

単峰性正規分布交叉UNDXを用いた実数値GAによる関数最適化

A Real-Coded Genetic Algorithm for Function Optimization Using the Unimodal Normal Distribution Crossover

小野 功^{*1} 佐藤 浩^{*2} 小林 重信^{*3}
Isao Ono Hiroshi Satoh Shigenobu Kobayashi

- * 1 徳島大学工学部
Faculty of Engineering, University of Tokushima, Tokushima 770-8506, Japan.
- * 2 防衛大学校情報工学科
Department of Computer Science, National Defence Academy, Yokosuka 239-8686, Japan.
- * 3 東京工業大学大学院総合理工学研究科
Interdisciplinary Graduate School of Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology, Yokohama 226-8502, Japan.

1998年12月25日 受理

Keywords: real-coded genetic algorithms, function optimization, unimodal normal distribution crossover, epistasis among parameters, multimodal functions.

Summary

This paper presents a new genetic algorithm (GA) for function optimization, considering epistasis among parameters.

When a GA is applied to a function to minimize it, parents are expected to lie on some ponds or along some valleys that are promising areas because of selection pressure as the search goes on. Especially when the function has epistasis among parameters, it has valleys that are not parallel to coordinate axes. In this case, we believe that a crossover should generate children along the valleys in order to focus the search on such promising area from a view point of search efficiency.

We employ the real number vector as a representation and propose the Unimodal Normal Distribution Crossover (UNDX) taking account of epistasis among parameters. The UNDX generates children near the line segment connecting two parents so that the children lie on the valley where the two parents are when the UNDX is applied to a function with epistasis among parameters. We demonstrate that the UNDX can efficiently optimize various functions including multi-modal ones and ones that have epistasis among parameters by applying the UNDX to some famous benchmark functions.

1. はじめに

関数最適化は、しばしば実問題の中に現れる重要な最適化問題のひとつである。

遺伝的アルゴリズム (GA) の関数最適化への応用においては、従来、コード化/交叉の方法として、バイナリコーディングまたはグレイコーディングと、これらのコーディングの下での一点交叉、二点交叉、一様交叉を用いる方法が伝統的に採用されてきた。また、世代交代モデルとしては、Simple GA [Goldberg 89] を

はじめとする様々なモデルが提案され、前述のコード化/交叉とともに用いられてきた。しかし、これらのコード化/交叉に基づく GA では他の探索手法と比較して十分な解精度が得られないことが指摘されている [Davis 90]。

近年、実数ベクトルをコード化として用いたいいくつかの GA が提案されてきておりバイナリコーディング、グレイコーディングを用いたときよりも性能が上がったと報告されている [Davis 90, Eshelman 93, Jonikow 91, Michalewicz 92, Radcliffe 91, Wright 91]。これらの研究では、交叉は補助的に用いられている場合が

多く、突然変異が探索の主力となっている。その中で、BLX- α [Eshelman 93] は交叉のみで比較的良好な性能が得られたと報告されているが、変数間に依存関係のある関数に対して BLX- α を適用すると性能が落ちてしまう様子が観察される [Ono 96, Ono 97, Salomon 96].

本論文では、交叉を主探索オペレータとして考える。ある最適化すべき関数の形状が与えられたとき、その関数を表現する方法としては、座標系の取り方により様々な方法が考えられる。それにより、変数間の依存関係の強弱が変化する。変数間の依存関係が弱いときは独立に座標軸ごとに軸方向探索すればよいが、変数間の依存関係が強いときは最適解に到達するために座標軸に平行でない尾根や谷に沿って探索を進めなければならない場合が多く、軸方向探索が困難になる。しかし、特に実問題の場合、一般には、どの座標系を用いたら変数間の依存関係の弱い簡単な問題に帰着できるかはあらかじめ知ることができない。したがって、関数最適化における交叉は、座標系のとり方に関係なく適応的に探索を進められることが望ましい。

本論文の目的は、変数間の依存関係を考慮したコード化/交叉を提案し、その有効性を明らかにすることにある。2章では、問題設定を行い、既存研究について説明する。ここでは、特に、交叉を主探索オペレータとしたとき比較的良好な性能を得ている BLX- α について詳しく紹介し、その問題点を指摘する。3章では、BLX- α のもつ問題点を克服した実数ベクトル/単峰性正規分布交叉 (Unimodal Normal Distribution Crossover; UNDX) を提案する。4章では、多様性維持を考慮した世代交代モデルを設計する。5章では、単峰性が多峰性かの観点および変数間の依存関係の有無の観点からベンチマーク問題を6つ用意し、それらへの適用を通じて提案手法の有効性を実験的に示す。6章は考察であり、7章では結論と今後の課題について述べる。

2. 問題設定および既存研究

2.1 問題設定

最適化の対象とされる関数を特徴づける性質はさまざまある。その中で、局所解の数および変数間の依存関係は関数最適化においてしばしば注目される性質である。

局所解の数が1つの場合が単峰性関数、複数の場合が多峰性関数であり、一般に多峰性関数の方が最適化が困難である。多峰性関数最適化は局所探索に基づく従来法では困難である。これに対し、確率的多点探索を特徴とする GA は多峰性関数最適化を得意としている。

変数間の依存関係がない場合を線形関数、ある場合を非線形関数とよび、一般に非線形関数の方が最適化が困難である。単峰性かつ非線形な関数の最適化の研究の歴史は古く、Simplex 法 [Nelder 65] など強力な方法が提案されており、現在広く使われている。一方、GA においては、非線形関数は単峰の場合でさえ、よい結果が得られないことが報告されている [Ono 96, Ono 97, Salomon 96].

