直交計画で初期化する遺伝的アルゴリズム

田中 秀俊
三菱電機（株）情報技術総合研究所

1. はじめに

遺伝的アルゴリズム (GA) のうち遺伝子に 0 もしくは 1 の 2 値をとるものと, 直交計画法のうち因子が 0 と 1 の 2 水準をとるものは, どちらも遺伝子や水準の組合せの評価値を最適化するという共通目的と, パラメータが 2 値という共通問題設定を持つ. 手法は対称的で, GA はパラメータ間相互作用の強い部分を探索し, 直交計画法はパラメータ間相互作用が弱い時に有効である.

2 値 GA では, 探索空間の点を 2 進数やグレーコードで 2 値エンコードした個体を多数用意し, それらの交叉, 突然変異, 選択の遺伝的操作によって探索を行う. 一方, 同様に探索空間の点を 2 値エンコードしたものについて, 以下のような反復的に直交計画法を適用する探索法, 反復直交計画法 (ODA)[1] を考えることができる. 各桁を 2 水準の因子とみなし, 直交計画の各実験に従って点を選択する. 直交計画法に従って, 水準決定可能な因子と不確定な因子とを決める. 決定可能な因子は水準を決定し, 不確定な因子についてのみ, 再度, 直交計画法で水準決定を試みる.

因子間相互作用の一切ない問題では, ODA の性能は 2 値 GA を上回る. ODA では, 所定数の実験を 1 セット行うだけで全因子の水準が定まるが, 2 値 GA では, 求解に要する実験数は確率的に決まり, 1 世代すなわち個体数だけのモンテカルロ法で解が求まるケースは稀である. 一方, GA は相互作用を交叉によって効率よく探索するが, 相互作用する因子数が多すぎる場合には性能が劣化し, ランダム突然変異山登り法 (RMHC) に劣ることもある [2, 3]. この性能劣化は, 良いスキーマにくっついた悪いスキーマをスキーマの一部と誤認する, ヒッチハイキング現象と考えられる.

以上から, GA が有効な問題の範囲は相互作用の適度にある問題で, 相互作用が強い場合には RMHC などのランダム探索, 相互作用がほとんどない問題では ODA など直交計画法を用いる方法が有効との仮説が考えられる. この仮説の検証過程の 1 つとして, ODA と RMHC とを用いてロイヤルロード関数を対象に比較評価したところ, 相互作用の強い場合には RMHC の効率がよく, 相互作用のない場合には直交計画法 1 回でほぼ決まるため, 直交計画法を反復する効果は認められなかった. そこで, 直交計画法を 1 回実施して RMHC の初期値を決める方法を試したところ, 効果が認められた [4]. これをふまえ, 本稿では GA の初期値を直交計画法で決める方法について, 乱数で初期値を決める方法と比較評価した結果を報告する.

2. 方式

本稿で用いる GA は, 2 値をとる遺伝子が直列に L 個並んだ個体 N 本に対し, 交叉, 突然変異, 選択の 3 種類の遺伝的操作を施していく, 一般的な GA である. 各個体の L 個の遺伝子は n 個の変数の値をグレーコードで表現し, 交叉は 1 点交叉で交叉率 0.95, 突然変異は 1 点突然変異で突然変異率 0.002, 選択は 2 個体毎のトーナメント選択, 世代ギャップ 1.0 としている. 以上の値は, 予備実験として後述のベンチマーク問題を用い, 良い遺伝子操作パラメータを探索し, 決定した. 本稿ではその詳細は省略する.

一方 OD は, まず 2 水準 L 因子 N 組の実験からなる直交計画を作成する. この L 個の因子は, n 個の変数の値をグレーコード表現したものになっている. 第 i 実験第 j 因子の値 e_{ij} は, 式 (1) で表される. ここで q は L の 2 進数表現での桁数, $\hat{j} = c(j)$ は 0 を除く $2^q - 1$ 個の因子 $\hat{j}$ と j のランダムな 1 対 1 の割り当て, $g(i, s)$ は i の 2 進表現の第 s 桁をそれぞれ表す. 直交計画に従って実験毎の評価値を得た後, 各因子で 2 水準の評価値の平均を比較し, 良い水準を選択する. ODA では決定可能因子と不確定因子を分けたが, 初期値決定に用いる場合には 1 回限りの実施としたため, 全部決定可能因子とし, 平均が少しでも良い水準を選択するようにしている.

$$e_{ij} = \mathrm{mod}_2 \sum_{s=1}^{q} g(i,s)g(c(j),s); (2^{q-1} \le L < 2^q) \qquad (1)$$

OD で GA を初期化する際には, OD で求めた水準を全個体の遺伝子としている. こうすると, 第 1 世代では突然変異のみ有効となる. 乱数で GA を初期化する際には, 521 次の原始多項式に基づく M 系列乱数を用いている.

3. 数値実験

ベンチマークに用いた数式は以下の 3 つで, 順に Rastrigin 関数, Rosenbrock 関数, Schwefel 関数と呼ばれるものである. いずれも $-512 < x_i < 511, x_i \in I$ の範囲を L/n 桁のグレーコードで表現して探索を行う. 最小値は $F1, F2$ が 0, $F3$ はグレーコード 10 桁で探索する場合およそ $-419n$ である.

$$F1(x) = 10n + \sum_{i=1}^{n} (\frac{x_i}{100})^2 - 10\cos(2\pi \frac{x_i}{100}) \qquad (2)$$

$$F2(x) = \sum_{i=1}^{n/2} (1 - \frac{x_{2i-1}}{100})^2 + 100(\frac{x_{2i}}{100} - (\frac{x_{2i-1}}{100})^2)^2 \qquad (3)$$

$$F3(x) = \sum_{i=1}^{n} -\frac{x_i}{100} \sin\sqrt{\frac{|x_i|}{100}} \qquad (4)$$

GA の染色体数と OD の実験数はともに N, 遺伝子数および因子数は L, 変数の数は n とする. 直交計画法による初期値と乱数による初期値を用い, $N/L/n$ が 128/100/10 および 256/250/25 のとき, 1000 世代実行して得られた最小値, 併せて () 内に最小値到達世代を表 1に示す. 直交計画の列が直交計画法による初期値を, 乱数開始の列が乱

Orthogonal Design Experiment-initialized GA
TANAKA Hidetoshi, Mitsubishi Electric Corp.

