H^{ALL} と (10) 式の H^1 とが等しくなるのは，各遺伝子座の遺伝子が独立に値をとる場合である。

(証明) 状態 \mathbf{x}_i を表す個体について遺伝子座 k の遺伝子を x_i^k とする。(10) 式から

$$x_i^k = j, \quad j \in \{0, 1\} \quad (11)$$

となる確率は P_j^k となる。各遺伝子座の遺伝子が独立に値をとるという仮定から，状態 \mathbf{x}_i の個体の存在確率 p_i は次のように表せる。

$$p_i = P_{x_i^1}^1 \cdot P_{x_i^2}^2 \cdot P_{x_i^3}^3 \cdots P_{x_i^M}^M \quad (12)$$

ここで，エントロピー H^{ALL} は (9) 式と (12) 式より，次のように計算することができる。

$$\begin{aligned} H^{\text{ALL}} &= - \sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{F}} p_i \log p_i \\ &= - \sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{F}} P_{x_i^1}^1 \cdots P_{x_i^M}^M \log P_{x_i^1}^1 \cdots P_{x_i^M}^M \\ &= - \sum_{x_i^1 \in \{0,1\}} \cdots \sum_{x_i^M \in \{0,1\}} P_{x_i^1}^1 \cdots P_{x_i^M}^M \log P_{x_i^1}^1 \cdots P_{x_i^M}^M \\ &= - \sum_{x_i^1 \in \{0,1\}} \cdots \sum_{x_i^M \in \{0,1\}} P_{x_i^1}^1 \cdots P_{x_i^M}^M \sum_{k=1}^M \log P_{x_i^k}^k \\ &= - \sum_{k=1}^M \sum_{x_i^k \in \{0,1\}} P_{x_i^k}^k \log P_{x_i^k}^k \\ &\quad \times \underbrace{\sum_{\substack{x_i^j \in \{0,1\} \\ j=1, \dots, M, j \neq k}} \prod_{j=1, j \neq k}^M P_{x_i^j}^j}_{\text{全確率}=1} \\ &= - \sum_{k=1}^M \sum_{x_i^k \in \{0,1\}} P_{x_i^k}^k \log P_{x_i^k}^k \\ &= - \sum_{k=1}^M \sum_{j \in \{0,1\}} P_j^k \log P_j^k \\ &= \sum_k H_k^1 = H^1 \end{aligned} \quad (13)$$

□

各遺伝子座の遺伝子のとる値が独立であるという仮定は，

個体数が十分に多く、また染色体が交叉により十分に混合されている場合に成立する。実際の計算において、 P_j^k には個体群での遺伝子座 k における対立遺伝子 j の割合を用いる。TDGA の具体化に際してもう一つ工夫を要する点は、自由エネルギーの最小化である。自由エネルギーを厳密に最小化する個体群を選ぶことは、それ自体困難な組合せ最適化問題であり、多大な計算量を要する。しかしながら自由エネルギーの最小化は、GA における次世代の形成の評価基準にすぎないので、厳密な最小化は必要ではない。そこで近似的な最小化手法として欲張り法を用いる。すなわち、次世代の個体群を逐次的に形成する際にその時点で自由エネルギーを最小にする個体を現世代の個体群から選び、次世代の個体群に付加するという方法を用いた。

4.2 TDGA のアルゴリズム

TDGA のアルゴリズムは、以下のように構成される。

- ステップ 1 個体数 N_p 、最大世代 N_g 、温度スケジュール関数 $T(t)$ を与える。
- ステップ 2 $t=0$ とし、初期個体群 $P(0)$ をランダムに生成する。
- ステップ 3 温度 T を $T(t)$ に設定する。
- ステップ 4 最小の目的関数値を持つ個体（エリート）を e とする。
- ステップ 5 個体群をランダムにペアリングして交叉を行い、 N_p 個体の子を作る。親と子 $2N_p$ 個体に突然変異を施す。これに、先に保存したエリート e を加えた $2N_p+1$ 個体の群 $P'(t)$ を考える。
- ステップ 6 $i=1$ とする。 $t+1$ 世代の個体群 $P(t+1)$ を空にする。
- ステップ 7 $P'(t)$ の中から順次個体を $P(t+1)$ に加えていくが、 i 番目の個体を決めるときに $P(t+1)$ ですでに確定している $i-1$ 個体からなる個体群を $P(t+1, i-1)$ 、 i 番目の個体として $P'(t)$ の個体 h を $P(t+1, i-1)$ に加えた状態の個体群を $P(t+1, i, h)$ とする。このとき $P(t+1, i, h)$ の自由エネルギー