本研究では、多峰性および非線形性の強い関数を最適化の対象とする。

2.2 既存研究とその問題点

[1] Bit-string GA

関数最適化において伝統的に広く用いられてきたコード化/交叉はビットストリング上で定義されたバイナリコーディングおよびグレイコーディングと、その上で定義された一点交叉、二点交叉、一様交叉である。しかし、これらの手法を用いた場合、大域的探索能力には優れるものの、最終的に得られる解の精度が得られないことが指摘されている [Davis 90]. そのため、解の精度を上げるために局所探索法と組み合わせる用いられることが多いが、その場合、局所探索法におけるステップサイズをどのように決めるかが問題となる。

GA において選択は表現型空間において行われる。そのため、探索の進行とともに悪い領域に存在する個体は徐々に淘汰され、探索の中盤から終盤においては、集団中の個体は表現型空間である実数空間においていくつかの比較的希望な領域に集まってくると考えられる。このプロセスは探索空間のランドスケープをサンプリングにより見積もりながら、探索しても見込みのない領域を切り捨て、より希望な領域を発見していくプロセスと見ることができる。ここで、交叉により新しい個体を生成することを考えると、選択の過程においてより有望と判断された領域、すなわち表現型空間において現在の集団中の個体が存在している領域の近傍のみを重点的に探索することが、探索の効率の観点から望ましいと考えられる。

しかし、バイナリコーディングにより定義される遺伝子型空間の位相構造は、表現型空間である実数空間の位相構造とは大きく異なる。そのため、バイナリコーディング上で定義された一点交叉、二点交叉および一様交叉を表現型空間において互いに近い2つの親個体に対して適用しても、子個体は両親の近傍に生成されるとは限らない。したがって、探索の中盤から終盤において、これらの交叉は選択により発見された有望な領域を重点的に探索することが出来ず、探索に無

駄が生じると考えられる。

一方、グレイコーディングにおいては、隣接する数のハミング距離が1になるように作られている。そのため、グレイコーディングにより定義される遺伝子空間の位相構造は、バイナリコーディングによるものよりも表現型空間の位相構造に近いと考えられる。実際、グレイコーディングを用いることにより、バイナリコーディングを用いたときよりも性能が上がったという報告もある [Caruana 88]。しかし、隣接しない数については保証の限りではないので、やはりグレイコーディング上で定義される一点交叉、二点交叉、一様交叉についても、バイナリコーディング上のものと同様に、探索効率の観点から問題があると考えられる。

〔2〕 Real-coded GA

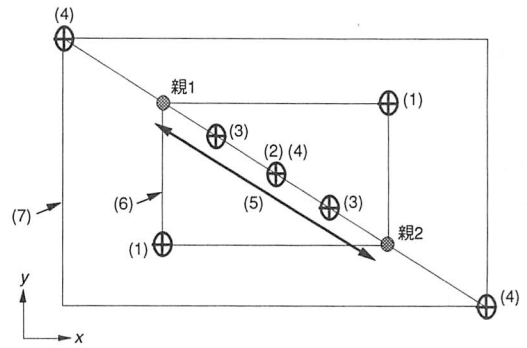
バイナリコーディングとグレイコーディングにおいて遺伝子型空間と表現型空間の位相構造が違いすぎるとの反省と、Evolution Strategy (ES) のコミュニティからの影響もあり、近年、実数ベクトルをコード化の方法として採用し、その上で交叉方法を実装した実数値 GA が提案されている。[Davis 90, Eshelman 93, Jonikow 91, Michalewicz 92, Mühlenbein 93, Radcliffe 91, Voigt 95, Wright 91] などがそれである。その他、ES のコミュニティにおいても Recombination という呼び名でいくつかの交叉が提案されている [Schwefel 81]。2変数の場合、これらの既存の実数ベクトル上の交叉により生成される子個体の位置についてまとめたものを図1に示す。このうち、BLX- α [Eshelman 93], Extended Intermediate Recombination [Mühlenbein 93], Fuzzy Recombination [Voigt 95] は他の補助手段によらず比較的良い結果が得られる。これに対し、その他の交叉は、有限個の集団サイズからなる初期集団からは、交叉のみでは全空間中の点を生成できないため、突然変異が併用して用いられる。以下では、BLX- α について説明し、その問題点を指摘する。

BLX- α は、両親の実数ベクトルの各変数の区間 I を両側に αI だけ拡張した区間から一様乱数に従ってランダムに子を生成する。すなわち、両親の周辺の各辺が軸に平行な超直方体の領域においてランダムサーチを行う。

$$c_{1i}, c_{2i} = u(\min(p_{1i}, p_{2i}) - \alpha I_i, \max(p_{1i}, p_{2i}) + \alpha I_i)$$

$$I_i = |p_{1i} - p_{2i}|$$

ここで、 $\vec{P}_1 = (p_{11}, \dots, p_{1n})$ と $\vec{P}_2 = (p_{21}, \dots, p_{2n})$ は両親、 $\vec{C}_1 = (c_{11}, \dots, c_{1n})$ と $\vec{C}_2 = (c_{21}, \dots, c_{2n})$ は



- (1) Discrete Recombination [Schwefel 81], Real Crossover [Wright 91], Simple Crossover [Janikow 91], [Michalewicz 92]
- (2) Intermediate Recombination [Schwefel 81], Average Crossover [Davis 90]
- (3) Arithmetical Crossover [Janikow 91], [Michalewicz 92]
- (4) Linear Crossover [Wright 91]
- (5) Random Intermediate Recombination [Schwefel 81]
- (6) Global Random Intermediate Recombination [Schwefel 81], Flat Crossover [Radcliffe 90]
- (7) Extended Intermediate Recombination [Mühlenbein 93], BLX- α [Eshelman 93], Fuzzy Recombination [Voigt 95]

図1 Real-coded GA の交叉

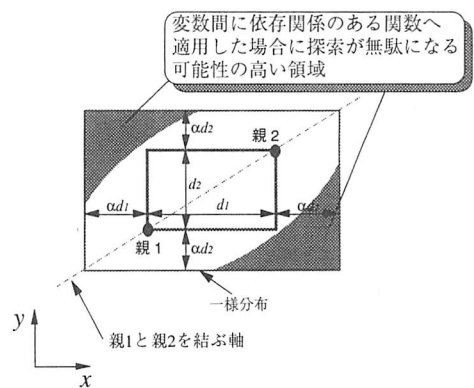


図2 BLX- α (2変数の場合)