数による初期値を，それぞれ表す．いずれも乱数種を変えて 24 回試行した平均値である．

表 1: 比較実験

$N/L/n$	128/100/10		256/250/25	
	直交計画	乱数開始	直交計画	乱数開始
$F1$	8.2592	9.3114	30.601	27.833
	(686)	(728)	(813)	(822)
$F2$	6.9378	7.8718	35.703	33.883
	(763)	(715)	(894)	(894)
$F3$	−4184.2	−4184.3	−9535.6	−9469.7
	(638)	(767)	(916)	(939)

表 1に示すように，128/100/10 はどれも 700 世代程度，256/250/25 では $F1$ で 800 世代，$F2$ で 900 世代 $F3$ で 920 〜 940 世代に得た最小値が 1000 世代打ち切りまで続いている．このように収束は問題に依存し，初期化方式で比較すると乱数開始の方が遅くまで改善される傾向が見られる．

性能を比較すると，128/100/10 のときには,$F1$，$F2$ で OD 初期化が勝り，$F3$ ではほぼ同等という結果が得られた．しかし 256/250/25 のときには，$F1$，$F2$ で乱数初期化が勝り，$F3$ では逆に OD 初期化が勝るという結果が得られた．

参考として，表 2において，直交計画を初期個体として用いた結果を直交開始の列に，乱数で作成した計画で各因子の水準を決め，それを初期値として用いた結果を乱数計画の列に，それぞれ示す．これらも乱数種を変えて 24 回試行した平均値である．

表 2: 参考

$N/L/n$	128/100/10		256/250/25	
	直交開始	乱数計画	直交開始	乱数計画
$F1$	8.1318	9.1997	23.664	29.294
	(673)	(683)	(860)	(824)
$F2$	7.4779	7.2628	17.210	32.937
	(710)	(725)	(946)	(906)
$F3$	−4182.4	−4182.8	−9751.1	−9761.3
	(763)	(736)	(921)	(920)

表 2に示すように，128/100/10，256/250/25 とも収束状況は表 1の傾向と同じである．性能を表 1と比較すると，128/100/10 のときには，乱数開始より直交開始，乱数計画より直交計画と言える．しかし 256/250/25 のときには，乱数開始より直交開始は同じだが，直交計画より乱数計画という結果である．最も性能の良かったのは直交開始だった．

4. 考察

2 値 GA では，元の探索空間である n 次元空間に代えて，各変数で範囲を限定し，その範囲を固定桁数のグレーコード表現で作成した L 次元ハイパーキューブ内を探索する．そのメリットのひとつは，各探索点の近傍点を増やし，元の n 次元探索空間における遠方の点を数多く加えることで，局所解を減らしてしまう点にあると考えられる．n 次元空間では，1 変数だけを増減する 1 変数近傍は $2n$ 個，これに対する L 次元の 1 点突然変異の近傍は，グレーコード表現とすると 1 変数近傍 $2n$ 個に加えて遠方点 $L-2n$ 個，1 点交叉の近傍は，単純に他の $N-1$ 個体と実施すると考えても遠方の $N-1$ 個，これはもっと大きな近傍の母集団から良い近傍にバイアスされて選ばれた $N-1$ 個と解釈すべきだろう．

2 値 GA を OD で開始する場合は，上記の局所解削減の性質に加え，周期性によって生じる局所解を回避する機能が加わっていると考えられる．n 変数を L 個の遺伝子でグレーコード表現したものに OD を施す処理は，各変数の各桁が，その桁以外がどうであろうと平均的に，0 がいいか 1 がいいかを決めることであって，これは変数毎の周期性を観察していることに相当する．$F1$ と $F3$ は周期関数 cos や sin を用いて元の n 変数空間での局所解を作り出している問題である．これらの問題における性能は，問題の周期とグレーコード表現の周期との一致に原因を求めることも考えられる．

問題の規模によって OD 初期化と乱数初期化の優劣に差が見られるが傾向は見られない．これは，乱数によって個体のバリエーションを保持する効果と，良い個体を揃える効果とのトレードオフが発生している可能性がある．

5. まとめと課題

2 値遺伝的アルゴリズムの直交計画法による初期化は，乱数による初期化と比較して，良い場合と悪い場合があり，それは対象となる問題の種類とサイズに依存するという結果になっている．次の課題として，直交計画法による初期化を一部の個体にとどめ，乱数によって初期化した個体との混在を検討する．

参考文献

[1] Tanaka, H. A Comparative Study of Genetic Algorithms and Orthogonal Experimental Designs. In ICEC 96: (1996).

[2] Mitchell, M., Holland, J.H. and Forrest, S. When will a genetic algorithm outperform hill climbing? In Ad-vances in Neural Information Processing Systems 6. (1994).

[3] Mitchell, M. An Introduction to Genetic Algorithms. MIT Press. (1996). 伊庭監訳，遺伝的アルゴリズムの方法. 東京電機大学出版局. (1997).

[4] 田中. 直交計画法の反復利用とロイヤルロード関数における評価. 第 59 回情処全国大会 3K-01. (1999).