$$F = \langle E \rangle - T \sum_k H_k^1$$

$$= \frac{\sum_{l=1}^{i-1} E_l + E'_h}{i} - T \sum_{k=1}^M H_k^1(i, h) \quad (14)$$

$$H_k^1(i, h) = \sum_{j \in \{0,1\}} P_j^k(i, h) \log P_j^k(i, h) \quad (15)$$

を最小にする個体 h を i 番目の個体として選ぶ。ここで E_l は $P(t+1, i-1)$ の個体 l のエネルギー（目的関数値）、 E'_h は個体 h のエネルギー、 $H_k^1(i, h)$ は $P(t+1, i, h)$ の遺伝子座 k のエントロピー、 $P_j^k(i, h)$ は $P(t+1, i, h)$ の遺伝子座 k の遺伝子 j の割合である。自由エネルギー F を最小にする個体が複数存在するときには、その中からランダムに1個体を選ぶ。

ステップ 8 $i=i+1$ とし、 $i < N_p$ ならステップ 7 に戻る。

ステップ 9 $t=t+1$ とし、 $t < N_g$ ならステップ 3 に戻る。 $t=N_g$ なら終了。

5. TDGA の性質

5.1 TDGA の計算量

TDGA では個体選択の際に個体群のエントロピーを計算する。この計算に手間を要するために、選択演算子の計算量はSGAに比べてかなり多くなる。ここでその計算量を評価しておく。

5.1.1 自由エネルギーの計算法

(6) 式より、TDGA では $t+1$ 世代の i 番目の個体を選ぶ際に、 t 世代の個体群 $P'(t)$ から (14) 式の自由エネルギー F を最小にする個体 h を選ぶ。

(14) 式において、最も計算の手間を要する項は $H_k^1(i, h)$ である。ところで、 $H_k^1(i, h)$ は次式のように計算できる。

$$H_k^1(i, h) = -\frac{n_k^0 + \delta_{0, x_h^k}}{i} \log \left(\frac{n_k^0 + \delta_{0, x_h^k}}{i} \right) - \frac{n_k^1 + \delta_{1, x_h^k}}{i} \log \left(\frac{n_k^1 + \delta_{1, x_h^k}}{i} \right)$$

$$= -\frac{1}{i} \left\{ (n_k^0 + \delta_{0, x_h^k}) \log (n_k^0 + \delta_{0, x_h^k}) + (n_k^1 + \delta_{1, x_h^k}) \log (n_k^1 + \delta_{1, x_h^k}) \right\} + \log i \quad (16)$$

ここで n_k^0 および n_k^1 は、それぞれ、 $P(t+1, i-1)$ の遺伝子座 k での0および1の数、 x_h^k は個体 h の遺伝子座 k の対立遺伝子の値である。また δ_{ij} はクロネッカーの δ

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (17)$$

である。

(16) 式の中で計算すべき対数は、1 から N_p までの整数値についての値のみをとる。したがって、計算技法として、手間のかかる自然対数の評価をTDGAの開始に先だてて表にしておく効率化が可能である。また n_k^0 と n_k^1

は、 $t+1$ 世代の個体群の確定に応じて逐次的に計算することができる。また、ある i において (6) 式、すなわち (14) 式を最小にする個体を探すことは、 $\sum_l E_l$ が j によらないことから、次式

$$\frac{E'_h}{T} - i \sum_{k=1}^M H_k \quad (18)$$

を最小にする個体を探すことと等価である。(18) 式の第 1 項は i によらないことに注意すれば、これを i に関する繰り返しの外側で計算しておけばよいことがわかる。