子、 $u(x, y)$ は区間 $[x, y]$ の一様乱数を表す。2次元の場合を図2に示す。

BLX- α は両親が表現型空間で離れて存在している場合、子個体はやはり表現型空間において広い範囲に生成され、両親が互いに近くに存在している場合、子個体は両親の近傍の狭い範囲に生成される特徴を持つ。この特徴により、ビットストリング GA に比べ、探索の中盤から終盤における探索効率が向上すると考えられる。実際に、実験的にもビットストリング GA に比べ性能の向上が見られる。

しかし、変数間に依存関係がある関数に BLX- α を適用すると、極端に性能が落ちることが報告されている [Ono 96, Salomon 96]。これは、BLX- α が座標系の取

り方に強く依存した交叉方法となっており、変数間の依存関係を全く考慮していないことが原因であると考えられる。変数間に依存関係がある関数に GA を適用すると、探索の中盤から終盤にかけて集団中の個体は、有望な領域、すなわち座標軸に平行でない谷（ここでは最小化を考える）に集まってくるものと考えられる。この場合、探索の効率の観点から、谷に沿って子個体を生成することが望ましいと考えられる。しかし、BLX- α は座標軸ごとに独立にランダムサーチを行うため、両親が存在しない頂点付近の領域に生成された子個体は大きく谷から踏み外してしまい、探索に無駄が生じる。両親の存在しない頂点の数は次元が高くなるにつれて急激に増加することから、この傾向は次元の増加とともに顕著になると考えられる。

3. 変数間の依存関係を考慮した UNDX の提案

3・1 関数最適化におけるコード化/交叉の要件

本節では、両親が与えられたとき、交叉によりどのような子個体を作ることが、探索効率の観点から望ましいかについて考察する。

関数最適化問題に GA を適用すると、集団には選択圧がかかっているため、探索の進行とともに悪い領域に存在する個体は徐々に淘汰され、探索の中盤から終盤においては、集団中の個体は表現型空間である実数空間において、あるいくつかの比較的有望な領域に位置するはずであり、さらに良い領域がその付近に広がっている可能性が高いと考えられる。したがって、交叉により生成される子個体は、現在の集団の分布からそれほど外れないことが望ましいと考えられる。

さらに変数間に依存関係がある関数に GA を適用することを考える。変数間に依存関係のある関数においては、同時に複数の変数を変化させないと関数値を改善できない。これより、図形的にみると、最小化の場合、有望な領域が座標軸に並行でない谷を形成していると考えられる。この場合、探索の中盤から終盤にかけて集団中の個体は、有望な領域、すなわち座標軸に平行でない谷に集まってくるものと考えられ、探索の効率の観点から、この谷に沿って子個体を生成することが望ましい。

以上の議論に基づき、次節では、変数間の依存関係を考慮した新しいコード化/交叉を提案する。

3・2 単峰性正規分布交叉 (UNDX)

関数最適化におけるコード化としては、バイナリ

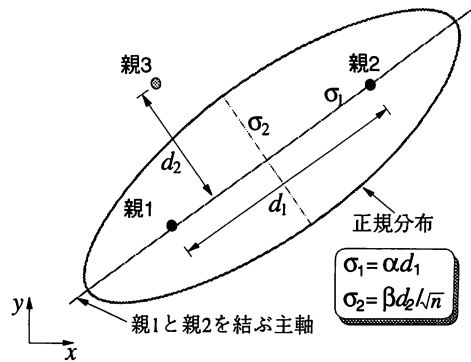


図3 単峰性正規分布交叉 (UNDX) (2変数の場合)

コーディング、グレイコーディング、実数ベクトルが提案されている。バイナリコーディング、グレイコーディングは表現型空間と遺伝子型空間の位相構造が大きく異なるのに対し、実数ベクトルは表現型空間と遺伝子型空間の位相構造が一致していることから、前節で議論した交叉を実現しやすい。そこで、本論文では、実数ベクトルをコード化として採用する。

交叉方法としては、単峰性正規分布交叉 (Unimodal Normal Distribution Crossover; UNDX) を提案する。UNDX は、図3に示すように、3つの親によって決まる正規乱数を用いて2つの子を生成する。基本的には子は2つの親を結ぶ線分の周辺に正規分布に従って生成され、第3番目の親は正規分布の標準偏差を決めるために補助的に用いられる。正規分布の標準偏差は、その主軸成分、すなわち両親を結ぶ方向の成分は両親間の距離に比例させ、それ以外の軸の成分は、第三の親と両親を結ぶ直線との距離に比例させる。ここで、主軸以外の標準偏差に $1/\sqrt{n}$ (n : 次元数) をかけることにより、次元が増加しても両親を結ぶ軸から大きく外れることなく子を生成できるようにしている [Kita 98]。

$$\vec{C}_1 = \vec{m} + z_1 \vec{e}_1 + \sum_{k=2}^n z_k \vec{e}_k$$

$$\vec{C}_2 = \vec{m} - z_1 \vec{e}_1 - \sum_{k=2}^n z_k \vec{e}_k$$

$$\vec{m} = (\vec{P}_1 + \vec{P}_2)/2$$

$$z_1 \sim N(0, \sigma_1^2), \quad z_k \sim N(0, \sigma_2^2), \quad (k = 2, \dots, n)$$

$$\sigma_1 = \alpha d_1, \quad \sigma_2 = \beta d_2 / \sqrt{n}$$

$$\vec{e}_1 = (\vec{P}_2 - \vec{P}_1) / |\vec{P}_2 - \vec{P}_1|$$

$$\vec{e}_i \perp \vec{e}_j, \quad (i \neq j), \quad (i, j = 1, \dots, n)$$

ここで n は次元数、 \vec{P}_1, \vec{P}_2 は両親、 \vec{C}_1, \vec{C}_2 は子、 d_1 は両親間の距離、 d_2 は第三の親と両親を結ぶ軸と

の距離, \vec{e}_1 は両親を結ぶ軸方向の単位ベクトル, $z_1 \sim N(0, \sigma_1^2)$ と $z_k \sim N(0, \sigma_k^2)$, ($k = 2, \dots, n$) は正規乱数を表す. α, β はユーザーが与える定数である. また, \vec{e}_i ($i = 2, \dots, n$) は \vec{e}_1 に垂直かつ線形独立な単位ベクトルで, 任意の線形独立なベクトル集合からグラムシュミットの直交化法により求められる.

3・3 UNDX の特徴

UNDX は, 両親が表現型空間において離れて存在している場合には子を表現型空間において広い範囲に生成し, 両親が近くに存在している場合には子を両親に近い狭い範囲に生成する. コード化の際にあらかじめ決められた座標軸ではなく, 両親を結ぶ軸の周辺に正規分布に従って子を生成することから, 両親を結ぶ軸から遠く離れた子を生成する確率は低い. したがって, 変数間に依存関係がある関数, すなわち最適解へ続く座標軸に並行でない尾根または谷をもつ関数の最適化においても, 尾根または谷に沿って子を生成することにより効率よく探索を進められると考えられる.

UNDX を用いた GA は, 探索の初期の段階では探索空間の広い範囲を探索し, 中盤から終盤においては最適解がありそうな部分空間において, 生成する子の分布を現在探索している部分空間のランドスケープに適応的に変形させながら, 効率的に探索を行う能力を持っていると考えられる.

Evolution Strategy (ES) [Rechenberg 73] では, 突然変異が探索の主な推進力であるが, UNDX と同じように親の周辺に子を正規分布に従うように生成する. ES においても, 座標軸へ依存度が低い突然変異の方法として, 正規分布の軸を座標軸に対して傾ける Corelated Mutation [Schwefel 81] が提案されている. ES では正規分布の標準偏差や軸の傾きの角度などの進化パラメータは, 座標ベクトルとともに個体にコード化されており突然変異によりその値を適応させているが, UNDX は, 親の分布に従ってこれらの進化パラメータを適応させている点に特徴がある.

4. 解法の構成

本章では, 提案したコード化/交叉を用いて関数最適化のための遺伝的アルゴリズムを設計する.

UNDX は, 有望な領域が, 選択により正しく発見されていることを仮定している. 特に, 多峰性関数の場合, 十分に集団の多様性を保つことにより, 探索空間のランドスケープを十分に見積もりながら, 徐々に有望でない領域を切り捨てていく必要があり, 多様性

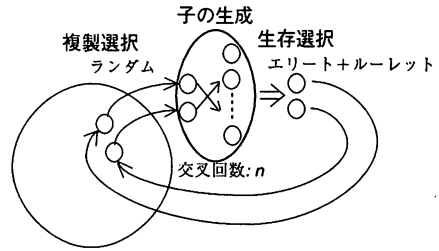


図4 世代交代モデル

維持に優れた世代交代モデルと組み合わせることが, UNDX の性能を引き出す鍵となる.

本論文では, 図4に示す世代交代モデルを採用する. これは, 多様性維持に優れたことが示されている MGG モデル [Sato 96, 佐藤 97] に基づいている. この世代交代モデルでは, 集団の多様性維持の観点から, 両親は集団からランダムに選ばれ, 世代交代は局所的に行われる. また, 両親の存在する領域のランドスケープを正しく見積もるため, 交叉を複数回適用して1ペアの親から複数個の子を生成する.

本研究で提案する関数最適化のための GA の手順を以下に示す:

- (1) 初期集団の生成
ランダムに複数個の実数ベクトルを生成し, それを初期集団とする.
- (2) 複製選択
集団からランダムに交叉のための2つの親を選択する.
- (3) 子の生成
ステップ2で選択された両親に対し, 交叉 UNDX を n_c 回適用し, 子を $2n_c$ 個生成する. ここで, UNDX において正規分布の標準偏差を決めるための第3の親は集団からランダムに選ばれ, 参照される.
- (4) 生存選択
両親と生成された全ての子を合わせた個体集合から2個体を選択し, 集団中の両親と置き換える. ここで選択される個体は, 最良個体, および最良個体を除いた残りの個体集合からランクに基づくルーレット選択により選ばれた個体である.
- (5) ある停止条件が満たされるまで, ステップ2からステップ4を繰り返す.

5. 実験および結果

5・1 実験の目的および計画

提案した実数ベクトル/UNDX の有効性を確認する

ためにいくつかのベンチマーク問題において BLX- α との比較実験を行った。

ベンチマーク問題としては、単峰性が多峰性かの観点、および変数間の依存関係の有無の観点から、Sphere 関数、Rastrigin 関数、Schwefel 関数、Rosenbrock 関数、Rotated Rastrigin 関数、Rotated Schwefel 関数の 6 種類の問題を用意した。前者 3 つの関数は変数間に依存関係がなく、後者 3 つの関数は変数間に依存関係を持つ。Sphere 関数と Rosenbrock 関数は単峰性関数であり、残りの関数は多峰性関数である。変数間に依存関係のない多峰性関数である Rastrigin 関数と Schwefel 関数の相違点は、最適解が探索空間の中央に位置しているか、端に位置しているかという点である。また、Rotated Rastrigin 関数および Rotated Schwefel 関数は、それぞれ Rastrigin 関数と Schwefel 関数を適当に回転させることにより、変数間に依存関係を導入したものである。

本実験はコード化/交叉に注目した実験であるので、突然変異は除外しており、その他の条件についてはすべて揃えてある。以下の実験では、予備実験により、UNDX の α を 0.5、 β を 0.35、交叉回数 n_c を 100 とし、各コード化/交叉ごとに 10 試行ずつ行っている。集団サイズは、単峰性関数においては 50、多峰性関数においては 300 とした。BLX- α の α は Eshelman らが用いている 0.5 とした [Eshelman 93]。

5・2 変数間に依存関係がない関数の最適化

単峰性関数である 20 次元 Sphere 関数と多峰性関数である 20 次元 Original Rastrigin 関数、10 次元 Original Schwefel 関数をベンチマーク問題として用いた。

Sphere 関数は次式で表される。

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n x_i^2$$

$$-5.12 < x_i < 5.12, n = 20$$

この関数は、座標 $(0, \dots, 0)$ で最小値 0 をとる。2 変数の場合の等高線図を図 5(a) に示す。各試行の集団内の最良値の平均の収束曲線を図 5(b) に示す。