5.1.2 計算量の評価

エネルギー関数 E を 1 回評価するために、 α という量の演算を要するものと仮定する。TDGA では 1 世代の更新において $2N_p+1$ 個体についてこれを評価するので、エネルギー関数の評価に世代当り $\alpha \cdot o(N_p)$ の手間を要す。また、 H_k^1 の評価は (16) 式より、1 個体当り $o(M)$ である。ここで $o(\cdot)$ はオーダーを表す。これが 4.2 に示したアルゴリズムの中で、個体数 N_p のオーダーの繰り返し回数をもつ 2 重ループの中にあるので、世代当りの計算量は $o(N_p^2 M)$ である。さらに n_k^0, n_k^1 の更新には世代当り $o(N_p M)$ の計算量を要するが、これは先に示した H_k^1 の評価よりもオーダーが小さい。したがって、TDGA の計算量は 1 世代当り

$$\alpha \cdot o(N_p) + o(N_p^2 M) \quad (19)$$

となることがわかる。 α は通常、個体数 N_p に依存しないので、個体数 N_p に対して TDGA ではその 2 乗のオーダーの手間を要する。

5.2 TDGA 収束

TDGA では、この手法特有の以下のような現象が生じる。いま 4.2 に示したアルゴリズムのステップ 5 で形成されている $2N_p+1$ 個体からなる個体群を \mathcal{P} とする。このうち、最小のエネルギー値を持つ個体として x_1, x_2 の 2 個体があり、しかも x_2 の各遺伝子座の対立遺伝子は x_1 のそれを反転したものとなっている状態を想定する。たとえば以下のような状況である。

$$\begin{array}{lcl} x_1 : & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ x_2 : & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array}$$

このときステップ 7 と 8 では、 $x_1, x_2, x_1, x_2 \dots$ とこれら 2 個体のみが選択され続ける。

一度このような状況が出現すると、交叉あるいは突然変異により、よりエネルギー値の小さい個体が発見され

るか、あるいは x_1, x_2 のいずれかが交叉や突然変異によりすべて破壊されるまでこの状況が継続する。この現象を“TDGA 収束”と呼ぶことにする。

TDGA 収束が生じる理由は、エントロピー H の評価を H^1 を用いて近似したためで、TDGA 収束が生じると遺伝子座ごとには多様性が維持されている (H^1 は大きい) が、個体群としては著しく多様性を喪失している (H^{ALL} は小さい) という状態になる。

TDGA 収束は各遺伝子座では多様性を維持しているため、交叉により新しい点の探索が行われるという点で通常の GA の収束とは異なっている。実際の応用においては、この現象がどの程度問題となるかは不明であるが、この点や TDGA 収束の対策としてエントロピーの評価を 2 遺伝子座ごとに行う手法などを検討中である。

6. シミュレーション

6.1 シミュレーション条件

TDGA の動作の確認のためにシミュレーションを行う。例として、Table 1 に示すような 30 荷物のナップサック問題を解く。Table 1 では荷物を c_i/a_i (価値/重さ) の順に示した。同問題について、欲張り法 (greedy algorithm)⁹⁾ で求めた近似解および分枝限定法で求めた最適解を記載した。今回使用したナップサック問題は、ランダムに係数を生成した 30 荷物ナップサック問題から欲張り法では最適解が得られない問題を使用した。また、比較のために、エリート主義を導入した SGA も試みる。

適応度関数としてはナップサック問題の目的関数を用いるが、制約条件を満たさない致死遺伝子を持つ個体の適応度は 0 とした。TDGA では適応度関数のスケールングは行わず、その符合を反転した値をエネルギー E とする。また SGA では次式で表される線形スケールングを使用する。

$$F_{\text{new}} = \frac{A-B}{F_{\text{max}}-F_{\text{min}}} F_{\text{old}} + \frac{B \cdot F_{\text{max}} - A \cdot F_{\text{min}}}{F_{\text{max}}-F_{\text{min}}} \quad (20)$$