Original Rastrigin 関数は次式で表される。

$$f(x_1, \dots, x_n) = 10n + \sum_{i=1}^n [x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)]$$

$$-5.12 < x_i < 5.12, n = 20$$

この関数は、座標 $(0, \dots, 0)$ で最小値 0 をとる。2 変数の場合の等高線図を図 5(c) に示す。各試行の集団内の

最良値の平均の収束曲線を図 5(d) に示す。

Original Schwefel 関数は次式で表される。

$$f(x_1, \dots, x_n) = 418.9828873n$$

$$+ \sum_{i=1}^n x_i \sin \sqrt{|x_i|}$$

$$-512 < x_i < 512, n = 10$$

この関数は、座標 $(-420.968746, \dots, -420.968746)$ で最小値 0 をとる。2 変数の場合の等高線図を図 5(e) に示す。各試行の集団内の最良値の平均の収束曲線を図 5(f) に示す。

変数の依存関係のない関数においては、BLX- α 、UNDX とともに、良好な性能を示すことがわかる。

5・3 変数間に依存関係がある関数の最適化

単峰性関数である 20 次元の Rosenbrock 関数と多峰性関数である 20 次元の Rotated Rastrigin 関数、10 次元の Rotated Schwefel 関数をベンチマーク問題として用いた。

Rosenbrock 関数は次式で表される。

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=2}^n [100(x_1 - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2]$$

$$-2.048 < x_i < 2.048, n = 20$$

この関数は、座標 $(1, \dots, 1)$ で最小値 0 をとる。2 変数の場合の等高線図を図 6(a) に示す。各試行の集団内の最良値の平均の収束曲線を図 6(b) に示す。

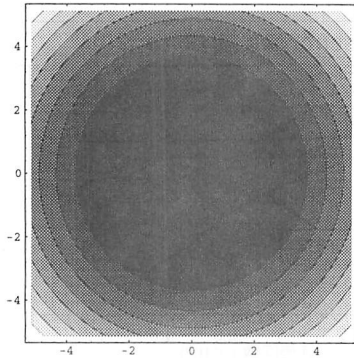
Rotated Rastrigin 関数は、5・1 節の Rosenbrock 関数を原点の中心にして回転させて作った関数である。2 変数の場合の等高線図を図 6(c) に示す。各試行の集団内の最良値の平均の収束曲線を図 6(d) に示す。

Rotated Schwefel 関数は、5・1 節の Schwefel 関数を、原点を中心にして適当に回転させて作った関数である。2 変数の場合の等高線図を図 6(e) に示す。各試行の集団内の最良値の平均の収束曲線を図 6(f) に示す。

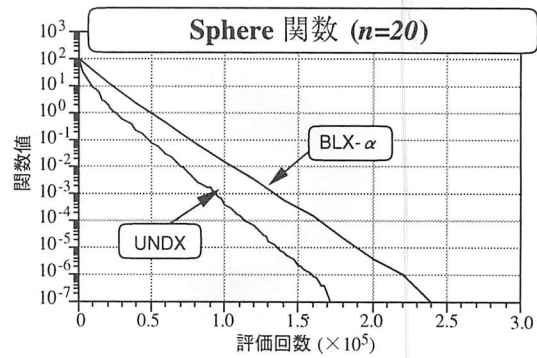
変数間に依存関係がある関数では、BLX- α の性能が極端に落ち、UNDX のみが良好な結果を示している。多峰性関数の Rotated Rastrigin 関数と Rotated Schwefel 関数においては、5・1 節の回転する前の関数の時と UNDX の性能がほとんど変わっていないことがわかる。

6. 考 察

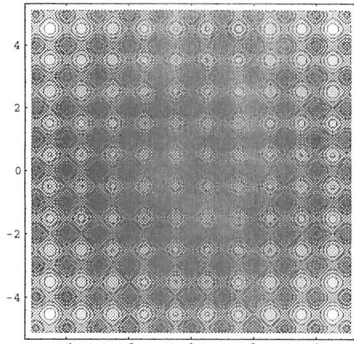
図 4、図 5 より、UNDX は、Schwefel 関数よりも Rastrigin 関数において、より速く最適解を発見でき



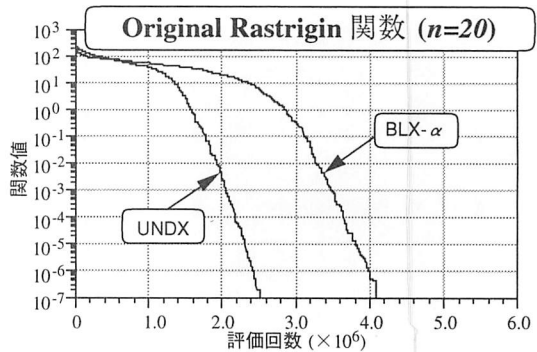
(a) Sphere関数の等高線図



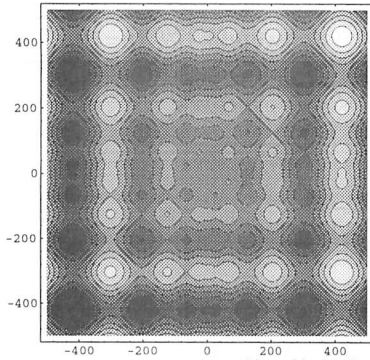
(b) Sphere関数における収束曲線



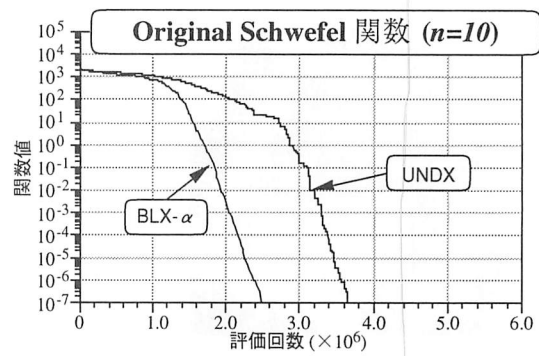
(c) Original Rastrigin関数の等高線図



(d) Original Rastrigin関数における収束曲線



(e) Original Schwefel関数の等高線図



(f) Original Schwefel関数における収束曲線

図5 変数間に依存関係のない関数への適用

ていることがわかる。これは、有界な探索空間において一様に親集団が分布している場合、UNDXによって生成される子集団の分布密度が探索空間の中心部分の方が相対的に高くなり、中心部分の方がよりよくサンプリングされるためと考えられる。

図7に、2変数のRosenbrock関数に実数ベクトル/BLX-α、実数ベクトル/UNDXを適用した場合、各コード化/交叉が1回の探索中に全世代を通じて生成した全ての個体を平面上にプロットしたものを示す。Rosenbrock関数は最適解へ続く急峻な放物線上の谷を

持つため、効率よく探索するためには、この谷に沿って探索を進める必要がある。BLX-αは谷の周辺に広く子を生じさせてしまっているため、無駄な探索がかなり多くなってしまっている。それに対して、UNDXは谷に沿って子を生じさせており、効率的な探索を行うことができています。

図8は、2変数のOriginal Rastrigin関数とRotated Rastrigin関数に、実数ベクトル/BLX-αと実数ベクトル/UNDXを適用した場合、それぞれが全世代を通じて生成した全ての個体を平面上にプロットし、最適解

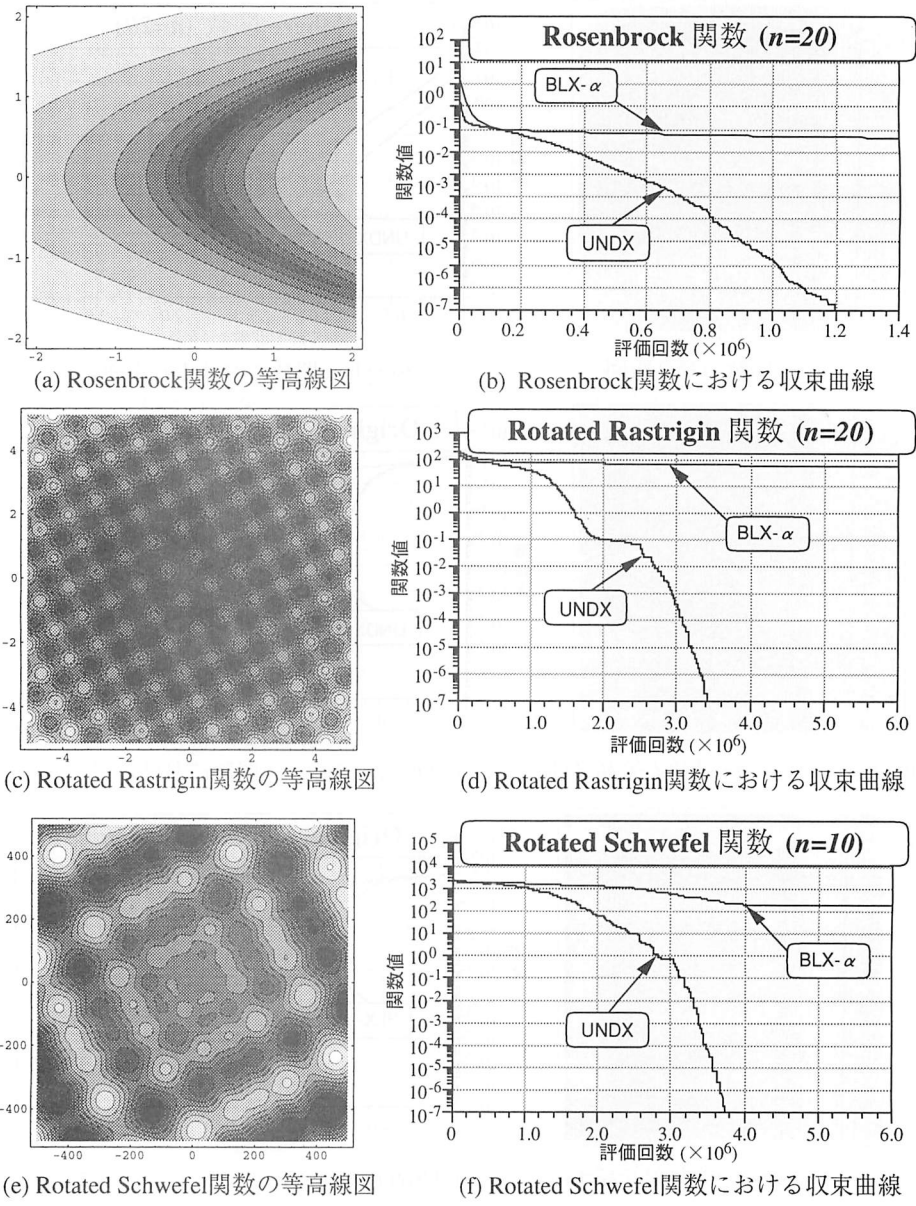


図6 変数間に依存関係のある関数への適用

である原点付近を拡大したものである。図中の格子点は局所解を示し、中心点が最適解を示す。BLX- α は、変数間の依存関係がない Original Rastrigin 関数においては、適応度の高い格子点にそって探索を進めることができているが、変数間の依存関係がある Rotated Rastrigin 関数においては、最適解付近を重点的に探索できているものの、格子点とは関係のないところを探索しており無駄な探索が増えている。これは、たんに回転変換をほどこしただけでも、変数間に依存関係が出てくるような座標系を取った場合、BLX- α

は効率の良い探索ができなくなることを示している。一方、UNDX は、Original Rastrigin 関数、Rotated Rastrigin 関数の両関数において適応度の高い格子点にそって探索を進めることができている。Schwefel 関数の場合も同様である。