ここで F_{new} はスケールング後の適応度、 F_{old} はスケールング前の適応度、 F_{max} は現世代での最大適応度、 F_{min} は現世代での最小適応度を表す。 A, B は定数であり、ここでは $A=3, B=1$ とする。交叉には共に一様交叉を用い、SGA の交叉確率は 1 とする。また個体数は、適応度の評価回数を等しくするために、SGA では TDGA の 2 倍とする。なお、今回のシミュレーションでは、TDGA における温度については、この手法の温度依存性を明確にするために一定とし、 $T=10$ と $T=20$ の二つの場合について調べる。

各アルゴリズムについて突然変異率[†]および個体数を変化させて、それぞれの場合について乱数の初期値を変え

[†]2.2.4 は各個体ごとの突然変異率で記述したが、以下では各遺伝子座ごとの突然変異率で表す。

Table 1 The 30-item knapsack problem

$\max z = \sum_i c_i x_i$ sub. to $\sum_i a_i x_i \leq b, \quad x_i \in \{0, 1\}$															
i	1 ₊	2 ₊	3 ₊	4 ₊	5 ₊	6 ₊	7 ₊	8 ₊	9 ₊	10 ₊	11 ₊	12 ₊	13 ₊	14 ₊	15 ₊
c_i	75	84	58	21	55	95	28	76	88	53	58	81	32	89	54
a_i	7	9	13	5	16	28	15	43	60	37	44	63	34	95	61
i	16 ₊	17 ₊	18 ₊	19 ₊	20	21 ₊	22	23	24	25	26	27	28	29	30
c_i	23	42	52	58	53	30	26	40	40	26	39	25	23	16	12
a_i	29	57	72	83	84	48	45	74	78	52	79	64	64	55	74
$b = 744$ *:the optimal solution +:the solution by the greedy algorithm															

て各30回ずつ問題を解かせ、100世代以内に最適解を得た回数を調べる。

個体数をTDGAでは32、SGAでは64とし、突然変異率を変化させた場合の結果をFig.1に、個体数を変化させた場合の結果をFig.2に示す。後者では、突然変異率はFig.1で最も良い結果を出している値(TDGAでは0.02, SGAでは0.01)を使用する。

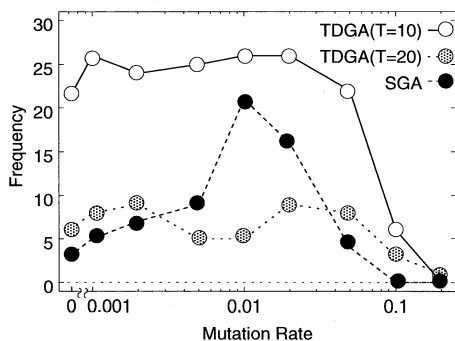


Fig. 1 Comparison of TDGA and SGA with various mutation rates

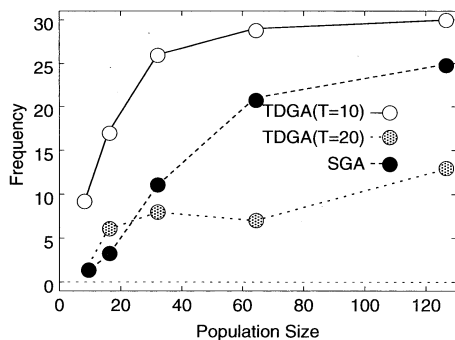


Fig. 2 Comparison of TDGA and SGA with various population sizes

また突然変異率が0.005、個体数32 (SGAでは64)の場合の探索の様子をFig.3~Fig.5に示す。各図の横軸は世代、縦軸は目的関数値を表す。このときの多様性の維持の様子を、各世代での遺伝子座ごとのエントロピーを用いてFig.6~Fig.8に示す。三つの軸はそれぞれ遺伝子座、世代およびエントロピーを表す。エントロピーは最大 $\log 2 = 0.693$ となる。

なお計算量に関しては、本研究で使用した30荷物ナップサック問題では、TDGAは適応度関数の評価を同程度の回数行うSGAに比べて約2.5倍のCPU時間を要した。これは、5.1で評価した計算量のうち、エントロピー等の評価に要する手間((19)式第2項)によるものである。ナップサック問題は適応度の評価に要する手間((19)式第1項の α)が比較的少ないためにTDGAとSGAの計算量の差が顕著に現れたものと考えられる。