UNDX は、変数間に依存関係がある関数においても、単峰性、多峰性にかかわらず、関数のランドスケープに適応しながら効率的に探索できている。

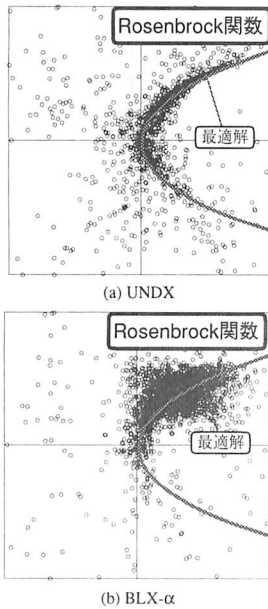


図7 Rosenbrock関数(2変数)において全世代を通じて生成された個体の分布

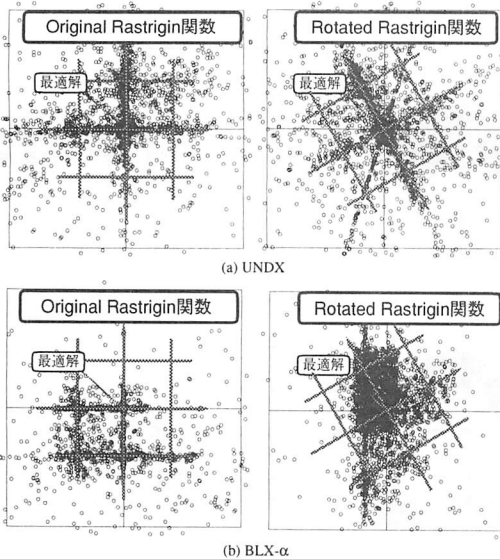


図8 Rastrigin関数(2変数)において全世代を通じて生成された個体の分布

7. おわりに

本論文では、変数間の依存関係を考慮したコード化/交叉である実数ベクトル/単峰性正規分布交叉(UNDX)を提案した。提案手法においては、変数間に依存関係のある関数にGAを適用すると集団が有望な領域である谷の上に集団が集まってくることに着目し、両親を

結ぶ直線を主軸とする正規分布にしたがって子を生成する。これにより、UNDXは谷から大きく外れることなく子を生成できる。単峰か多峰かの観点、変数間の依存関係の有無の観点からいくつかの有名なベンチマーク問題を用意し、それらへ提案手法を適用することにより、提案手法の有効性を示した。提案手法は、変数間に依存関係がある関数においても、単峰性、多峰性にかかわらず、関数のランドスケープに適応しながら効率的に探索できていることを確認した。

座標軸ごとに大きくスケールが異なると、探索の序盤において、UNDXは実行可能領域以外の子を生成する確率が高く、探索効率が大きく落ちるという欠点を持つため、改良が望まれる。また、関数最適化において重要な制約条件の取扱についても今後の課題である。関数最適化は様々な実問題の中に現れることから、今後は実問題への適用を通じてその有効性を確認していく予定である。現在、実際に提案手法を困難な設計問題として知られるレンズ設計問題への適用を行い、良好な結果を得つつある。変数間に依存関係が存在し、かつ多峰性の評価関数を持つため従来法では接近が困難であり、専門家の勘と経験のみが頼りになっているその他の領域へも積極的に応用していきたいと考えている。

謝辞

UNDXの実装にあたり、アルゴリズムの高速化に御協力頂いた東京工業大学大学院総合理工学研究科の喜多一助教授に感謝の意を表します。

◇ 参考文献 ◇

- [Bäck 91] Bäck, T., Hoffmeister, F. and Schewfel, H.-P.: A Survey of Evolution Strategies, Proc. Fourth Int. Conf. on Genetic Algorithms, pp. 2-9 (1991).
- [Davis 90] Davis, L.: The Handbook of Genetic Algorithms, Van Nostrand Reinhold, New York (1990).
- [Eshelman 90] Eshelman, L. J.: The CHC Adaptive Search Algorithm: How to Have Safe Search When Engaging in Nontraditional Genetic Recombination, Foundations of Genetic Algorithms, pp. 265-283 (1990).
- [Eshelman 93] Eshelman, L. J. and Schaffer, J. D.: Real-Coded Genetic Algorithms and Interval-Schemata, Foundations of Genetic Algorithms, 2, pp. 187-202 (1993).
- [Goldberg 89] Goldberg, D. E.: Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning, Addison-Wesley Publishing Company Inc. (1989).
- [Jonikow 91] Jonikow, C. Z. and Michalewicz, Z.: An Experimental Comparison of Binary and Floating Point Representations in Genetic Algorithms, Proc. Forth Int. Conf. on Genetic Algorithms, pp. 31-36 (1991).
- [Kita 98] Kita, H., Ono, I. and Kobayashi, S.: Theoretical Analysis of the Unimodal Normal Distribution Crossover for Real-coded Genetic Algorithms, Proc.