6.2 考察

Fig.1より、TDGAではSGAに比べて突然変異率にあまり依存することなく最適解が得られていることがわかる。 $T=10$ のときは、SGAに比べてかなり良い結果を得ている。 $T=20$ のときには、その探索能力は最良の突然変異率を与えたSGAに比べ劣っている。これは、温度が高すぎるために多様性の維持に重点が置かれ、ランダムサーチに近い探索になっているためと考えられる。またFig.2より、 $T=10$ のときのTDGAがSGAに比べて少ない個体数でも探索能力が劣化しにくいことがわかる。

Fig.3およびFig.4から、TDGAでは温度が高い場合に最良値、平均値、最悪値の開きが大きくなっており、温度に応じて個体群の多様性が維持されていることがわかる。これに対してFig.5から、SGAでは目的関数値の平均値が最良値とほぼ同じになってしまい、多様性が失われていることがわかる。Fig.6~Fig.8は多様性の維持の様子をより明確に示している。TDGAでは半分以上の遺伝子座ごとのエントロピーが探索過程の後半まで高い状態であるのに対して、SGAでは遺伝子座ごとのエントロ

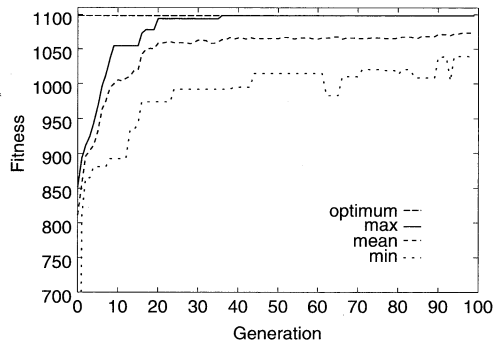
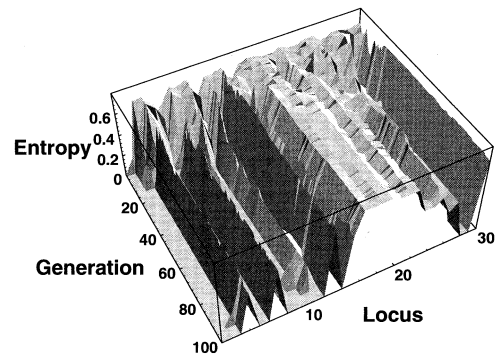
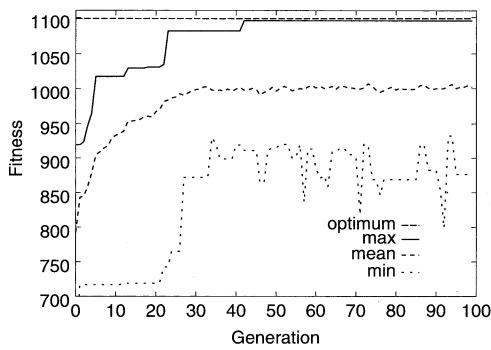
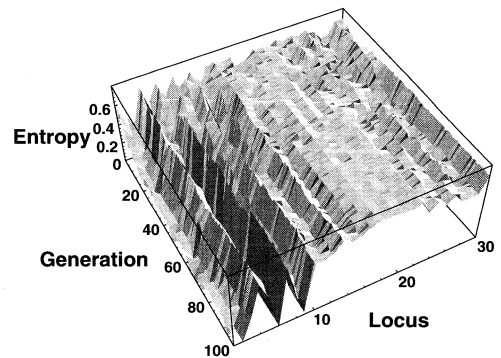
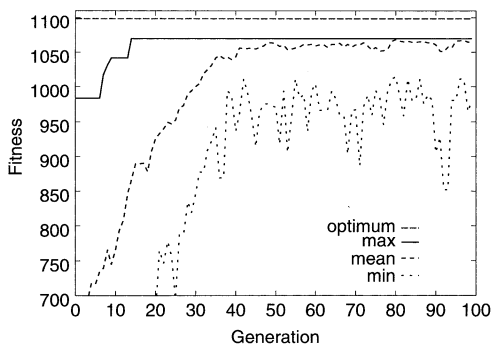

 Fig. 3 Search process of the TDGA ($T = 10$)

 Fig. 6 Variation of the entropy of each locus in case of the TDGA($T = 10$)

 Fig. 4 Search process of the TDGA ($T = 20$)

 Fig. 7 Variation of the entropy of each locus in case of the TDGA($T = 20$)


Fig. 5 Search process of the SGA

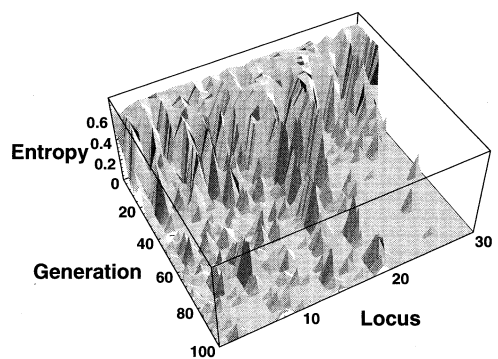


Fig. 8 Variation of the entropy of each locus in case of the SGA

ピーは探索が進むに従って急速に低下していることがわかる。また TDGA では、特に最適解の探索に重要な c_i/a_i が中程度の荷物に対応する遺伝子座で、多様性が維持されていることがわかる。さらに TDGA で、 $T=10$ とした場合 (Fig. 6) と $T=20$ とした場合 (Fig. 7) を比較すると、後者の方がエントロピーが全体に高いことがわかる。このことより、TDGA では温度パラメータ T により明示的に多様性の維持を調整できることが確認された。

7. おわりに

本論文では、熱力学的な評価基準に基づく選択法を導入した熱力学的遺伝アルゴリズム (TDGA) を提案した。TDGA は目的関数の最小化と多様性の維持の調整を系統的に行うことを目指したものであり、シミュレーションによってその効果を確認した。また、SGA との比較において、TDGA の方がより優れた探索能力を有することが示された。

本論文では、温度設定の効果を明確にするために温度 T を一定としてシミュレーションを行ったが、実用に際しては温度を徐々に下げるアニーリングの導入が望ましい。今後の検討課題としては、アニーリングのための適切な温度スケジューリング、非2進表現を用いる問題への適用、TDGA 収束への対策などが挙げられる。また TDGA により多様性が系統的に維持できることから、多目的問題や動的環境における最適化問題などへの応用についても検討していきたい。

最後に、本研究に際して貴重な御助言を頂いた京都大学大学院工学研究科玉置 久博士ならびに京都大学大学院工学研究科前川 聡氏に感謝の意を表します。

参考文献

- 1) J. H. Holland: *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, The University of Michigan Press (1975)
- 2) D. E. Goldberg: *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*, Addison-Wesley (1989)
- 3) 西川, 玉置: 近傍モデルによる遺伝アルゴリズムの並列化手法とそのジョブショップ・スケジューリング問題への応用; 計測自動制御学会論文集, Vol. 32, No. 1, pp. 589-595 (1993)
- 4) 市川, 石井: 遺伝子分布評価に基づく遺伝的アルゴリズムの多様性維持; 計測自動制御学会論文集, Vol. 30, No. 10, pp. 1242-1250 (1994)
- 5) S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt and M. P. Vecchi: Optimization by simulated annealing; *Science*, Vol. 220, pp. 671-680 (1983)
- 6) S. W. Mahfoud and D. E. Goldberg: A genetic algorithm for parallel simulated annealing; *Parallel Problem Solving from Nature*, Vol. 2, pp. 301-310 (1992)
- 7) A. Schultz: A multiple population Boltzmann machine; *Proc. ICEC*, pp. 368-373 (1994)
- 8) 深尾: 分散システム論, 昭晃堂 (1987)
- 9) 西川, 三宮, 茨木: 最適化, 岩波書店 (1982)
- 10) 森, 吉田, 喜多, 西川: 遺伝アルゴリズムにおける熱力学的選択ルールの提案; SICE 合同シンポジウム, pp. 227-230 (1994)
- 11) 森, 吉田, 喜多, 西川: 遺伝アルゴリズムにおける熱力学的選択ルールの提案-II; 第6回自律分散システムシンポジウム, pp. 209-214 (1995)