- 1998 IEEE Int. Conf. on Evolutionary Computation, pp. 529-534 (1998).
- [Michalewicz 92] Michalewicz, Z.: Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs, Springer-Verlag, Berlin (1992).
- [Mühlenbein 93] Mühlenbein, H. and Schlierkamp-Voosen, D.: Predictive Models for the Breeder Genetic Algorithm I. Continuous Parameter Optimization, Evolutionary Computation, Vol. 1, pp. 25-49 (1993).
- [Nelder 65] Nelder, J.A. and Mead, R.: A Simplex Method for Function Minimization, Computer J., Vol. 7, pp. 308-313 (1965).
- [Ono 96] Ono, I., Yamamura, M. and Kobayashi, S.: A Genetic Algorithm with Characteristic Preservation for Function Optimization, Proceedings of IIZUKA '96, pp. 511-514 (1996).
- [Ono 97] Ono, I. and Kobayashi, S.: A Real-coded Genetic Algorithm for Function Optimization Using Unimodal Normal Distribution Crossover, Proc. 7th Int. Conf. on Genetic Algorithms, pp. 246-253 (1997).
- [Radcliffe 91] Radcliffe, N. J.: Forma Analysis and Random Resectful Recombination, Proc. Forth Int. Conf. on Genetic Algorithms, pp. 222-229 (1991).
- [Rechenberg 73] Rechenberg, I.: Evolutionsstrategie: Optimierung technischer Systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution, Frommann-Holzboog Verlag, Stuttgart (1973).
- [Rudolph 92] Rudolph, G.: On Correlated Mutations in Evolution Strategies, Parallel Problem Solving from Nature, 2, pp. 105-114 (1992).
- [Salomon 96] Salomon, R.: Performance Degradation of Genetic Algorithms Under Coordinate Rotation, Proceedings of the 5th Annual Conference on Evolutionary Programming, pp. 155-161 (1996).
- [佐藤 97] 佐藤, 小野, 小林: 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, 人工知能学会誌, Vol. 12, No. 5, pp. 734-744 (1997).
- [Schwefel 81] Schwefel, H.-P.: Numerical optimization of computer models, Wiley, Chichester (1981).
- [Schwefel 95] Schwefel, H.-P.: Evolution and Optimum Seeking, John Wiley & Sons, Inc. (1995).
- [Satoh 96] Satoh, H., Yamamura, M. and Kobayashi, S.: Minimal Generation Gap Model for GAs Considering Both Exploration and Exploitation, Proceedings of IIZUKA '96, pp. 494-497 (1996).
- [Voigt 95] Voigt, H.-M., Mühlenbein, H. and Gvetkovic, D.: Fuzzy Recombination for the Breeder Genetic Algorithm, Proc. 6th Int. Conf. on Genetic Algorithms, pp. 104-111 (1995).
- [Whitley 89] Whitley, D., Starkweather, T. and Fuauay, D.: Scheduling Problems and Traveling Salesman: The Genetic Edge Recombination Operator, Proc. third Int. Conf. on Genetic Algorithms, pp. 133-140 (1989).
- [Wright 91] Wright, A.: Genetic Algorithms for Real Parameter Optimization, Foundations of Genetic Algorithms, pp. 205-218 (1991).

[担当委員: 阿久津達也]

◇ 付 録 ◇

[UNDX の実装と計算量]

UNDX の実装においては, 両親 \vec{P}_1, \vec{P}_2 を結ぶ軸方向以外は分布が等方的であることに着目して, 以下のようなアルゴリズムにより子 \vec{C}_1, \vec{C}_2 を生成している。

- (1) $\vec{t} = (t_1, \dots, t_n)$ を生成する。ここで, $t_i \sim N(0, \sigma_i^2)$, $\sigma_2 = \beta d_2 / \sqrt{n}$, d_2 は第 3 の親 \vec{P}_3 と両親 \vec{P}_1, \vec{P}_2 を結ぶ軸との距離, n は次元数, β は定数である。
- (2) \vec{t} から両親を結ぶ軸方向の成分を引く。

$$\vec{t} \leftarrow \vec{t} - (\vec{t} \cdot \vec{e}_1) \vec{e}_1$$
 ここで, \vec{e}_1 は両親を結ぶ軸方向の単位ベクトル $(\vec{P}_1 - \vec{P}_2) / |\vec{P}_1 - \vec{P}_2|$ である。
- (3) 正規分布 $N(0, \sigma_1^2)$, $\sigma_1 = \alpha d_1$ に従い, 両親を結ぶ軸方向の成分の大きさ s を求め, $s\vec{e}_1$ を \vec{t} に加える。ここで, d_1 は両親間の距離 $|\vec{P}_1 - \vec{P}_2|$, α は定数である。

$$\vec{t} \leftarrow \vec{t} + s\vec{e}_1, s \sim N(0, \sigma_1^2)$$
- (4) 上で求めた \vec{t} を用い, 子 \vec{C}_1, \vec{C}_2 を求める。

$$\vec{C}_1 = (\vec{P}_1 + \vec{P}_2)/2 + \vec{t}, \vec{C}_2 = (\vec{P}_1 + \vec{P}_2)/2 - \vec{t}$$
 本実装において, 子を求める計算量のオーダーは $O(n)$ であり, BLX- α の定数倍である。

[Rotated functions を生成する方法]

本論文では, 関数形を回転させるかわりに, 交叉により生成された子ベクトル $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$ を以下の式に従い変換した $\vec{x}' = (x'_1, \dots, x'_n)$ を Original functions に代入し, その値を Rotated functions の関数値として用いている。

$$\begin{pmatrix} x'_i \\ x'_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_k & -\sin\theta_k \\ \sin\theta_k & \cos\theta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ x_j \end{pmatrix},$$

$$i, j = 1, \dots, n, i \neq j, k = 1, \dots, n(n-1)/2$$

ここで, n は次元数, θ_k はあらかじめ $[-2\pi, 2\pi]$ の範囲でランダムに生成した角度である。

—— 著 者 紹 介 ——



小野 功 (正会員)

1994 年 3 月, 東京工業大学工学部制御工学科卒業。1997 年 9 月, 同大学大学院総合理工学研究科知能科学専攻博士後期課程修了。博士 (工学)。同年 10 月, 同大学大学院総合理工学研究科リサーチ・アソシエート。1998 年 4 月, 徳島大学工学部助手。同年 12 月, 同大学工学部講師。現在に至る。主に進化型計算の研究に従事。システム制御情報学会, 日本光学会各会員。<isao@is.tokushima-u.ac.jp>



佐藤 浩 (正会員)

1992 年 3 月, 慶應義塾大学理工学部物理科卒業。1997 年 3 月, 東京工業大学大学院総合理工学研究科知能科学専攻博士後期課程修了。博士 (工学)。同年 4 月, 大阪府立大学総合科学部数理・情報科学科助手。1999 年 4 月, 防衛大学校情報工学教室助手, 現在に至る。人工知能, 進化型計算の研究に従事。ファジィ学会会員。<hsato@cc.nda.ac.jp>



小林 重信 (正会員)

1974 年東京工業大学大学院博士課程経営工学専攻修了。同年 4 月, 同大学工学部制御工学科助手。1981 年 8 月, 同大学大学院総合理工学研究科助教授。1990 年 8 月, 教授。現在に至る。問題解決と推論制御, 知識獲得と学習などの研究に従事。計測自動制御学会, 情報処理学会各会員。

<kobayasi@dis.titech.ac.jp>